

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE
SCIENTIFIQUE
Université M'HAMED BOUGARA BOUMERDES



Faculté de TECHNOLOGIE
Département Génie Mécanique

Mémoire de Master

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

Filière : Génie mécanique

Spécialité : Installations énergétiques et turbomachines

THEME

Etude numérique des mécanismes réactionnels des flammes
prémélangées pour un bruleur a faible nombre de swirl

Présenté par :

Mr. HASSANI Hocine

Promoteur:

Mr. S. OUALI

2019/2020

Remerciements

Je remercie le bon Dieu, le tout puissant, de m'avoir guidé, d'avoir illuminé ma voie, les portes du savoir et de m'avoir donné le courage et la volonté d'élaborer ce travail.

Je tiens à remercier particulièrement mes parents mon succès demeure de loin le fruit de leurs longues années de sacrifices et d'éducation.

A l'ensemble du corps professoral de la faculté des sciences et de l'ingénieur de l'université M'HAMED BOUGARA BOUMERDES pour la richesse et la qualité de son enseignement.

Je tiens à remercier très sincèrement mon promoteur Dr OUALI Sofiane pour son assistance permanente, ses encouragements, son

Attention et le temps qu'il a consacré pour le déroulement de cette noble mission. C'est grâce à son savoir scientifique que ce travail a pu être effectué et vu le jour.

Nous remercions vont à tous ceux qui ont participé de près ou de loin à la réalisation de ce modeste travail.

En fin, nos remerciements s'adressent aussi aux membres du jury pour avoir accepté de juger ce modeste travail.

Dédicaces

Louange à ALLAH, à qui appartient tout ce qui est dans les cieus et tout ce qui est sur terre. Louange à lui dans l'au-delà, c'est lui le sage, le parfaitement connaisseur. Je dédie ce modeste travail à:

- A mes très chers parents qui ont été toujours près de moi tout au long de mes études, qui ont su me donner un magnifique modèle de labeur et de persévérance et cela, grâce à leurs hautes compétences du savoir-faire et du savoir-vivre. J'espère qu'ils trouveront dans ce travail toute ma reconnaissance et tout mon amour.

- Et a tous les gens que j'aime et qui me connaissent, à tous ceux qui m'ont apporté aide et assistance de près ou de loin.

RESUME :

Ce mémoire s'inscrit dans le cadre de recherches portées sur la simulation numérique des mécanismes réactionnels des flammes prémélangées méthane/air pour un brûleur à faible nombre de swirl LSB (Low Swirl Burner). Le bec du brûleur a un rayon de 25 mm et se compose de deux parties distinctes ; la plaque perforée axiale d'un rayon de 15 mm où l'écoulement du prémélange réactif est purement axiale et de l'espace annulaire swirlé (10 mm) où l'écoulement du mélange réactif est swirlé.

L'étude s'est portée sur l'effet des mécanismes réactionnels GRI-Mech1.2, GRI-Mech2.11 et GRI-Mech3.0, pour une richesse pauvre $\Phi = 0.6$ et Le nombre de swirl est constante S est 0.5. Le but est de tester les différentes versions proposé par le Gas Research Institute (GRI).

La simulation numérique a été effectuée en 2D ou l'effet de ces mécanismes et leur influence sur la structure de la flamme ; les champs de vitesse, température, la distribution du méthane (CH_4) et la formation des polluants (NO_x et CO). La turbulence a été prise en considération en utilisant le modèle RANS (Reynolds Average Navier–Stokes) $k-\varepsilon$ STANDARD. Tandis que la combustion a été étudié en utilisant le modèles ; Partially-Premixed.

Mots clés : brûleurs à faible nombre de swirl, GRI-Mech, NO_x , Turbulence

ABSTRACT

This work is part of a numerical simulation of the reaction mechanisms of premixed methane/air flames for a Low Swirl Burner (LSB). The burner nozzle has a radius of 25 mm and is composed of two distinct parts; the axial perforated plate with a radius of 15 mm where the flow of the reactive premix is purely axial and the swirled annular space (10 mm) where the flow of the reactive mixture is swirled.

The study investigated the effect of the reaction mechanisms GRI-Mech1.2, GRI-Mech2.11 and GRI-Mech3.0 for poor wealth $\Phi = 0.6$ and The swirl number is constant S is 0.5. The goal

is to test the different versions proposed by the Gas Research Institute (GRI)

Numerical simulation was realized in 2D where the effect of these mechanisms and their influence on the structure of the flame; the fields of velocity, temperature, the distribution of methane (CH₄) and the formation of pollutants (NO_x and CO). Turbulence was taken into consideration using the RANS (Reynolds Average Navier-Stokes) model k-ε STANDARD. While combustion was studied using the model; Partially-Premixed.

Keywords : Low Swirl , GRI-Mech, NO_x,

Nomenclatures

Lettres latines

c	[-]	Variable d'avancement de la réaction
\bar{c}	[-]	Variable d'avancement de la réaction moyenne
C_p	[J/kgK]	Capacité calorifique à pression constante
C_v	[J/kgK]	Capacité calorifique à volume constant
D	[m]	Diamètre du bec du bruleur=50mm
D_h	[m]	Diamètre hydraulique
D_K	[-]	Coefficient de diffusion de l'espèce k
F	[m/s ²]	Force de volume
G_φ	[N.m]	Débit du moment cinétique angulaire
G_x	[N]	Débit de quantité de mouvement axiale
h_t	[J.kg ⁻¹]	Enthalpie totale
$h_{s,k}$	[J/kg]	Enthalpie sensible de l'espèce k
I	[%]	Intensité turbulente
k	[m ² /s ²]	Énergie cinétique turbulente
m_k	[kg]	Masse de l'espèce k
m	[kg]	Masse totale du gaz
N	[-]	Nombre d'espèces
P	[Pa]	Pression statique
P_r	[-]	Nombre de Prandtl
P_{rt}	[-]	Nombre de Prandtl turbulent
\dot{Q}	[J/(m ³ s)]	Source de chaleur
Re	[-]	Nombre de Reynolds
r	[m]	Composante de direction radiale
S	[-]	Nombre de swirl
Sch_t	[-]	Nombre de Schmidt turbulent
T	[K]	Température
t	[s]	Temps

U_t	[m/s]	Vitesse de flamme turbulente
u	[m/s]	Composante axiale de vitesse
w	[m/s]	Composante tangentielle de vitesse
V_{ax}	[m/s]	Composante de vitesse axiale
V_s	[m/s]	Composante de vitesse tangentielle
V_0	[m/s]	Vitesse d'entrée moyenne
$V_{k,i}$	[m/s]	Vitesse de diffusion de l'espèce k dans la direction i
W	[kg/mol]	Masse moléculaire
x	[m]	Composante de direction axiale
Y	[-]	Fraction massique
i,j		Axes de directions

Lettres grecques

ε	[m ² /s ³]	Taux de dissipation de la turbulence
λ	[W/mK]	Conductivité thermique
μ	[Kg/ms]	Viscosité dynamique
μ_t	[Kg/ms]	Viscosité turbulente
ν	[m ² /s]	Viscosité cinématique
ρ	[Kg/m ³]	Masse volumique du fluide
τ_{ij}	[N/m ²]	Tenseur des forces visqueuses
Φ	[-]	Richesse du mélange en CH ₄
\mathfrak{R}	[Kg/m ² s]	Flux de diffusivité moléculaire
σ_{ij}	[N/m ²]	Tenseur de la contrainte
δ_{ij}	[-]	Delta de Krönecér (=1 si $i=j$, =0 sinon)
$\dot{\omega}_k$	[mole/m ³ s]	Taux de production de l'espèce k
$\dot{\omega}_T$	[J/m ³ s]	Taux de dégagement de chaleur due à la combustion

Abréviations

BML	Bray Moss libby model
CFD	Computaional fluid dynamics
CFM	Modèle de flammes cohérentes
CRZ	Central recirculation zone

CTRZ	Central toroidal recirculation zone
CPIV	Conditioned particle image velocimetry
EBU	Eddy break-up
EDM	Eddy dissipation model
FGM	Flamelet generated manifolds
DNS	Direct numerical simulation
GRI	Gaz reserchs institute
HSB	High swirl burner
HSI	High swirl injector
ISP	Intermediate steady propagation flames
LDV	Laser doppler velocimetry
LES	Large Eddy simulation
LSI	Low swirl injector
LSB	Low swirl burner
PDF	Probability density function
PIV	Particles images velocimetry
PLIF	Planar laser induced fluorensence
ppm	Particules par millions
PVC	Processing vortex core
RANS	Reynolds average Navier-Stokes
TFC	Turbulent flame closure

Table des matières

Introduction générale

CHAPITRE I : ETUDE BIBLIOGRAPHIQUE

I.1. introduction	1
I.2. Etude bibliographiques des recherches portées sur la flamme enrichi en hydrogène	2
I.3. Conclusion.....	13

CHAPITRE II : ANALYSE ET MODELISATION

Introduction	14
II.2 Cinétique chimique et combustion.....	15
II.2.1 Eléments de cinétique	15
II.2.2 Les écoulements réactifs	17
II. 2.2.1 Les différents types de flammes	17
II.3. Les écoulements swirlés	18
II.4. Hypothèses et formule mathématique	19
II.5. Modélisation de la turbulence.....	23
II.5.1. Modèle de fermeture du premier ordre RANS – $k \epsilon$ STANDARD	23
II.6. Modélisation de la combustion	24
II.6.1. Le modèle EDM (Eddy Dissipation Model)	24
II.6.2. Le modèle Partially Premixed	25
II.6.2.1. Le modelé de Zimont.....	25
II.6.3. Modèle NOx thermique.....	26
II.7. Mécanisme réactionnel	27
II.7.1. Mécanisme réactionnel détaillés.....	27
II.7.1.1 GRI-mech	28
Conclusion :.....	31

CHAPITRE III : PROCEDUR NUMERIQUE

Introduction.....	32
III.3.2. Description de la configuration.....	33
III.3.3. Géométrie et maillage.....	33

III.3.3.1. Configuration 2D.....	33
III.3.3.2. Maillage et calcul.....	34
III.3.4. Conditions aux limites et opérateurs.....	35
III. 3.5. Paramètres de l'analyse des mécanismes réactionnels.....	38
III. 3.5.1. Critères de convergence.....	38
Conclusion.....	39

CHAPITRE IV : RESULTATS ET DISCUSSIONS

Introduction.....	40
IV.2. Validation	41
IV.2.1. Validation des profils de températures.....	41
IV.2.2. Validation de la distribution du CH ₄	41
IV.2.3. Validation des profils de vitesses axiales.....	43
IV.3. L'effet des mécanismes réactionnels (GRI-Mech).....	44
IV.3.1. L'effet des mécanismes réactionnels GRI-Mech sur la température.....	44
IV.3.2. Effet des mécanismes réactionnels GRI-Mech sur la vitesse.....	47
IV.3.3. Effet des mécanismes réactionnels GRI-Mech sur la distribution du CH ₄	49
IV.3.4. Effet des mécanismes réactionnels sur l'apparition du CO.....	51
IV.3.5. Effet des mécanismes réactionnels sur l'apparition du CO ₂	54
IV.3.6. Effet des mécanismes réactionnels sur l'apparition du NO _x	56
Conclusion	58
Conclusion générale	59

Références

Listes des figures

- Figure.I.1. Le maillage utilisé pour la simulation numérique
- Figure.I.2. Champ de dégagement de chaleur sur le Plan de coupe central (champs moyens)
- Figure.I.3. Schéma de la chambre de combustion avec le brûleur à fente
- Figure.I.4. Low swirl injector (LSI)
- Figure.I.5. Schéma représentatif du brûleur
- Figure.I.6. (a) schéma du brûleur à swirl (b) photo de la partie supérieure du brûleur
- Figure 3.1 structure 2D du brûleur
- Figure 3.2 structure de maillage 2D
- Figure 3.3 Température sur l'axe du brûleur 2D pour différents nombres de nœuds
- Figure 3.3 Température sur l'axe du brûleur 2D pour différents nombres de nœuds.
- Figure3.4 Conditions aux limites sur la structure 2D.
- Figure.3.5. Courbe de convergence du cas de simulation 2D
- Figure 4.1. Validation des profils de température sur l'axe du brûleur
- Figure.4.2. Validation des profils de distribution du CH_4 pour les différentes sections
- Figure.4.3 Validation des profils de vitesses axiales pour différentes sections
- Figure 4.4 effet des mécanismes réactionnel sur les profils la température sur l'axe du brûleur
- Figure 4.5. (Zoom) Effet des mécanismes réactionnels sur le profil de température
- Figure 4.6. Contours de température (k) des espèces chimique sur l'axe du brûleur pour les
Différentes versions de la GRI-Mech
- Figure 4.7. Effet des mécanismes réactionnels GRI-Mech sur la vitesse
- Figure 4.8. Contours des vitesses axiales (m/s) des espèces chimiques pour les différentes
Versions de la GRI-Mech
- Figure 4.9. Effet des mécanismes réactionnels GRI-Mech sur la distribution du CH_4
- Figure 4.10. (Zoom) Effet des mécanismes réactionnels sur la distribution du CH_4
- Figure 4.11. Contours de fraction massique du CH_4 pour les différentes versions de GRI-Mech
- Figure 4.12. Effet des mécanismes réactionnels sur l'apparition du CO
- Figure 4.13. (Zoom) Effet des mécanismes réactionnels sur l'apparition du CO
- Figure 4.14. Contours de distribution du CO pour les différentes versions de la GRI-Mech
- Figure 4.15. Effet des mécanismes réactionnels sur l'apparition du CO_2
- Figure 4.16. (Zoom) Effet des mécanismes réactionnels sur l'apparition du CO_2
- Figure 4.17. Contours de distribution du CO_2 sur l'axe du brûleur pour différentes versions
de GRI- Mech
- Figure 4.18. Effet des mécanismes réactionnels sur l'apparition des NO_x sur l'axe de brûleur

Figure 4.19. Contours des fractions massiques d'émissions polluants NO pour les différentes versions de GRI-Mech

Liste des tableaux

Tableau. 1 Conditions aux limites à l'entrée d'air.

Tableau. 2 Conditions aux limites sur la Plaque perforée

Tableau.3 Conditions aux limites sur L'espace annulaire swirlé

Tableau 4. Résidus imposés pour l'étude de simulation numérique

Introduction général

La consommation mondiale de l'énergie garde sa tendance ascendante actuelle et que les émissions de CO₂ qui en découlent s'accroîtraient de plus en plus, ou encore, si les pays en voie de développement acquièrent les mêmes habitudes énergivores que ceux des pays industrialisés. Alors, il faudra s'attendre à des bouleversements climatiques majeurs et surtout à des conflits militaires de grandes envergures dans un proche avenir.

La combustion est encore aujourd'hui l'un des principaux moyens de production d'énergie, que ce soit pour les transports aériens, spatiaux, routiers ou pour la production d'électricité. La plus grande partie de cette énergie est issue de combustibles fossiles dont les ressources sont limitées. Par ailleurs, la combustion de ces hydrocarbures entraîne la production d'espèces polluantes pour l'environnement, à l'échelle locale mais aussi planétaire (destruction de la couche d'ozone par les oxydes d'azote et réchauffement global par le dioxyde de carbone). Dans ce cadre général les industriels du secteur de l'énergie et des transports cherchent à perfectionner les procédés de combustion dans le but de réduire leur consommation en combustible et limiter leur production d'espèces polluantes.

Le développement des mécanismes réactionnels des systèmes complexes de combustion nécessite d'habitude a effectué des études approfondies pour comprendre le comportement des espèces chimique en se servant des modèles qui utilisant un mécanisme capable de prédire toutes les espèces. Le mécanisme d'oxydation de méthane est à la base des mécanismes détaillés pour le gaz naturel et pour d'autres hydrocarbures supérieurs. Dans ce mémoire, le travail est centré principalement sur l'élaboration d'un mécanisme réactionnel (cinétique) capable de rendre compte de la combustion du méthane, on a effectué plusieurs tests des mécanismes réactionnels détaillé de GRI-Mech proposé par le Gas Research Institute (GRI). Le but de ces tests est de montré la capacité de chaque version et son effet sur température, vitesse de chaque réaction et d'étudier ainsi leur influence sur la formation et la consommation d'une espèce.

Le travail est divisé en quatre chapitres :

Le premier chapitre : Etude bibliographiques

Le deuxième chapitre : Analyse et modélisation.

Le troisième chapitre : Procédure numérique

Le quatrième chapitre : Résultats et discussion.

Chapitre I : Étude bibliographique

I.1. Introduction :

Dans ce chapitre on va présenter quelques études bibliographiques des travaux portés sur les flammes prémélangées turbulentes de méthane-air stabilisées par swirl. Elle se diverse par rapport aux recherches expérimentales. Le but de ce chapitre est de décrire les paramètres utilisé sur ce type de flammes et les différentes techniques de stabilisation des flammes et le comportement des flammes en régime pauvre. L'objectif principal de la simulation numérique est de proposer des combinaisons de modèles capables de prédire correctement les phénomènes étudiés. Les études élaborées sur les structures LSB n'ont pas encore atteint une combinaison parfaite des modèles de combustions et de turbulence. D'autre part, Les différentes techniques de mesures qui servent de bases de données de validation sont aussi prises en considération.

Ce qui suit est une brève présentation de différents articles présentés par l'ensemble des chercheurs

I.2. Etude bibliographiques des recherches portées sur la flamme enrichi en hydrogène

Behzad Rohani. et al (2012).

Ils ont étudié expérimentalement l'effet de l'ajout d'hydrogène sur la température et les émissions polluantes de la flamme de méthane/air turbulente, non confinée et tourbillonnante dans un brûleur. La flamme laminaire stable et les modèles de combustion et de turbulence $k-\epsilon$ sont utilisés respectivement, Le pourcentage d'hydrogène ajouté dans le flux de carburant est modélisé de 0 % à 50 % du débit volumétrique du carburant. Les résultats montrent qu'avec l'augmentation du pourcentage volumétrique d'hydrogène dans le flux de carburant, La structure de la flamme change considérablement, sa longueur est légèrement allongée, puis raccourcie. On observe qu'avec 10% d'hydrogène le champ d'écoulement de la flamme change en raison de modification de la densité, cependant les changements correspondants aux caractéristiques de combustion restent insignifiants. La production totale de NO est augmentée par l'ajout d'hydrogène. Toutefois, la région dans laquelle il est produit devient quelques fois plus petit et cela le rend adapté aux techniques locales de réduction du NO. [1]

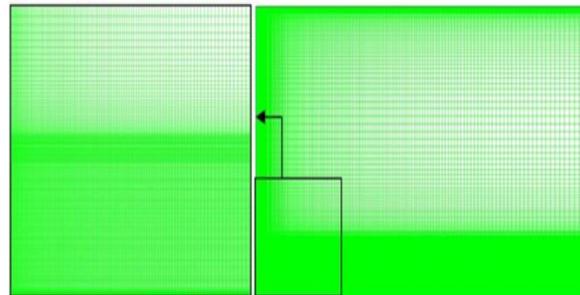


Figure.I.1. Le maillage utilisé pour la simulation numérique

Mark S. Sweeney. et autres (2012).

Ils ont présentés une étude expérimentale sur la structure des flammes turbulentes stratifiées et prémélangée de méthane/air stabilisées dans un brûleur à swirl. Les conditions sont prises en compte, en faisant varier systématiquement le niveau de stratification et de tourbillon tout en maintenant un rapport d'équivalence global moyen de $\phi = 0,75$, Les données scalaires sont obtenues à partir des mesures de lignes laser Rayleigh/Raman/CO (CO-LIF), ce qui permet de déterminer le comportement des espèces de combustion dans le front de flamme instantané. La fonction de densité de surface tridimensionnelle correspondante et le taux de dissipation thermique scalaire sont étudiés, ainsi que les caractéristiques géométriques de la flamme telles que la courbure et l'épaisseur de la flamme.

Chapitre I : étude bibliographique

Les études expérimentales ont montré que La stratification élève les niveaux de H₂ et de CO par rapport aux flammes prémélangées. En ce qui concerne la courbure des flammes, il est possible de faire des prévisions pour les flammes stratifiées non swirlé et swirlé sur la base de modèles de flammes prémélangées. Ces flammes à swirl conservent les zones de recirculation, et change en augmentant le nombre de swirl. L'effet du swirl est important non seulement sur la mécanique des fluides et la stabilisation, mais aussi pour améliorer les gradients de stratification moyenne ainsi que pour influencer l'ampleur des effets de transport préférentiel. [2]

Parisa Sayad. et al (2013).

Ils ont mené une Étude expérimentale sur un brûleur à tourbillon, prémélangé et étudier l'influence de la composition du gaz de synthèse sur le mélange pauvre (LBO) dans les différentes conditions d'écoulement à des nombres de tourbillons différents de 0.03 à 0.60, à l'aide d'une anémométrie Doppler laser (LDA). Les expériences ont montré que dans les mélanges binaires de H₂/CO, l'augmentation du rapport molaire H₂/CO à un certain nombre de tourbillons, réduit le rapport d'équivalence. Par contre L'ajout de 10 % de CH₄, et les effets de la Dilution de N₂ a augmenté le rapport d'équivalence. Les mesures de vitesse sont effectuées pour obtenir le nombre de tourbillons pour chaque cas d'écoulement. Les différents champs d'écoulement ont été générés en faisant varier les quantités de flux tangentiels et de flux axial à travers le générateur de tourbillons situé en amont de l'entrée du brûleur tout en conservant le débit massique total d'air. La limite du LBO a été déterminée visuellement pour chaque nombre de tourbillons et chaque composition de carburant en réduisant le débit de carburant tout en maintenant tous les autres paramètres. Une augmentation considérable de la concentration de CO en raison d'une combustion incomplète en mélange pauvre. [3]

H.S. Zhen. et al (2013).

Ils ont élaboré une étude expérimentale de l'effet de l'ajout d'hydrogène sur la stabilité et les comportements de transfert de chaleur par impact d'une flamme de diffusion de biogaz. La composition du biogaz a été simulée en mélangeant des fractions appropriées de gaz purs de CH₄ et de CO₂ montre une limite de stabilité inférieure de la flamme du CH₄/CO₂ (biogaz). La quantité d'hydrogène ajoutée a été variée de 5 à 10 %. L'ajout d'hydrogène améliore considérablement la stabilité de la flamme de biogaz, et l'ajout initial de 5 %

Chapitre I : étude bibliographique

d'hydrogène s'avère plus efficace pour améliorer la stabilité que l'autre ajout de 5 % d'hydrogène. La comparaison directe des limites de stabilité des flammes brûlant du CH₄/N₂ et du CH₄/CO₂ (biogaz) montre une limite de stabilité inférieure de la flamme du biogaz, ce qui indique un effet plus négatif du CO₂ que du N₂ sur la stabilisation de la flamme. A débit volumétrique identique. Pour les deux flammes, l'effet de l'ajout d'hydrogène a augmenté la température de la flamme et a réduit la hauteur de la flamme. L'analyse des données de transfert de chaleur montre que le flux de chaleur au point de stagnation est augmenté par l'ajout d'hydrogène parce que la température de la flamme est plus élevée à un niveau plus élevé d'ajout d'hydrogène. [4]

Sebastian Hermeth. et al (2013).

Ils ont proposé une simulation numérique à grande échelle (LES) pour étudier un brûleur à mélange pauvre stabilisé par swirl où l'écoulement présente deux états stables. Dans le premier, la flamme est fixée au corps central bluff body en amont de la zone centrale de recirculation qui contient les gaz brûlés. Dans la seconde, la flamme est détachée de la zone de circulation descendante du corps central bluff body, qui est remplie de gaz froids non brûlés et dominée par une forte Prétraitement du noyau de vortex(PVC). La flamme tourbillonnante peut avoir deux états (attaché et détaché) différents pour le même régime. Les fonctions de transfert de la flamme, mesurées en forçant les deux états de la flamme avec des ondes acoustiques, sont très différentes pour les états Attaché et Détaché, ce qui suggère des effets thermo-acoustiques différents. Les diagrammes de bifurcation montrent que la flamme détachée ne peut pas être ramenée à une position attachée avec un débit de combustible accru, mais qu'elle peut être rattachée à nouveau en la forçant à des amplitudes élevées. [5]

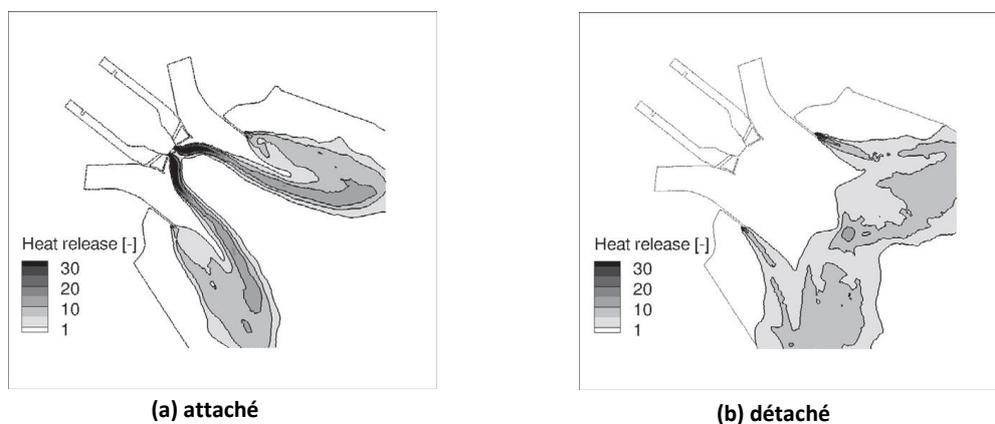


Figure.I.2. Champ de dégagement de chaleur sur le Plan de coupe central (champs moyens)

M. Stohr .et al (2014).

Ils ont élaboré une étude à propos des interactions entre l'écoulement, le mélange air-carburant et la réaction dans une flamme à swirl turbulente partiellement prémélangée pauvre ont été étudiées en utilisant simultanément la PIV, l'OH-PLIF et l'acétone-PLIF. Dans une chambre de combustion La flamme fonctionne avec du méthane et de l'air. Le transport et le mélange de carburant ont été visualisés en ajoutant 9 % en volume d'acétone au méthane Le flux instable dominant est un noyau tourbillonnaire en précession (PVC) dans la couche de cisaillement de la zone de recirculation interne et le point de stagnation inférieur (LSP) à la racine de la flamme, le PVC induit des changements périodiques dans la composition du gaz non brûlé, qui varie entre l'air pur et l'air et le combustible bien mélangés. En général, les résultats montrent que l'amélioration du mélange air-carburant induite par le PVC contribue de manière significative à la stabilisation de la flamme, et que la dynamique de la flamme ne peut être correctement comprise sauf si une analyse des mécanismes de mélange transitoire sont inclus. [6]

Minggao Yu. et al (2015).

Ils ont mené Une étude expérimentale pour étudier les effets de l'ajout d'hydrogène sur les caractéristiques fondamentales de propagation des flammes prémélangées au méthane/air à différents rapports d'équivalence. La fraction d'hydrogène dans le mélange méthane-hydrogène a varié de 0 à 1 avec des rapports d'équivalence de 0,8, 1,0 et 1,2. Les résultats indiquent que le risque de l'instabilité de la flamme augmente en fonction de la fraction d'hydrogène, et la flamme prémélangée hydrogène/méthane a subi un changement de structure. La flamme s'est formée uniquement lorsque la fraction d'hydrogène était comprise entre 0 et 50 % avec un rapport d'équivalence de 0,8. Ils ont constaté que la vitesse du front de flamme augmente sensiblement avec un taux de fraction d'hydrogène élevée. Pour un mélange stœchiométrique, le temps de diffusion de la flamme est court et la suppression est élevée pour tous les rapports d'équivalence. [24]

J. Branco. Et al (2015).

Ils ont présenté une étude numérique des flammes à diffusion turbulente dans une chambre de combustion avec un brûleur à fente. Les expériences ont été réalisées en utilisant un mélange de gaz naturel (75 vol. %) et d'hydrogène (25 vol. %) comme combustible et trois oxydants de composition 35 % O₂/65 % N₂, 35 % O₂/32,5 % N₂/32,5 % CO₂ et 35 %

Chapitre I : étude bibliographique

$O_2/20\%$ $N_2/45\%$ CO_2 . Pour ces trois oxydants, l'imagerie par (OH^*) et les distributions spatiales de la température et des concentrations en O_2 , CO_2 , CO et NO_x sont rapportées, ce qui a permis d'identifier l'emplacement et la structure de la zone de réaction. Les régions où les températures sont les plus élevées coïncident avec les régions où l'intensité de OH^* est maximale. De plus, l'ajout de CO_2 à l'oxydant a forcé la réaction à se dérouler plus en aval, a réduit l'intensité des OH^* et a supprimé la formation de NO . En ce qui concerne la. Le concept de dissipation par tourbillon a été utilisé en même temps qu'un mécanisme chimique comprenant 42 espèces et 167 réactions chimiques. Le modèle a pu prédire de manière satisfaisante la température et les concentrations de O_2 et de CO_2 , des divergences ont été constatées dans la prédiction de la concentration de CO . [7]

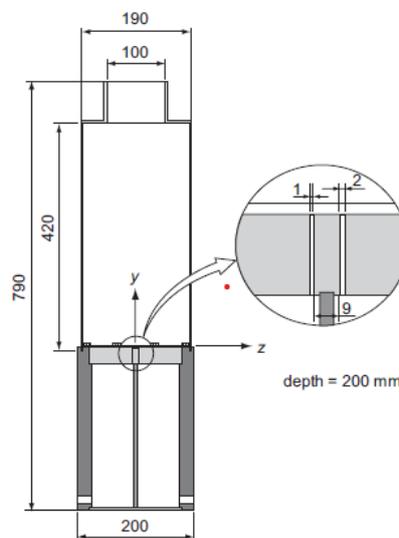


Figure.I.3. Schéma de la chambre de combustion avec le brûleur à fente

Chaour Mohamed et autres (2016).

Ils ont étudié l'optimisation des paramètres de fonctionnement des brûleurs industriels à flamme de diffusion. L'étude s'intéresse sur l'effet des mélanges gazeux et leurs caractéristiques dynamique et thermique de l'écoulement ainsi que leurs impacts sur la stabilité de la flamme et la composition du mélange. L'étude est menée sur un brûleur industriel à gaz de 250kilowatt. Les simulations numériques sont effectuées à l'aide du code de calcul FLUENT, en utilisant le modèle de turbulence k- ϵ standard couplé au modèle de combustion turbulente EDM (Eddy Dissipation).les résultats obtenus pour un combustible considéré un mélange méthane hydrogène. La proportion volumique d'hydrogène varie de 0 à 100%, montrent que l'ajout de l'hydrogène change radicalement la structure des zones de réaction et la température augment à l'augmentation de pourcentage d'hydrogène. En effet,

Chapitre I : étude bibliographique

on a constaté que les émissions polluantes diminuent lorsque l'on augmente le pourcentage d'hydrogène.[8]

Andrés Colorado (2016).

Il a élaboré un travail expérimental sur les brûleur (LSB) et les brûleur à combustion stabilisée en surface(SSCB) a mélange pauvre pour la prédiction des émissions de polluants et la stabilité des réactions des combustibles gazeux stabilisés par flamme de prémélange flexible et à très faible taux de NOx. Les espèces polluantes sont évaluées lors de la combustion du gaz naturel (GN) et de ses mélanges binaires avec d'autres combustibles gazeux tels que l'hydrogène (H₂), le dioxyde de carbone (CO₂), l'éthane (C₂H₆) et le propane (C₃H₈) selon des modes de fonctionnement variables, notamment : l'allumage, le soufflage pauvre et un rapport air/carburant variable. Les résultats issus de cette étude, montre qu'à une vitesse de feu fixe (117 kW), l'ajout d'hydrogène au GN augmente l'émission de NOx pour les réactions stabilisées avec le LSB. Par contre, l'ajout de H₂ au GN réduira les niveaux d'émission des réactions stabilisées avec le SSCB.

Les récents progrès dans les méthodes de mesure à permettez de quantifier d'autres polluants, tels que le N₂O, le NH₃ et le CH₂O, ce qui a été constaté expérimentalement [9]



Figure.I.4. low swirl injector (LSI)

Fethi Bouras. Et al (2016).

Ils ont élaboré une analyse numérique des avantages de l'enrichissement de la flamme turbulente de méthane non prémélangée par injection d'hydrogène dans un brûleur similaire à celui intégré dans les centrales électriques à turbine à gaz. Ainsi, par rapport au cas de référence où le brûleur est alimenté par 100 % de méthane, les variations du champ de vitesse axiale, du champ de température et de la fraction massique du champ de monoxyde de carbone sont examinées pour différents pourcentages d'injection d'hydrogène. Les résultats calculés, obtenus à l'aide du logiciel Fluent-CFD. Les résultats montrent que l'ajout

Chapitre I : étude bibliographique

d'hydrogène au méthane a un impact sur tous les paramètres physiques et chimiques du système réactif. L'augmentation de l'hydrogène dans le mélange réactif augmente la vitesse des gaz en combustion. L'ajout d'hydrogène dans le mélange réactif réduit l'émission de CO dans les espèces produites par la combustion. L'augmentation de l'hydrogène dans le mélange de carburant augmente la température dans le brûleur. [10]

Mehmet Salih Celtek. et al (2017).

Ils ont élaboré des Recherches sur les caractéristiques d'un brûleur industriel à faible tourbillon (LSB) en utilisant le gaz naturel, le méthane, le gaz naturel enrichi en hydrogène et l'hydrogène en tant que carburants. La modélisation numérique a été réalisée par le code commercial ANSYS Fluent 16.0. L'étude s'est effectuée pour deux modèles géométriques du brûleur. Ensuite, la flamme du méthane a été examinée avec le mécanisme de réaction méthane-air-2 étapes. Les effets de l'ajout d'hydrogène au brûleur ont été étudiés. Les résultats obtenus de ce travail, pour un faible nombre de swirl le modèle réalisable k- ϵ est plus adapté que le modèle RNG pour la prédiction des émissions de NO_x des flux turbulents. La Modification de la géométrie du brûleur donne des résultats satisfaisants, sans influence aux conditions de travail. L'utilisation du modèle Eddy dissipation, le gaz naturel peut être modélisé avec un mécanisme de réaction méthane-air en 2 étapes avec une modification du mécanisme cinétique du méthane en tenant compte de l'espèce, de la densité du mélange, du pouvoir calorifique et du poids moléculaire du gaz naturel. La comparaison montre une approche des résultats, Par contre les niveaux de NO_x et d'oxygène présentent des différences. L'écart entre les niveaux de NO_x est de 6% alors que les niveaux d'oxygène sont de 11%. Dans le cas des mélanges gaz-hydrogène pure, la variation d'hydrogène au gaz naturel de 25%, 50% et 75%, fait augmenter l'émission de NO_x 92,81%, 219,72% et 360% respectivement. Comme l'hydrogène pur ne contient pas d'élément C, dans ce cas les émissions de CO et de CO₂ ne se produisent pas, mais les émissions du NO_x sont très élevées avec 485,95 ppm. [23]

Mohammed El Hadi Attia. et al (2018).

Ils ont élaboré une étude sur l'Effet de l'ajout de Carburant d'Hydrogène sur la Flamme de Méthane. Le but est d'améliorer le mélange réactif afin de réduire le monoxyde de carbone en tant qu'une espèce chimique polluante. Le présent travail expose une étude numérique de la flamme de diffusion turbulente, de méthane et d'air, sur la base de l'injection d'hydrogène dans le jet central de méthane. Les modèles couplés LES/PDF sont utilisés pour surmonter l'interaction turbulence/chimie

Chapitre I : étude bibliographique

dans les équations de transport des espèces chimiques, Les différents cas de combustion considérés tiennent en compte de la composition du carburant, CH₄ et le pourcentage de l'hydrogène égales à 0,20,40,60,80 et 100%, fourni au brûleur. Les résultats obtenus montrent que l'ajout de l'hydrogène permet d'améliorer le mélange réactif, ce dernier permet d'améliore la combustion des réactifs brûlants. Enfin, l'enrichissement de combustible de l'hydrogène réduit les émissions du CO dans les produits de combustion. [11]

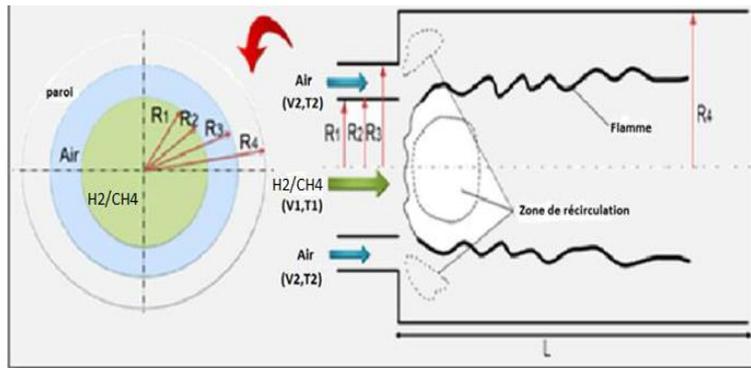


Figure.I.5. Schéma représentatif du brûleur

Parag Rajpara. et al (2018).

Ils ont présenté une qui recherche vise à évaluer le potentiel de l'hydrogène sous la forme d'un carburant supplémentaire pour accélérer la chimie de la combustion et réduire les émissions de CO du méthane alimentant la chambre de combustion d'une turbine à gaz à tourbillonnement ascendant. . Les carburants à base de méthane contenant de l'hydrogène sont fournis dans deux conditions d'essai différentes : ajout d'hydrogène à un apport d'énergie thermique fixe et l'ajout d'hydrogène à un débit volumétrique total de carburant fixe. Les effets de l'enrichissement en hydrogène sur les caractéristiques de la flamme et la cinétique chimique sont analysés à l'aide de simulations de grands tourbillons(LES). La visualisation des flammes est effectuée et les mesures de la température et des émissions à la sortie de la chambre de combustion sont rapportées. Pour un même apport énergétique. L'ajout d'hydrogène au méthane augmente la vitesse et la température des gaz du brûleur, les flammes sont relativement plus larges et plus courtes à des concentrations d'hydrogène plus élevées. Une température de flamme plus élevée avec un enrichissement en hydrogène, le niveau des émissions de CO est réduit de manière significative avec une augmentation des émissions de NOx. À un débit volumétrique constant de carburant, la réduction des espèces

Chapitre I : étude bibliographique

générées par le carbone CH_4 , CO et CO_2 est attribuée à la substitution des hydrocarbures et les effets cinétiques chimiques sont moindres. [12]

Weijie Zhang. et al (2019).

Ils ont présenté une étude expérimentale sur l'effet de l'ajout d'hydrogène sur la stabilisation pré mélangée pauvres des flammes à swirl, les flammes ont été stabilisées avec un bluff-body et un brûleur à swirl. Cette structure des flammes contenues dans l'hydrogène étudiée était jusqu'à 80% avec des mesures simultanées de OH-PLIF et PIV. Ils ont constaté aussi que l'ajout de l'hydrogène favorise les flammes vers l'écoulement principal et la distorsion directe des vortex. L'hydrogène contenait des flammes se déplace plus vers l'extérieur, et contient aussi des flammes qui réduisent l'effet de distorsion et de refroidissement des vortex de la couche de cisaillement, et une grande résistance aux forces de cisaillement pour la stabilisation des flammes contenues dans l'hydrogène [13]

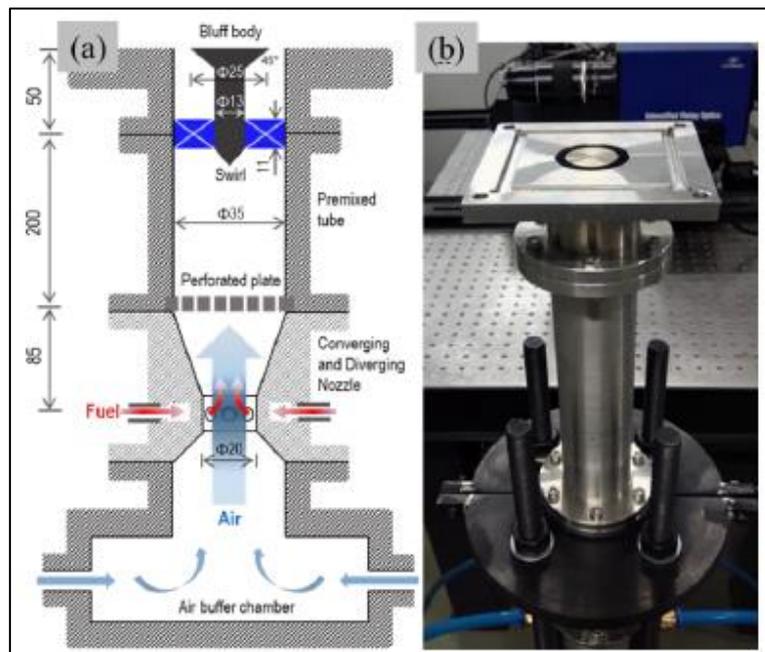


Figure.I.6. (a) schéma du brûleur à swirl (b) photo de la partie supérieure du brûleur

Bing Ge et al (2019).

Ils ont étudié expérimentalement l'effet de l'ajout d'hydrogène sur la flamme tourbillonnante du gaz naturel à l'aide d'un brûleur DLE à étages radiaux (Dry Low

Chapitre I : étude bibliographique

Emission). Le volume d'hydrogène contenu dans le mélange de carburant a été varié de 0, 5, 11, 21 et 26 % afin d'évaluer s'il est bénéfique ou nuisible aux caractéristiques de la combustion. La mesure OH-PLIF (Planar Laser Fluorescence) a été effectuée pour examiner la topologie de la macro-flamme. Les émissions de NO_x et de CO ont également été analysées. Les résultats expérimentaux nous ont permis de savoir que la flamme rétrécit nettement lorsque la quantité d'hydrogène dans le mélange de carburant est augmentée. Pour être précis la topologie de la flamme change peu lorsque la teneur en hydrogène est inférieure à 5 %, l'angle d'expansion de la flamme se maintient également bien. Une fois que la concentration d'hydrogène est augmentée pour dépasser 11%, l'angle d'expansion de la flamme augmente rapidement. Entre-temps, les émissions de NO_x à la sortie de la chambre de combustion augmentent mais l'émission de CO reste stable avec une légère diminution. En ce qui concerne l'oscillation de la combustion, il est souligné que l'ajout d'hydrogène peut réduire l'amplitude de la fluctuation de pression de la flamme du gaz naturel enrichi en hydrogène. On peut conclure que l'ajout d'hydrogène dans le gaz naturel à ce brûleur à étages radiaux montre une capacité potentielle à inhiber l'instabilité de la combustion d'une manière ou d'une autre.

Nor Afzanizam Samiran. et al (2019).

Ils ont menées des études expérimentales on été effectuée pour étudier les caractéristiques de combustion du gaz de synthèse en mode flamme tourbillonte prémélangée. Quatre types différents de syngases, allant d'une teneur faible à élevée en H₂ ont été testés et simulés. La structure globale de la flamme et les résultats de post-émission ont été obtenus à partir de travaux expérimentaux, fournissant la base de validation pour collecteur généré par flamellet. Approche de modélisation via un logiciel de calcul dynamique des fluides commerciale. La méthode FGM s'est avérée fournir un accord raisonnables avec le résultat expérimentale, en particulier émissions poste-gaz d'échappement et formes globales de flamme. Par la suite, la méthode FGM a été adoptée pour modéliser la structure de la flamme et prédire espèces radicalaires[15]

Mingxiao Wang. et al (2019).

Une étude expérimentale sur l'instabilité de la combustion des flammes à tourbillon prémélangées pauvre en mélange a été menée pour des mélanges méthane-hydrogène, et le mécanisme d'influence de la teneur en hydrogène sur l'instabilité de la combustion sous différent fréquences acoustique était enquête un champ acoustique force crée par un haut-

parleur pour stimuler l'environnement acoustique complexe et variable d'une combustion instable. Les morphologies de la flamme, l'évaluation du vortex dans le champ d'écoulement de la flamme, l'intensité de la chimioluminescence OH^* de la structure du front de flamme et le degré d'oscillation thermo acoustique locale de la flamme ont également été étudiés pour faciliter cette étude. Cette travail constitue une référence important pour la maîtrise du mécanisme de l'instabilité de la combustion des flammes de gaz mixtes et pour le développement de technologies permettant d'inhiber l'instabilité de la combustion.[16]

Gorkem Oztarlik. et al (2019).

Ils ont élaborées une étude expérimental sur L'impact de l'ajout d'hydrogène sur la dynamique d'une flamme prémélangée méthane-air est exploré pour différentes stratégies d'injection. La configuration est un injecteur tourbillonnant avec un tube central pour l'injection de carburant pilote. Il est également montré que le prémélange complet de la même quantité d'hydrogène avec du méthane ou l'utilisation de méthane pour le jet pilote n'a pas d'effet significatif par rapport aux stratégies d'injection pilote d'hydrogène. La réponse de la flamme aux perturbations de l'écoulement forcé est utilisé pour interpréter les caractéristiques observées. Les émissions de CO et de NOx sont enfin examinées pour les différentes stratégies d'injection. Les émissions de NOx augmentent considérablement avec le pilotage de l'hydrogène par rapport à d'autres stratégies d'injection. [17]

I.3. Conclusion :

Après avoir terminé ces revue bibliographique, on peut distinguer plusieurs résultats concernant les études porté sur les flammes prémélangée a faible nombre de swirl, qu'on citer :

-La géométrie du bruleur, les vitesses d'entrée, la température, l'intensité turbulente, la composition du mélange réactif, la richesse, le nombre de swirl. Ces paramètres ont impact très important sur les flammes prémélangées

- Les différents moyens de mesures (PIV, LDV, OH-PLIF, acetane-PLIF, LDA) ont une bonne résolution de calcule direct de flammes. Par contre leur cout reste très élevé par rapport à la simulation numérique

-La majorité de ces études élaborées sont étudié expérimentalement en utilisant une simulation numérique capable au développement d'études sur les cas industriel, et la bonne prédiction des émissions polluants

- les différents modèles de combustion (EDM, Partially Premixed, EDC, C-Equation, G-Equation, PDF) ont une bonne prédiction de comportement de la flamme. En générale, il n'existe pas un modèle complet qui peut prédire tous les paramètres de la flamme

- Il existe trois types de polluants NO_x ; thermique, prompt et fuel, la majorité des recherches s'intéresse aux NO_x thermiques. Cela est justifié par l'absence de NO_x prompt et fuel dans la combustion pauvre et stœchiométrique du méthane.

-pour l'analyse des espèces chimiques, le modèle Partially Premixed procure des résultats très acceptables par rapport aux autres modelés de combustion

Chapitre III : Analyse et modélisation

II.1. Introduction

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.

L'étude des mécanismes réactionnels de gaz réactifs a conduit à l'introduction de différentes grandeurs caractéristiques de ces phénomènes physiques.

On va présenter les éléments de cinétique, les écoulements réactifs, les écoulements swirlés et les hypothèses posées et les formules mathématique. L'élaboration d'un mécanisme réactionnel capable de prévoir l'évolution d'un système chimique réactif.

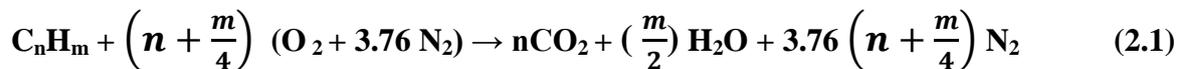
Dans cette étude nous présenterons les différentes versions du mécanisme réactionnel détaillé proposé par la GRI en utilisant le modèle Partially Premixed, RANS k- ϵ STANDAR et NO thermique

II.2. Cinétique chimique et combustion

II.2.1 Eléments de cinétique

Darabiha (1999) a défini la combustion comme l'évolution irréversible d'un mélange réactif vers son état d'équilibre. Cette évolution est un ensemble de réactions chimiques (collisions moléculaires efficaces) décrivant au final l'oxydation d'un combustible (hydrocarbure) par un comburant ou oxydant (dioxygène de l'air).

Ce processus forme majoritairement de l'eau (H₂O) et du dioxyde de carbone (CO₂). La libération des énergies de liaisons associées rend l'oxydation très exothermique : de 40 à 50 MJ / kg de combustible en moyenne pour les hydrocarbures. Si on s'intéresse à l'état final d'équilibre, on peut donc décrire la combustion du point de vue thermodynamique en le traitant comme une réaction globale, unique et irréversible à pression constante. Un bilan enthalpique permet de calculer la chaleur de réaction dégagée par différences des enthalpies de formation entre produits et réactifs. L'oxydation stœchiométrique d'un hydrocarbure C_nH_m par l'oxygène O₂ de l'air s'écrirait alors : [22]



La cinétique chimique étudie l'évolution dans le temps des systèmes réactionnels dans lesquels des espèces chimiques se forment et (ou) disparaissent simultanément ou successivement.

Les étapes élémentaires sont caractérisées par leur taux de réaction Ω_i qui permet de calculer l'effet de la réaction sur chaque espèce. Ω_i traduit la variation de l'espèce i au cours du temps. Le taux de réaction élémentaire est égal au produit d'une constante de vitesse par les concentrations des espèces réactives élevées, chacune à une puissance qui correspond à leur coefficient stœchiométrique. La constante de vitesse dépend de la température et est le plus souvent exprimée par une loi d'Arrhénius : [25]

$$v = BT^\alpha \exp\left(-\frac{E\alpha}{RT}\right) = BT^\alpha \exp\left(-\frac{T\alpha}{T}\right) \quad (2.2)$$

ν est la constante de vitesse

B le coefficient pré-exponentiel

R Constante des gaz parfait ($J \cdot K^{-1} \cdot mol^{-1}$) ($R = 8,314 51 J \cdot K^{-1} \cdot mol^{-1}$).

E_a l'énergie d'activation (kJ/mol),

$T_a = E_a / R$ température d'activation

Le processus réactionnel est composé de réactions élémentaires en chaîne : une première réaction produit des espèces qui vont amorcer la chaîne en réagissant de nouveau avec les réactifs initiaux et en déclenchant de nouvelles réactions élémentaires. Les réactifs initiaux vont être très vite consommés dès qu'une toute petite quantité du produit de la première réaction élémentaire apparaît. Le processus réactionnel d'une combustion peut faire intervenir des centaines d'espèces et des milliers de réactions élémentaires, pour lesquelles il faut connaître les constantes des lois cinétiques dont les valeurs sont d'exterminées expérimentalement. [25]

Chaque réaction élémentaire agit d'une vitesse différente que d'autres réactions, certaines ont des taux beaucoup plus forts que d'autres. Cette disparité de temps caractéristiques permet de bâtir des schémas réactionnels simplifiés. Ces schémas réduits permettent de diminuer le temps de calcul et sont tout à fait pertinents lorsqu'on ne s'intéresse qu'à un petit nombre d'espèces. La façon la plus simple d'écrire un processus réactionnel est d'exprimer le passage d'un état initial à un état final sous la forme d'une réaction globale.

Le taux de disparition du carburant pour la réaction globale en utilisant la loi d'Arrhénius :

$$\Omega_y = Y_{CnHm}^a Y_{O_2}^b B T^a \exp\left(-\frac{T_a}{T}\right) \quad (2.3)$$

Y_{CnHm} la fraction massique de l'hydrocarbure, Y_{O_2} la fraction massique d'oxygène Ω_y le taux de disparition exprimé en kilogramme d'hydrocarbure par kilogramme de mélange et par seconde. L'utilisation d'une réaction globale ne permet pas de représenter les processus de cinétique chimique réels, et faisant intervenir de nombreuses espèces intermédiaires.

Cette description ne permet pas d'expliquer la formation des polluants. Pour cela, des modèles cinétiques détaillés sont établis, composés uniquement de réactions élémentaires. La taille de ce mécanisme est en fonction du nombre d'éléments atomiques (C; H;O; N) contenus dans les réactifs.

II.2.2 Les écoulements réactifs

La compréhension de ces écoulements réactifs débute par la classification de la flamme afin de pouvoir élaborer notre étude

II. 2.2.1 Les différents types de flammes

Une réaction chimique se déroulant dans un milieu gazeux, on ne peut pas dissocier ce phénomène de la mécanique des fluides. En effet, la réaction globale, Eq. (2.1), montre que pour qu'il y ait une réaction, il faut d'abord que les espèces réactives (combustible et oxydant) soient en contact et que l'énergie nécessaire à l'activation de la réaction soit apportée. La flamme (zone de réaction) est donc le résultat du transport des espèces, du transport de la chaleur et de la réaction chimique. Dans un écoulement laminaire, compte tenu des différents mécanismes qui permettent l'existence d'un écoulement réactif. Pour une bonne compréhension des écoulements réactifs on commence par la classification des flammes, afin de pouvoir utiliser le modèle qui correspond au domaine de notre étude, pour cela on peut distinguer trois types de flamme :

1. Flammes Laminaires de Diffusion

Dans ce type de flammes, les réactions chimiques sont très rapides comparées aux phénomènes de convection et la combustion est contrôlée par la diffusion des espèces et de la chaleur. Les réactifs et la chaleur diffusent les uns vers les autres - c'est ce qui va Prendre le plus de temps - avant de pouvoir réagir. Ces flammes ont le désavantage de produire une quantité importante de polluants car les températures atteintes sur les fronts de flammes sont généralement élevées.

2. Flammes laminaires de prémélange

Lorsqu'on allume un mélange gazeux où le combustible et l'oxydant sont initialement mélangés, un front de flamme, séparant les gaz frais des gaz brûlés, se propage dans tout l'espace à une certaine vitesse. Si les gaz réactifs sont initialement placés dans un tube et qu'on allume le mélange à une extrémité du tube, un certain temps après l'inflammation, une flamme plane se propage à vitesse constante perpendiculairement à l'axe du tube. Cette flamme est utilisée en mélange pauvre qui permettant ainsi d'augmenter le rendement et réduire la production des NOx. Son utilisation reste très difficile à maîtriser et peut aussi causer de grands risques d'explosion qui provient du mode de stockage du mélange réactif. Donc son utilisation nécessitant ainsi de dispositifs complexes d'accrochage de flammes tels que le swirl et les bluff-Body.

3. Les flammes partiellement prémélangées

Elles se positionnent au milieu des deux premiers types. On les retrouve fréquemment dans les applications industrielles pour des raisons de sécurité. Le carburant est généralement stocké séparément du comburant. Le mélange est injecté à travers deux courants différents en amont du front de flamme où ils sont supposés se mélanger [S. Ouali 2014].

Pour notre étude, les flammes du brûleur LSB sont classifiées avec les flammes partiellement prémélangées. Ceci va nous permettre d'utiliser des modèles de combustion correspondants.

II.3. Les écoulements swirlés

Le brûleur LSB étudié dans ce travail la structure basique des flammes est conditionnée principalement par le swirl. Ce phénomène est très présent dans de nombreuses applications industrielles tel que. Cette méthode montre une remarquable stabilisation des flammes on utilisant cette technique surtout avec un faible nombre de swirl, car la vitesse du swirl peut étirer la flamme jusqu'à provoquer son extinction. Le swirl favorise le mélange des carburants et comburants de manière efficace, le but principale du fonctionnement des brûleurs en mélange pauvre est l'augmentation du rendement et bien sûr la réduction des polluants.

La rotation du fluide sur lui-même créant une dépression au niveau de l'axe est une caractéristique majeure des écoulements swirlés. Si cette dépression est suffisamment importante, sur l'axe de la chambre de combustion il y a une possibilité de création d'une zone de recirculation. La quantité de mouvement tangentielle permet de stabiliser et d'améliorer le mélange.

L'intensité de swirl S correspond au rapport du flux axial de quantité de mouvement tangentielle sur le flux axial de quantité de mouvement axiale est caractérisé par plusieurs relation de simplification des calculs dans les applications industrielles, afin d'éliminer les difficultés résultantes des variations de pressions statiques dans le conduit d'admission.

Pour cela l'approximation développé et proposé pour le cas des brûleurs de type LSB utilisé dans cette étude de simulation numérique pour le calcul du nombre de swirl S et la vitesse tangentielle est définie par la relation :

$$S = (2/3) * \tan \alpha \left[\frac{1 - R'^3}{1 - R''^2 + [m^2 (1/R''^2 - 1)]} \right] \quad (2.4)$$

Où R'' est le rapport entre le rayon de la plaque perforée axiale et le bec du brûleur et α l'angle d'inclinaison des ailettes de la vanne swirler qui est la moyenne entre la valeur maximale et minimale de l'angle d'inclinaison. Les ailettes des vannes swirler peuvent avoir un angle d'inclinaison constant ou variable sans affecter les paramètres utilisés lors de la simulation numérique [Ouali.S].

II.4. Hypothèses et formule mathématique

Notre étude est portée sur les écoulements réactifs des flammes de méthane-air prémélangées turbulente, a été réalisé par le code de calcul commercial ANSYS Fluent17.2, les model utilisé lors de cette simulation dans le but d'analyser la structure des flammes, leurs stabilités ainsi que les émissions polluantes (NOx et CO) sont : RANS STANDAR k-ε, EDM, Partially Premixed et modèle NO. Pour la réalisation de ce travail beaucoup de simplification ont été faite. L'utilisation des équations de conservation (la masse, la quantité de mouvement, les espèces chimique et l'énergie) intervenir plusieurs espèces qui réagissent à travers plusieurs réactions élémentaires (mécanismes réactionnels). Ces espèces sont caractérisées par leurs fractions massiques Y_k pour $k=1$ à N où N est le nombre d'espèces dans le mélange réactif.

1. Equation de continuité

Les équations issues de la mécanique des fluides (équations de Navier-Stokes) exprimant la conservation de la masse totale d'un écoulement à froid pour notre cas :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} = 0 \dots\dots\dots (2.6)$$

ρ est la densité du fluide et u_i la composante de vitesse suivant la direction i .

Pour notre étude, on analyse plusieurs espèces chimiques, donc l'équation (2.6) devient comme suit :

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho (u_i + V_{k,i}) Y_k) = \dot{\omega}_k \dots\dots\dots (2.7)$$

Avec $V_{k,i}$, la composante i de la vitesse de diffusion V_k de l'espèce k et $\dot{\omega}_k$ est le taux de production de l'espèce k .

La vitesse de diffusion $V_{k,i}$ est donnée par la loi de Fick comme suit :

$$V_{k,i} = -D_k \frac{1}{Y_k} \frac{\partial Y_k}{\partial x_i} \dots \dots \dots (2.8)$$

Avec : $k=1, \dots, N$, N_k et D_k est le coefficient de diffusion de l'espèce k dans le mélange.

2. Equations de la conservation de la quantité de mouvement

L'équation de conservation de la quantité de mouvement générale s'écrit sous la forme :

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho u_j + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i u_j) = -\frac{\partial P}{\partial x_j} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_i} + \rho \sum_{k=1}^N Y_k F_{k,j} = \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_i} + \rho \sum_{k=1}^N Y_k F_{k,j} \dots \dots \dots (2.9)$$

Où $F_{k,j}$ est la force de volume agissant sur l'espèce k dans la direction j et τ_{ij} est le tenseur visqueux,

3. Equation de conservation de l'énergie

C'est l'équation la plus étudiée par la combustion est peut être écrite sous la forme de celle de l'enthalpie:

$$\frac{\partial \rho h_s}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i h_s) = \dot{\omega}_r + \dot{Q} + \frac{DP}{Dt} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) + \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho \sum_{k=1}^N V_{k,i} Y_k h_{s,k} \right) \dots (2.10)$$

Le terme de diffusion de chaleur est donné par la loi de Fourier : $(\lambda(\partial T / \partial x_i))$.

h_s est l'enthalpie sensible, $V_{k,i}$ est la vitesse de diffusion de l'espèce k dans la direction i et

Q représente une source de chaleur additive (=0 dans notre cas).

$\dot{\omega}_r$ est le dégagement de chaleur dû à la réaction chimique (combustion) donné par :

$$\dot{\omega}_r = - \sum_{k=1}^N \Delta h_{f,k}^0 \dot{\omega}_k \dots \dots \dots (2.11)$$

4. Equation de conservation des espèces chimiques

Dans le cas étudié, c'est la combustion du méthane-air qui fait diminuer la fraction massique du CH₄, O₂ et N₂ et fait apparaître les produits de combustion. L'équation est donnée comme suit :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_k) + \frac{\partial u_j Y_k}{\partial x_j} = -\frac{\partial \mathfrak{R}_j^k}{\partial x_j} + \dot{\omega}_k \dots \dots \dots (2.12)$$

\mathfrak{R} est le flux de diffusivité moléculaire.

Pour l'analyse de la flamme turbulente de CH₄, les fractions massiques des espèces chimiques ont été calculées comme suit :

Les fractions massiques Y_k sont définies par :

$$Y_k = \frac{m_k}{m} \dots \dots \dots (2.13)$$

Où m_k est la masse de l'espèce k présente dans un volume donné V et m la masse totale du gaz dans le volume V .

La pression totale d'un mélange gazeux est défini par la somme des pressions partielles :

$$P = \sum_{k=1}^N P_k \dots \dots \dots (2.14)$$

Et $P_k = \rho_k \frac{R}{W_k} T \dots \dots \dots (2.15)$

La constante des gaz parfaits est **R=8.3143 J / (mol·K)**.

La densité ρ , qui a été prise en considération dans les équations de conservations précédentes la densité pour un mélange multi espèces est donnée par :

$$\rho = \sum_{k=1}^N \rho_k \dots \dots \dots (2.16)$$

L'équation d'état des gaz parfait peut s'écrire sous la forme suivante :

$$P = \rho \frac{R}{W} T \dots \dots \dots (2.17)$$

Cette équation ferme le système adéquation de Navier-Stokes. Où T est la température, R la constante des gaz parfaits, $\rho_k = \rho Y_k$ et W_k sont respectivement la densité et la masse moléculaire de l'espèce k .

Pour le mélange réactif étudié, la masse moléculaire moyenne du mélange W donné par :

$$\frac{1}{W} = \sum_{k=1}^N \frac{Y_k}{W_k} \dots \dots \dots (2.18)$$

La chaleur spécifique à pression constante C_p est donnée par :

$$C_p = \sum_{k=1}^N C_{pk} Y_k \dots \dots \dots (2.19)$$

Où C_{pk} est la chaleur spécifique de l'espèce k à pression constante, elle est donné par :

$$C_{pk} = 2.5 \frac{R}{W_k} \dots \dots \dots (2.20)$$

La chaleur spécifique à volume constant du mélange C_v est donnée par :

$$C_v = C_p - r \dots \dots \dots (2.21)$$

r est la constante du gaz définit par :

$$r = \frac{R}{W} = R \sum_{k=1}^N \frac{Y_k}{W_k} \dots \dots \dots (2.22)$$

La richesse du mélange réactif est définit par:

$$\phi = \left(\frac{Y_f}{Y_o} \right) / \left(\frac{Y_f}{Y_o} \right)_{st} \dots \dots \dots (2.23)$$

Où Y_f et Y_o désignent respectivement les fractions massiques du fuel (CH4) et de l'oxydant (O2+N2). L'indice st réfère à l'état stœchiométrique ($\Phi=1$).

On peut classifie le mélange réactif en trois catégories Φ

$\Phi > 1$: mélange riche.

$\Phi = 1$: mélange stœchiométrique.

$\Phi < 1$: mélange pauvre.

Notre étude s'est effectuée sur la richesse pauvre.

II.5. Modélisation de la turbulence

La difficulté de résolutions direct des équations précédentes, nous a poussées à utiliser une simulation numérique sur les flammes turbulentes prémélangées en se servant du logiciel ANSYS Fluent version 17.2, qui étudie les phénomènes physiques et propose plusieurs modèles de turbulence, combustion, polluants et autres.

II.5.1. Modèle de fermeture du premier ordre RANS – $k - \epsilon$ STANDARD

Pour le traitement de la turbulence on a utilisé le modèle RANS $k - \epsilon$ STANDARD incluse dans le package de ANSYS Fluent version 17.2. Ce modèle de turbulence est un modèle à deux équations dont la solution de deux équations de transport, il permet de déterminer à la fois, les échelles de temps et la longueur de la turbulente. Ce modèle est devenue une référence en matière de calcul des écoulements complexes, grâce à sa robustesse, son économie, et une précision raisonnable pour le traitement des écoulements turbulents le rend largement utilisé dans les applications industrielles depuis que Launder B.E. and Spalding D.B. (1972) l'ont proposé

Il s'agit d'un modèle semi-empirique, et la dérivation des équations du modèle repose sur des considérations phénoménologiques et empiriques. Ce modèle est basé sur les équations de transport de l'énergie cinétique de la turbulence k et son taux de dissipation ϵ .

Dans la dérivation de k et ϵ , on suppose que l'écoulement est complètement turbulent et que les effets de viscosité moléculaire sont négligeable. (ANSYS Fluent help)

L'énergie cinétique de turbulence k et son taux de dissipation ϵ sont obtenus à partir des équations de transports suivantes :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho k u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + G_k + G_b - \rho \epsilon + Y_M + S_k \dots \dots \dots (2.26)$$

Et

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \epsilon) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho \epsilon u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon} \right) \frac{\partial \epsilon}{\partial x_j} \right] + C_{1\epsilon} \frac{\epsilon}{k} (G_k + G_{3k} G_b) - G_{2\epsilon} \rho \frac{\epsilon^2}{k} + S_\epsilon \dots \dots \dots (2.27)$$

Où G_k représente la génération de l'énergie cinétique de turbulence, G_b est la génération de l'énergie cinétique de turbulence due à gravitation, Y_M représente la contribution de la dilatation fluctuante dans la turbulence compressible au taux global de dissipation, S_k et S_ϵ sont les termes sources, μ est la viscosité et μ_t la viscosité turbulente.

Les constantes du modèle sont ; $C_{1\epsilon}=1.44$; $C_{2\epsilon}=1.92$; $\sigma_k=1.0$; $\sigma_\epsilon=1.3$ sont proposées par Launder B.E. and Spalding D.B. (1972).

II.6. Modélisation de la combustion

Dans le cas de flammes turbulentes, les modèles de combustion doivent permettre de calculer la composition moyenne de l'écoulement réactif en tout point, ainsi que le terme source de l'équation de conservation de l'énergie. Les modèles utilisés dans notre modélisation par ANSYS Fluent 17.2 ; EDM et Partially-Premixed

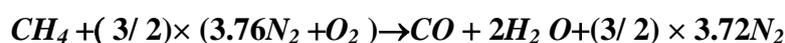
II.6.1. Le modèle EDM (Eddy Dissipation Model)

Ce phénomène est supposé rapide et le mélange turbulent est capable de contrôler la vitesse de réaction chimique, qui est contrôlée par l'échelle de temps. La méthode de dissipation par tourbillon est utilisée pour le modèle de combustion volumétrique avec le mécanisme de réaction méthane-air en deux étapes pour la combustion du méthane [23]. La turbulence mélange les réactifs non brûlés lentement et les produits de combustion chauds se produisent rapidement dans les zones de réaction, ce cas est appelé combustion limitée par le mélange, et souvent, les taux de cinétiques chimiques complexes peuvent être négligés.

Malgré que le modèle EDM offre de bons résultats, il reste limité par son mécanisme réactionnel à une ou deux étapes maximum.

Alors que pour le modèle EDM, les réactions ont le même taux de turbulence, donc le modèle ne peut pas prédire les espèces chimiques contrôlées par la cinétique de réaction comme les radicaux. D'autre part, le modèle exige des fractions massiques des produits de combustion non nulle afin d'amorcer la réaction, c'est pour cela que le code ANSYS Fluent utilisé, injecte des fractions massiques de 0.01 par défaut pour les produits de combustion (H_2O et CO_2) lors de l'initialisation du calcul numérique.

Pour notre cas, le modèle EDM exploite l'équation de réaction chimique suivante ;



II.6.2. Le modèle Partially Premixed

Le modèle Partially Premixed, c'est un système de combustion de type prémélange avec des mélanges carburant-comburant non uniformes et ce modèle est utilisé pour l'analyse des flammes. Les jets de prémélange qui se décharge dans l'atmosphère, les chambres de combustion de prémélange pauvre avec des flammes de diffusion pilotes et / ou de refroidissement des jets d'air, et les jets de flammes qui ne sont pas parfaitement prémélangées ils ont été prise en considération. Les flammes analysées dans cette étude se conforment parfaitement aux préconisations du modèle. [ANSYS help (2016)]

Dans le système Partially Premixed utilisé, on a exploité le modèle de Zimont pour la détermination de la vitesse de flamme turbulente et le modèle Quemical Equilibrium basé sur une PDF pour le couplage chimie turbulence.

Le modèle Partially Premixed obéit aux mêmes restrictions et limitations du modèle de combustion Premixed. D'autre part, le modèle n'est applicable qu'aux écoulements subsoniques turbulents. Le modèle de combustion Premixed ne peut pas être utilisé en conjonction avec les modèles de polluants (modèle NO).

Cependant, un système parfaitement prémélangée peut être modélisé par le modèle partiellement prémélangé (Partially-Premixed) qui lui, peut être utilisée avec les modèles de polluants (NO).

II.6.2.1. Le modelé de Zimont

La prédiction de la vitesse de la flamme turbulente est la clé du modèle de combustion prémélangée. La vitesse de la flamme turbulente est influencée par les éléments suivants:

- vitesse de flamme laminaire, qui est, à son tour, déterminée par la concentration du carburant, la température et les propriétés de diffusion moléculaire, ainsi que la cinétique chimique détaillée
- plissement et étirement du front de flamme par de grands tourbillons et épaissement de la flamme par de petits tourbillons

Dans le logiciel commercial utilisé **ANSYS FLUENT**, la fermeture de vitesse de flamme turbulente de Zimont est définit par :

$$U_t = A(u')^{3/4} \cdot U_l^{1/2} \cdot \alpha^{-1/4} \cdot l_t^{1/4} \dots\dots\dots (2.35)$$

$$U_t = A \cdot u' \left(\frac{l_t}{\tau_c} \right)^{1/4} \dots\dots\dots (2.36)$$

Où :

A : constante du modèle.

u' : La vitesse RMS ou moyenne quadratique (root-mean-square) (m/s).

$\alpha = k/\rho C_p$: Diffusivité thermique des turbulent(m^2/s).

l_t : La longueur du mélange turbulence (s).

$\tau_t = l_t/u'$: Echelle de temps de la turbulence (s).

$\tau_c = \alpha/U_t^2$: Echelle de temps chimique (s).

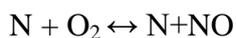
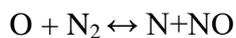
La longueur du mélange turbulent l_t est calculée à partir de :

$$l_t = C_D \frac{(u')^3}{\varepsilon} \dots \dots \dots (2.37)$$

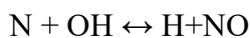
D'après les propositions de Zimont, il est souhaitable de prendre $A=0.52$ et $C_D=0.37$ comme des valeurs par défauts. [ANSYS help (2017)]

II.6.3. Modèle NOx thermique

La formation de NOx thermique est déterminée par un ensemble de réactions chimiques fortement dépendantes de la température, connu sous le nom de mécanisme de Zeldovich étendu. Les principales réactions régissant la formation de NOx thermique à partir de l'azote moléculaire sont les suivantes:



Une troisième réaction s'est avérée contribuer à la formation de NOx thermiques, en particulier dans des conditions quasi-stœchiométriques et dans des mélanges riches en carburant:



Les constantes de vitesse de ces réactions ont été mesurées dans de nombreuses études expérimentales et les données obtenues à partir de ces études ont été évaluées de manière critique par Baulch et al. et Hanson et Salimian. Les expressions des coefficients de taux pour les équations utilisées dans le modèle NOx sont données ci-dessous. Ceux-ci ont été sélectionnés sur la base de l'évaluation de Hanson et Salimian. [ANSYS help (2016)]

$$\begin{aligned} k_{f,1} &= 1.8 \times 10^8 e^{-38370/T} \\ k_{f,2} &= 1.8 \times 10^4 T e^{-4680/T} \dots \dots \dots (2.41) \\ k_{f,3} &= 7.1 \times 10^7 e^{-450/T} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}k_{r,1} &= 3.8 \times 10^7 e^{-425/T} \\k_{r,2} &= 3.81 \times 10^3 T e^{-20820/T} \dots\dots\dots (2.42) \\k_{r,3} &= 1.7 \times 10^8 e^{-24560/T}\end{aligned}$$

II.7. Mécanisme réactionnel

L'emploi d'un mécanisme réactionnel est nécessaire pour la prédiction d'émissions polluantes. On peut distinguer différents types de mécanismes chimiques, les mécanismes moléculaires (globaux et semi - globaux) et les mécanismes détaillés.

II.7.1. Mécanisme réactionnel détaillés

Notre travail est basé sur la cinétique détaillée qui peut être écrite en considérant toutes les espèces intermédiaires possibles et toutes les réactions possibles entre ces espèces. Cette démarche n'est pas envisageable car le nombre de réactions deviendrait rapidement énorme, et ces réactions ne seraient pas nécessairement toujours permises thermodynamiquement. Les espèces doivent être sélectionnées d'une part en prenant en compte au moins toutes les espèces dosées expérimentalement et d'autre part à partir de considérations thermodynamiques

Toutefois, la grande taille de ces mécanismes (plus de 100 espèces et plus de 1 000 réactions pour le gaz naturel) limite leur introduction complète dans un calcul CFD (Computational Fluid Dynamics) en raison des contraintes numériques qu'ils imposent : multiplicité du nombre d'équations et raideur du schéma. Pour coupler directement le calcul de l'écoulement à une cinétique détaillée, l'utilisation d'une méthode de réduction de la taille des schémas cinétiques (nombre d'espèces et de réactions) d'atténuer sa raideur en conservant les informations essentielles au niveau de description choisie : limites d'inflammabilité, vitesse de flamme, limite d'allumage ou d'extinction, prédiction d'espèces. [24]

Pour élaborer notre travail on a testé les différentes versions de la GRI-Mech, a des schémas cinétiques détaillés proposés par le GRI (Gas Research Institute) et prédire le comportement des différentes espèces chimiques de la flamme méthane (CH₄). [19]

II.7.1.1 GRI-mech

GRI-mech sont à la base des produits de la recherche informatique et expérimentale parrainée par le Gas Research Institute . Ce projet a été réalisé à l'Université de Californie à Berkeley, à l'Université de Stanford, à l'Université du Texas à Austin et à SRI International. GRI-Mech est un mécanisme de réaction chimique détaillé, a une satisfaisante capacité de représentation des flammes de gaz naturel et d'allumage. Le programme comprend le développement d'extensions pour inclure plus de chimie

a. Le fonctionnement de GRI-Mech

GRI-Mech est essentiellement une liste de réactions chimiques élémentaires et d'expressions de constante de vitesse associées. La plupart des réactions répertoriées ont été étudiées d'une manière ou d'une autre en laboratoire, Une fois que l'ensemble de départ de paramètres de constante de vitesse a été constaté, on entame les tests de sensibilité approfondis sur une variété de données expérimentales liées à l'allumage du gaz naturel et aux flammes. Ces tests indiquent les paramètres de débit à prendre en considération de près pour régler l'ensemble d'une manière à obtenir une représentation optimale des données. Ensuite, après un long processus d'optimisation des paramètres, la majorité de ces processus ont été effectué automatiquement pour obtenir le jeu de paramètres pour chaque version successive. Ceci est réalisé avec des contraintes strictes pour maintenir l'optimisation des paramètres de vitesse dans des limites prédéterminées que nous fixons sur la base d'évaluations des incertitudes dans les mesures des vitesses de réactions élémentaires et par des applications de la théorie conventionnelle de la vitesse de réaction.

GRI-Mech a été optimisé pour le méthane et le gaz naturel comme carburant. Il inclut les réactions impliquées dans la combustion, d'autres constituants hydrocarbonés du gaz naturel (par exemple, l'éthane et le propane). Cependant, l'optimisation n'incluait pas de cibles pertinentes pour d'autres carburants, [20]

b. Les versions de la GRI-Mech

1) GRI-Mech 1.2

GRI-Mech1.2 est un ensemble de 32 espèces et 175 réactions élémentaires. Les améliorations apportées par rapport à la version GRI-Mech 1.2 en ce qui concerne les

coefficients de vitesse nominale pour deux réactions, $H + O_2 \rightarrow OH + O$ et $CH_3 + H (+ M) \rightarrow CH_4 (+ M)$,

Après avoir testé ces performances, ils ont constaté que GRI-Mech 1.2 fonctionne de manière légèrement meilleure que GRI-Mech 1.1, dans les conditions d'allumage par tube de choc et flammes laminaires prémélangées de méthane. Ils ont trouvé un désaccord notable avec certaines expériences réalisées avec la version 1.2; par exemple: les taux d'oxydation du méthane CH_4 et du CO à basse température et haute pression calculés, sont plus rapides par rapport aux différentes expériences expérimental réalisées par l'ensemble des chercheurs [21]

2) GRI-Mech 2.11

La version GRI-Mech2.11 contient 277 réactions chimiques élémentaires de 49 espèces, elle remplace GRI-Mech 2.1 en incluant la chimie de l'azote pertinente à la chimie du gaz naturel.

Cette version Corrigeant deux erreurs mineures. La version 2.11 contient une chimie identique à celle de la version 1.2 en ce qui concerne la chimie carbone-hydrogène-oxygène de l'allumage du gaz naturel et des flammes, mais on ajoutant 102 réactions de 17 espèces azotées supplémentaires. Les paramètres n'ont pas été modifiés, à l'exception du brûlage et du coefficient de vitesse de la réaction $CH + H_2O \rightarrow H + CH_2O$, qui joue un rôle important dans le NO rapide, GRI-Mech 2.11 constate que l'optimisation de la chimie de l'azote en relation avec les flammes de gaz naturel et le brûlage est différente de la chimie carbone-hydrogène-oxygène. GRI-Mech 2.11 s'agit d'une amélioration pour les expériences modélisées pour décrire la formation et l'élimination des NO_x dans les flammes de gaz naturel.[22]

3) GRI-Mech 3.0

Il s'agit d'une compilation de 325 réactions et 53 espèces. Il diffère des précédentes versions de GRI-mech1.2 et GRI-mech2.11, en ce qui concerne les données cinétiques et les améliorations des cibles qui ont été mises à jour, au final à 77 cibles a modifié 31 paramètres de débit. Des nouvelles cibles de formation de formaldéhyde et de NO ont été incluses pendant un temps limité.

Les conditions pour lesquelles GRI-Mech 3.0 a été optimisé, limitées principalement par la disponibilité de cibles d'optimisation fiables, sont d'environ 1000 à 2500 K, 10 Torr à 10 atm et un rapport d'équivalence de 0,1 à 5 pour les systèmes prémélangés. Les pages de

validation montrent les performances du GRI-Mech 3.0 pour une large gamme de conditions de combustion. Une utilisation prudente de GRI-Mech 3.0, des réactions élémentaires, qui comprennent toutes les étapes importantes pour décrire l'allumage du gaz naturel et la propagation de la flamme (y compris la formation et la réduction de NO) sont décrites par un taux de paramètres qui reflètent la compréhension théorique de la vitesse de réaction élémentaire. Quelques aspects de la chimie de la combustion du gaz naturel ne sont pas décrits par GRI-Mech 3.0; ceux-ci comprennent la formation de suie et la chimie impliquée dans la réduction non catalytique sélective du NO. Ce dernier peut être important pour le rabattage du gaz naturel à des températures plus basses.

a. L'amélioration de GRI-mesh3.0

Les améliorations qui ont été apportées à la cinétique par rapport aux précédentes versions, Les modifications des paramètres de coefficient de vitesse, la cinétique CH pour provoquer la formation de NO a été modifiée à l'image des nouvelles mesures. De nouvelles expressions ont également été utilisées pour les réactions $H + O_2$, $CH_3 + O$, $CH_2O + H$ et la décomposition de CH_2O .

Deux ajouts principaux apportés au mécanisme cinétique, avec l'ajout de 4 espèces. Le propane est considéré en tant que constituant mineur, Étant donné que le gaz naturel contient du propane (et certains hydrocarbures plus élevés qui peuvent être représentés approximativement par le propane.

D'autres nouveaux ajouts comprennent une série d'observations de tubes à chocs sensibles à l'oxydation de l'intermédiaire formaldéhyde; un ensemble d'expériences de tubes à chocs, de flammes à basse pression et de réacteurs à écoulement concernant la formation et le retour rapides de NO; Les ensembles de délais d'allumage des tubes de choc en méthane par de petites quantités de propane ou d'éthane et la vitesses de flamme laminaire ont été révisés et élargis. Bon nombre de ces changements reflètent l'acquisition de données améliorées.

Les principaux résultats de l'optimisation du nouveau mécanisme sont:

1. Les écarts par rapport aux valeurs cibles sont généralement moindres qu'auparavant. (Le chi carré de la somme des cibles communes retenues est passé de 0,96 à 0,81).
2. Des valeurs finales similaires pour les taux directeurs CH_3+H , CH_3+OH et $CH_3 + O_2$ ont été trouvées.
3. Une nouvelle cible améliorée de NO pousse la flamme à basse pression a donnée des valeurs plus élevées pour $CH + N_2$ et des prédictions d'augmentation de NO.

4. De nouvelles valeurs de vitesse de flamme expérimentales inférieures restent surestimées par le mécanisme optimisé. Ils n'ont pas encore examiné les incertitudes liées au transport. En faisant des comparaisons que certaines inexactitudes de calcul existent dans les calculs de vitesse de flamme utilisés pour l'optimisation de la cible GRI-Mech 1.2. [23]

II.8. Conclusion :

Dans Ce chapitre on a donné une description des modèles utilisé dans la simulation numérique, EDM, Partially Premixed et NO thermique. On a défini les hypothèses posé pour cette étude et décrit les formules mathématiques et les équations de conservation utilisé. Ainsi que la détermination du mécanisme réactionnel élaboré pour l'étude des espèces chimique de la flamme de méthane.

Chapitre III : Procédure numérique

III.1. Introduction

Dans ce chapitre on explique la géométrie et le maillage adopté dans le bruleur, on va aussi détailler les méthodes et les moyens utilisés, on décrit la position exacte du problème, les conditions aux limites fixées, et Plusieurs autres paramètres numériques utilisé dans le présent travail de simulation numérique des mécanismes réactionnels des flammes prémélangées turbulentes de méthane-air stabilisé par swirl.

III.2. Description de la configuration

Cette simulation numérique se porte sur l'étude des mécanismes réactionnels (détaillé) des différentes espèces chimique sur des flammes prémélangées turbulentes swirlées. Ce travail a été étudié pour une structure 2D bidimensionnelle.

Cette analyse est basée sur la capacité des modèles utilisés pour déterminer les paramètres fondamentaux d'une flamme ; la température, la vitesse, la distribution des espèces chimiques (CH₄) et l'apparition des polluants ; NO_x et CO.

L'apparition des NO_x thermique dépend de la température, cela rend notre analyse sensible en vue de la technique de stabilisation adoptée (swirl). Cela peut faire développer des zones de recirculation à des échelles différentes suivant l'intensité du swirl.

La compréhension de ces mécanismes pour ce type de flamme est primordiale, afin de minimiser les émissions polluantes. D'autre part, la combustion en mélange pauvre augmente les probabilités d'instabilités liées aux fluctuations de la richesse et de la vitesse qui peuvent provoquer des phénomènes d'extinction et retour de flammes (flashback).

Les bruleurs LSB offrent des avantages uniques aux applications industrielles, notamment la stabilisation du front de flamme à une distance suffisamment éloigné du bec du bruleur. Cette distance maintien le bec bruleur à la température d'entrée des réactifs, ce qui augmente sa durée de vie (**Ouali.S**)

III.3. Géométrie et maillage.

Pour la réalisation de ce travail on a utilisé une configuration 2D à géométrie simple avec des maillages testés et optimisés.

III.3.1. Configuration 2D.

Pour la simulation numérique La structure 2D, les formes et dimensions sont montrées sur la Fig.3.1. l'entrée d'air a été décalée vers l'arrière de 20 mm . La géométrie ne comporte pas de parois solide, tout le domaine de calculs est ouvert à l'atmosphère (pression atmosphérique). Sa longueur (distance axiale) est de 300mm et sa hauteur (distance radiale) est de 150mm. Le bec du bruleur a un rayon de 25mm, il se compose de deux parties ; la plaque perforée axiale où le mélange réactif est injecté avec une vitesse purement axiale d'un rayon de 15mm et d'un espace annulaire swirlé de 10 mm où le mélange réactif est injecté avec deux composantes de vitesses ; axiale et tangentielle.

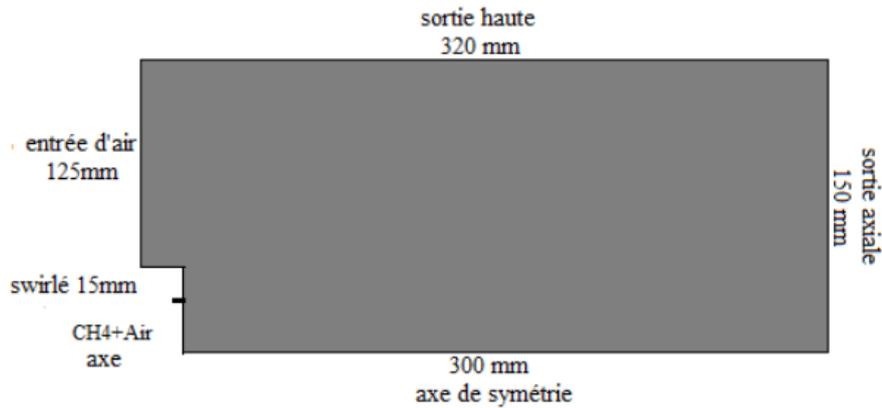


Figure 3.1 structure 2D du brûleur

III.3.2. Maillage de calcul.

Le maillage 2D adopté est structuré non uniforme, il a subi des adaptations avec l'option qu'offre le code de calcul commercial utilisé ANSYS fluent 17.2. Au cours de l'adaptation, chaque cellule carrée va se diviser en quatre sous cellules carrées avec des dimensions identiques, ce qui assure l'obtention d'une grille comportant des cellules structurées. L'adaptation a été effectuée sur les zones du domaine comportant des gradients importants de vitesses, températures ou autres variables régissant sur les flammes. Le maillage adapté comporte 21079 nœuds. Ce choix a été sélectionné après avoir effectué des tests d'indépendance de la grille par rapport à la solution.

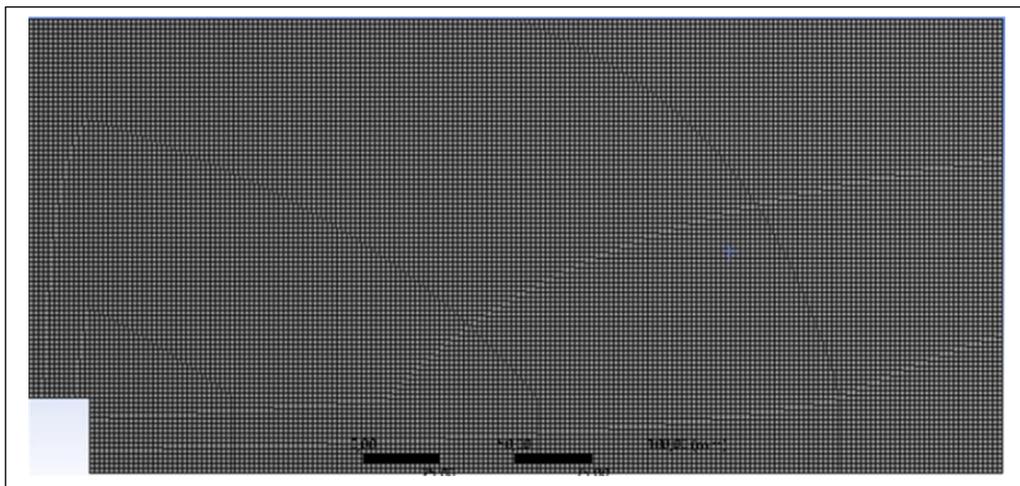


Figure 3.2 structure de maillage 2D

Le choix du maillage pour la structure 2D s'est porté sur plusieurs cas de simulations numérique afin d'atteindre une solution indépendante de la grille. On a commencé avec 5244 nœuds puis, 10743, 13208, 18420, 21079 et enfin 57982 nœuds. La température qui est prépondérante en combustion a été choisie comme variable de comparaison. La figure III.3 montre que les profils de température sur l'axe du brûleur 2D sont influencés par le nombre de nœuds du maillage. Il a été constaté qu'à partir de 21079 nœuds l'indépendance de la grille est claire. Cette analyse a été réalisée sur des cas réactifs pour éviter les interactions des modèles utilisés sur le choix de la grille.

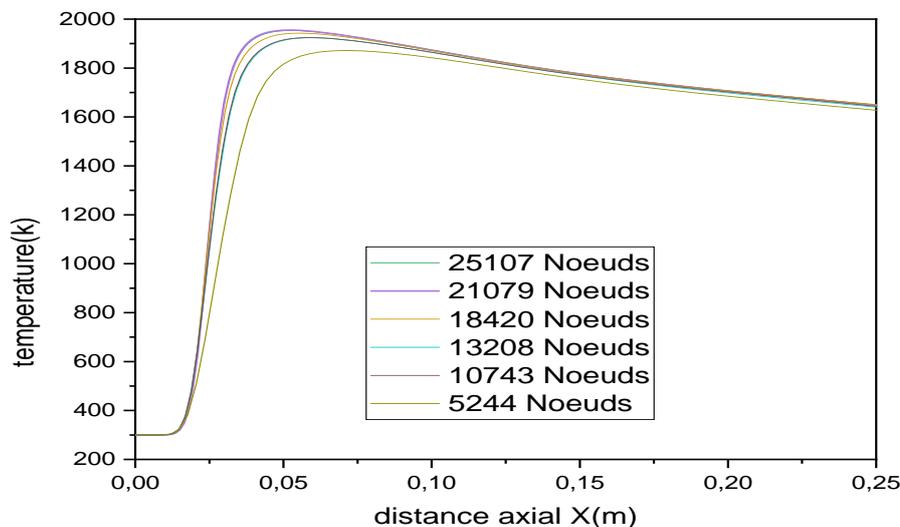


Figure 3.3 Température sur l'axe du brûleur 2D pour différents nombres de nœuds.

III.4. Conditions aux limites et opérateurs

Dans cette partie on va définir les différentes conditions aux limites imposées dans cette étude et les paramètres utilisés lors de la simulation numérique.

Les différents paramètres constants utilisés lors de l'étude de simulation numérique 2D. On a été contraint d'utiliser le solveur Axisymétrique swirl pour l'étude des flammes swirlées en configuration 2D. Aussi, l'utilisation du Solveur Pressure-Based est conditionnée par le modèle de combustion Partially Premixed. La pression opératoire, la température d'entrée et la vitesse initiales ont été prises de l'étude expérimentale proposée par Nogenmyr K.J. et al (2009). Le choix des valeurs des nombres adimensionnels utilisés (Nombre de Schmidt turbulent, Nombre de Prandtl Pr et le Nombre de Prandtl Pr) repose sur les résultats obtenus lors de la validation.

Chapitre III : Procédure numérique

Paramètre	Désignation
Model de combustion	-EDM -Partially Premixed
Modèle de turbulence	RANS k-ε standard
Solveur	Axisymétrique swirl (2D)
Operating pressure	1 ATM
Température d'entrée	300K
Reynolds Re	11400
Vitesse d'entrée moyenne V0	5m/s
Nombre de swirl S	0.5
Nombre de Schmidt turbulent	0.5
Nombre de Prandtl Pr	0.85
Nombre de Schmidt de la PDF	0.85

Pour pouvoir continue notre travail on a posé des conditions aux limites pour notre configuration 2D.

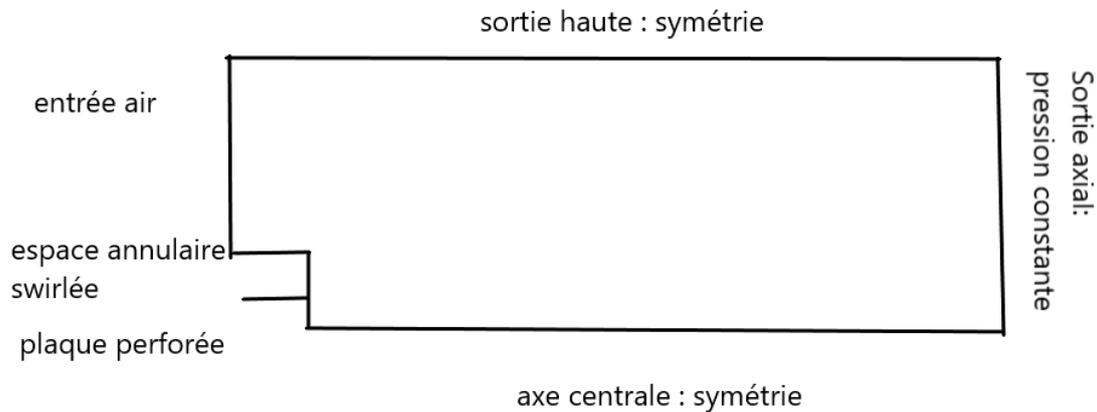


Figure 3.4 Conditions aux limites sur la structure 2D.

A) Entrée d'air (air inlet) : cette section se pose sur un diamètre de 125mm décalée de 20 mm en amont du bec bruleur, On a utilisé Velocity Inlet et une vitesse d'air axiale avec les paramètres suivant comme le montre le tableau si dessous

Chapitre III : Procédure numérique

Tableau. 1 Conditions aux limites à l'entrée d'air.

Section	V _{ax} (m/s)	V _s (m/s)	Intensité I%	Dh (mm)	Fraction massique de O ₂
Air inlet	0.3	0	0.1	125	0.23

B) Plaque perforée axiale (axial inlet) : C'est la partie axiale du brûleur son rayon est de 15mm qui détermine la vitesse de l'écoulement purement axiale qui passe par la plaque perforée afin de réduire sa vitesse et son taux de turbulence, la richesse du mélange méthane-air et son taux de turbulence. La condition à la limite utilisée est Velocity Inlet avec les paramètres suivant sont montrés dans le tableau suivant

Tableau. 2 Conditions aux limites sur la Plaque perforée

Section	V _{ax} (m/s)	V _s (m/s)	Intensité I%	Dh (mm)	Fraction Massique du CH ₄	Fraction massique de O ₂
Axial inlet	1.785	0	12	30	0.0348	0.22

C) L'espace annulaire swirlé (swirl inlet) : C'est la partie de l'espace annulaire de 10 mm qui entoure la partie axiale du brûleur qui détermine la vitesse de l'écoulement swirlée qui passe par la vanne swirler, la richesse du mélange méthane-air et son taux de turbulence. La condition à la limite utilisée est Velocity Inlet avec les paramètres suivant

Tableau.3 Conditions aux limites sur L'espace annulaire swirlé

Section	V _{ax} (m/s)	V _s (m/s)	Intensité I%	Dh (mm)	Fraction massique du CH ₄	Fraction massique de O ₂
swirl inlet	3.8	2.85	12	32	0.0348	0.22

D) La sortie axiale : C'est la zone axiale qui se trouve à la sortie du domaine de calcul par où sortent les gaz brûlés. Après les tests sur la position on a trouvé qu'à 300 mm, il n'y a aucune influence de la position de cette paroi sur les résultats obtenus

On a utilisé Pressure Outlet comme condition à limite.

E) La sortie haute : cette zone délimite les domaines de calcul sur la distance radiale, a cette distance de 150 mm il n'y a pas d'influence sur les résultats après avoir effectué des tests a cette section. Pour cela, cette zone a été supposée loin des perturbations causées par la flamme et la condition à limite utilisé est symétrie.

Les différentes conditions aux limites utilisées dans cette simulation reposent sur les données expérimentales du cas de validation (Nogenmyr K.J. et al (2009) comme les vitesses, les intensités turbulentes, les fractions massiques des éléments chimiques et le nombre de swirl. Pour les conditions de symétries et dimensions des domaines 2D, des tests de simulation ont été effectués les vérifier.

III.5. Paramètres de l'analyse des mécanismes réactionnels

Pour notre deuxième partie de simulation, l'étude des mécanismes réactionnels des différentes espèces chimiques, en utilisant un mécanisme cinétique détaillée (détaillée réduit), on va tester les différentes versions mécanismes réactionnels : les GRI version 1.2 (32 espèces), version 2.11 (49 espèces), version 3.0 (53 espèces), DRM-19 (19 espèces et 84 réactions), DRM-22(22 espèces et 104 réactions) dérivée du mécanisme GRI-Mech1.2. Uniquement les fichiers à la forme CHEMKIN-II et leur base de données thermodynamique ont été variées,

III.5.1. Critères de convergence

Pour notre simulation numérique, on a suivi l'évolution des variables régissant des flammes (température, vitesse, espèces chimiques, turbulence, variable de progression, NOx et CO) en supposant des points de contrôles au cours des itérations et les variables sont traité indépendamment. Notre calcul est dit atteint si les variables calculé ne convergent plus au cours des itérations

La figure 3.4 montrent les courbes d'évolutions des résiduels en cours de convergence par rapport à leur itération. Pour notre cas les valeurs ont été fixées à des niveaux très acceptables par rapport aux suggestions proposées par le guide ANSYS Fluent 17.2. Les valeurs imposées pour notre travail sont montré dans le tableau suivant

Chapitre III : Procédure numérique

Tableau 4. Résidus imposés pour l'étude de simulation numérique

Configuration	Continuité	Vax	Vs	Vr	S	Energie	k	ϵ	fvar	cvar	NO
résidus	10^{-9}	10^{-6}	10^{-6}	10^{-6}	10^{-6}	10^{-6}	10^{-6}	10^{-6}	10^{-3}	10^{-3}	10^{-6}

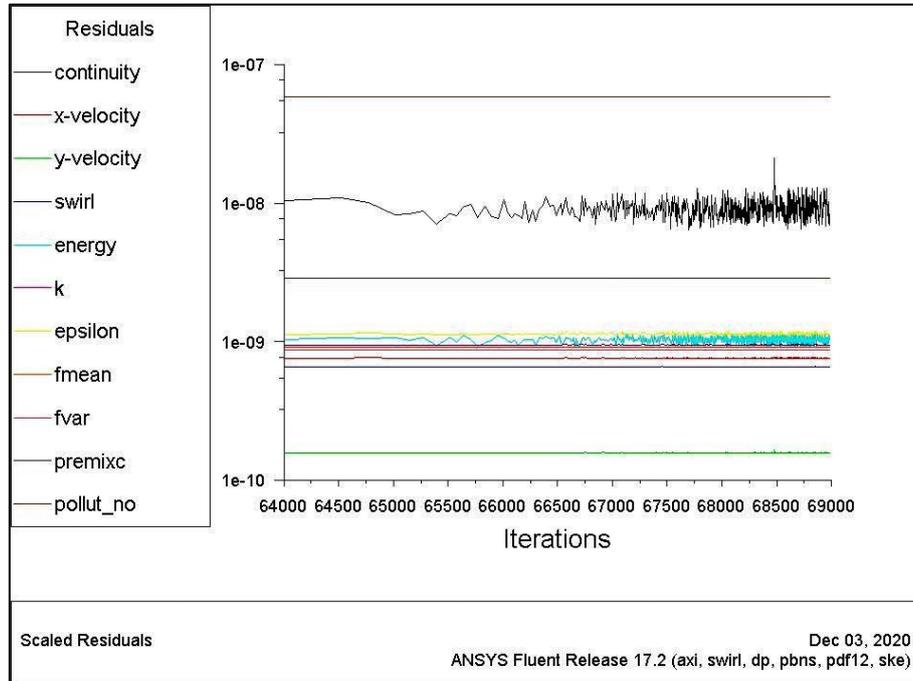


Figure.3.5. Courbe de convergence du cas de simulation 2D

III.6. Conclusion

Dans ce chapitre on a résumé les différents moyens exploités pour réaliser cette simulation. On a décrit les problèmes qui ont été étudiés pour la structure 2D, les géométries et le maillage adopté. Les conditions aux limites ont été citées et justifiées. Les paramètres utilisés lors de l'étude des mécanismes réactionnels ont été cités ainsi que les critères de convergence et la stabilité du calcul.

Chapitre IV : Résultats et discussions

IV.1. Introduction

Dans ce chapitre on va présenter les résultats de notre simulation numérique de la flamme de méthane-air (CH_4/O_2) prémélangées turbulente swirlées ; Ces résultats seront présentés, comparé et validés avec des résultats expérimentaux des travaux de Nogenmyr K.J. et al (2009). Les versions de GRI-Mech issues du mécanisme réactionnel détaillé proposé par la GRI seront testées. Les paramètres tel que la température, la vitesse axiale, la distribution du CH_4 , l'apparition des NO_x thermiques et la création du CO seront analysés en détail

IV.2. Validation

Les résultats obtenus lors de notre simulation numérique en utilisant le modèle Partially Premixed ont été comparés et validés avec les résultats expérimentaux et la simulation numérique obtenus par Nogenmyr K.J. et al (2009).

IV.2.1. Validation des profils de températures

Les profils de température sont montrés sur l'axe du brûleur X pour une distance comprise entre 0 et 300 mm à $r = 0$. Le résultat du modèle de combustion utilisée (Partially Premixed) est montré. Le profil de température obtenu (Figure. 4.1) montre une augmentation brusque de la température qui est l'une des caractéristiques de combustion. La valeur de température obtenue est comprise entre 300 K et 1690 K. On remarque une similitude claire entre la simulation RANS avec les résultats de Nogenmyr K.J. et al (2009)

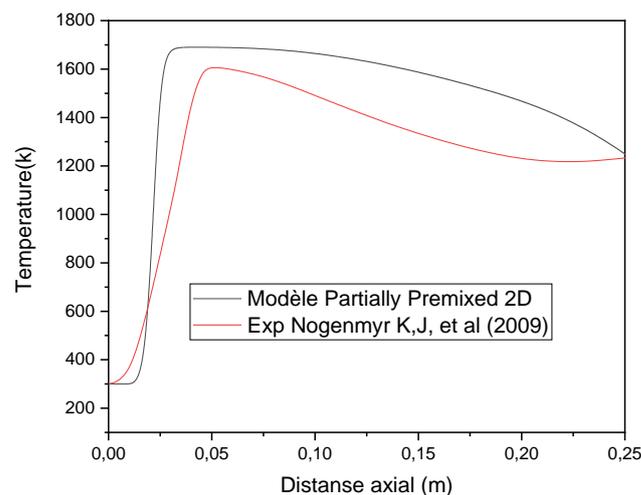


Figure 4.1. Validation des profils de température sur l'axe du brûleur

IV.2.2. Validation de la distribution du CH₄

Cette analyse permet de déterminer la composition chimique du mélange sur les différentes sections du front de flamme

La figure 4.2 montre la distribution du CH₄ sur différentes sections radiales. Il est clair que le modèle Partially Premixed donne des résultats très satisfaisants

Chapitre IV : résultats et discussions

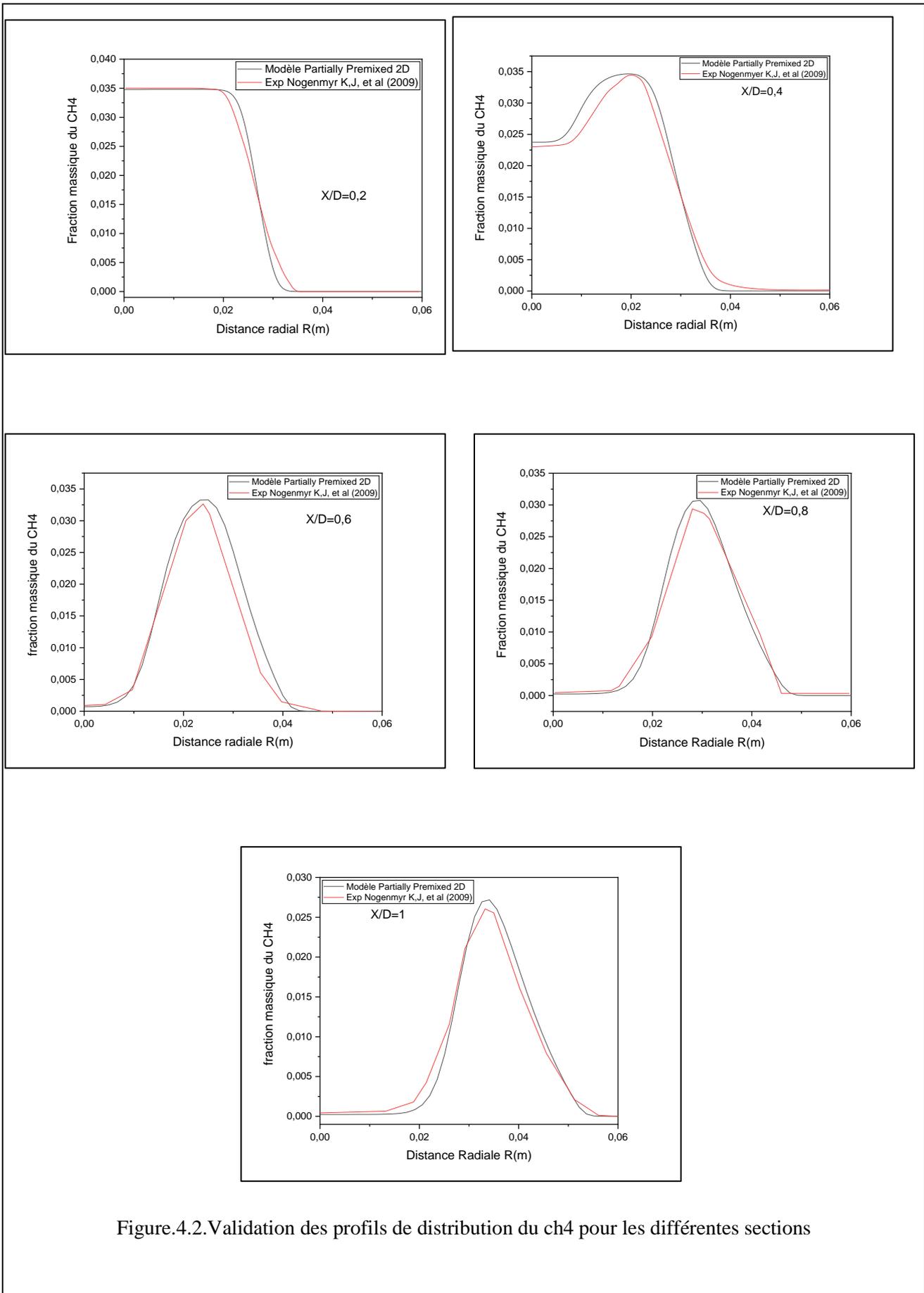
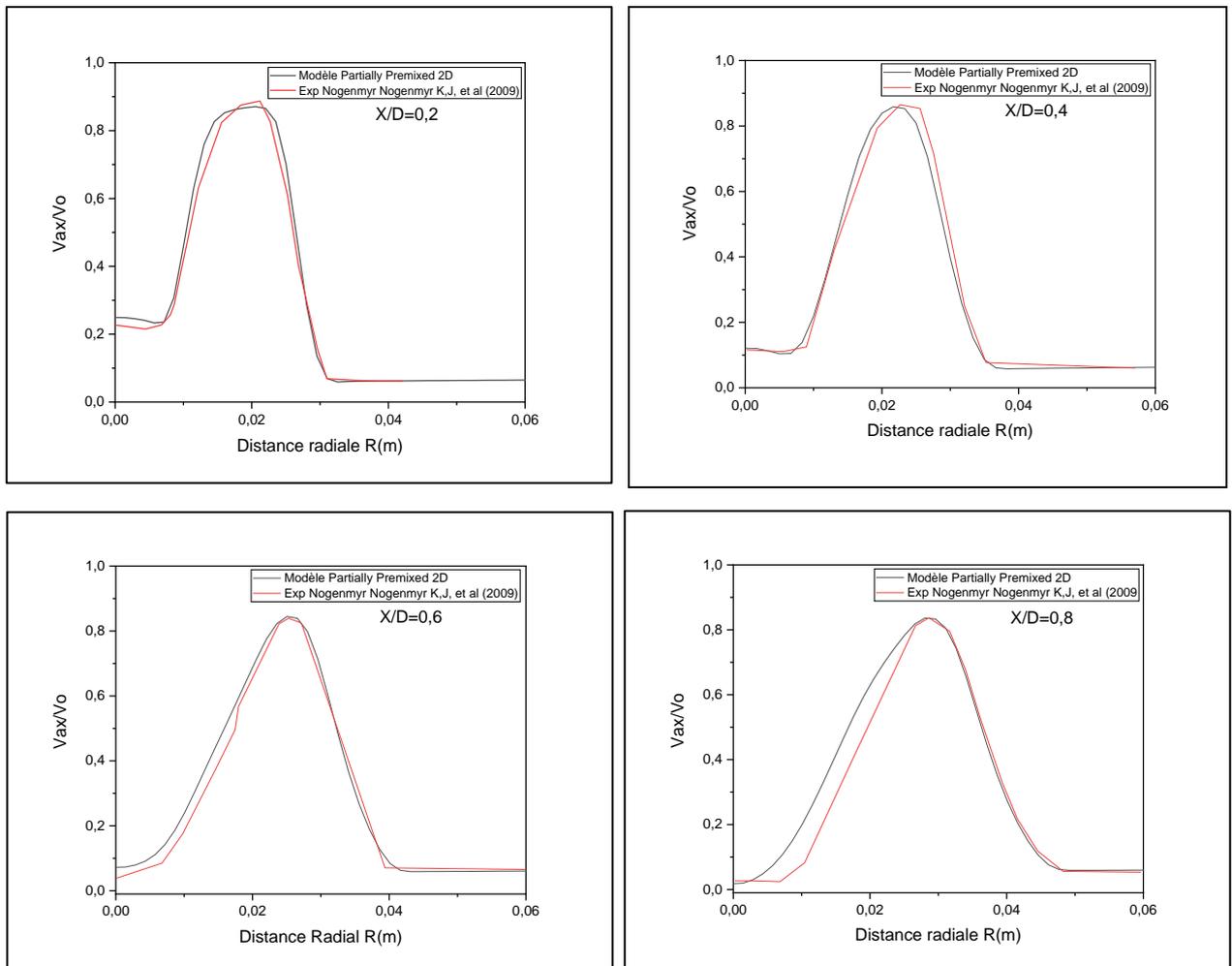


Figure.4.2. Validation des profils de distribution du ch₄ pour les différentes sections

IV.2.3 Validation des profils de vitesses axiales

La figure 4.3 montre les profils de vitesses axiales normalisés (V_{ax}/V_0) sur des sections radiales du domaine de calcul. La comparaison des résultats obtenus Pour les sections $X/D=0.2, 0.4$ et 0.6 donne des profils de vitesses axiales très semblables avec ceux de Nogenmyr K.J. et al (2009), pour les sections $X/D=0.8, 1.0$ et 1.2 le modèle Partially-Premixed montrent des similitudes acceptables de la vitesse axiale par rapport à l'expérience.



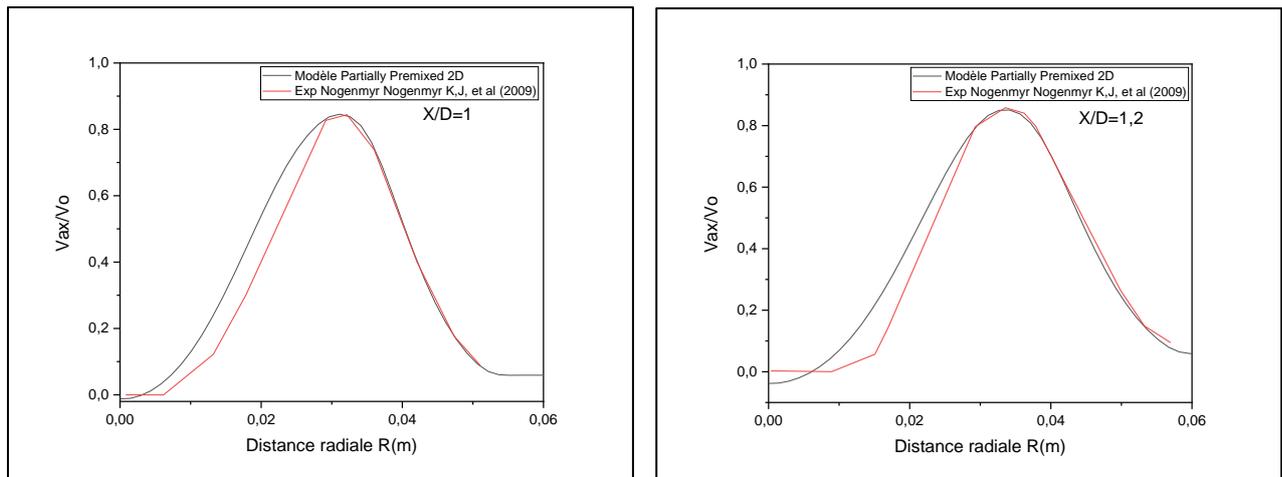


Figure.4.3 Validation des profils de vitesses axiales pour différentes sections

IV.3. L'effet des mécanismes réactionnels (GRI-Mech)

Les tests effectués dans cette partie sont pour but d'analyse le comportement des espèces chimiques issues du bruleur (LSB) en mélange pauvre. On s'intéresse aux variables qui influencent la structure de la flamme (la température, la vitesse, les espèces chimiques et polluant). Les versions de la GRI testé ; GRI-Mech1.2 (32 espèces et 175 réactions), GRI-Mech1.2 (19 espèces et 84 réactions), GRI-Mech1.2 (22 espèces et 104 réactions), GRI-Mech2.11 (49 espèces et 277 réaction) et GRI-Mech3.0 (53 espèces et 325 réactions)

IV.3.1. Effet des mécanismes réactionnels GRI-Mech sur la température

La figure 4.4 montre le profil de température sur l'axe du bruleur obtenu. La température est pratiquement identique, c'est un des résultats de combustion. Les différentes versions de GRI-Mech testée à plusieurs nombre d'espèces différents, ne montre aucune influence sur la température de la flamme qui est maintenue à 1689k.

La figure 4.5 montre petite surestimation de température qui passe de 1689k a 1696k pour la version GRI-Mech1.2 qui traite 19 espèces et 175 réactions chimique. Pour notre cas d'étude, mélange pauvre avec une richesse de 0.6, la composition des produit à l'équilibre est à peu près celle de la composition finale des réactifs .donc le nombre espèces et leurs réactifs ne joue pas un rôle important dans le calcul

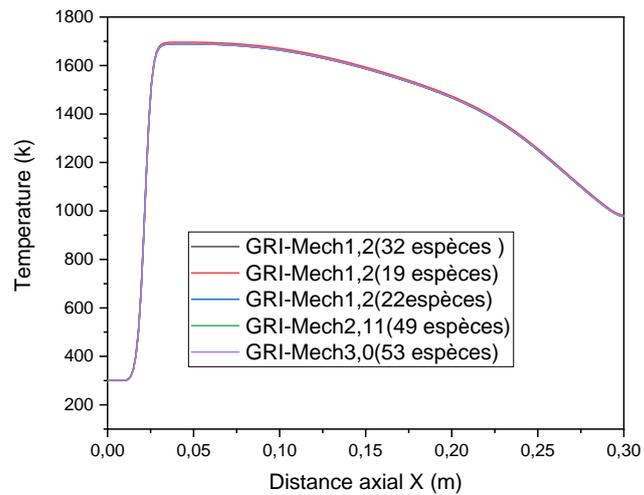


Figure 4.4 effet des mécanismes réactionnel sur les profils la température sur l'axe du bruleur

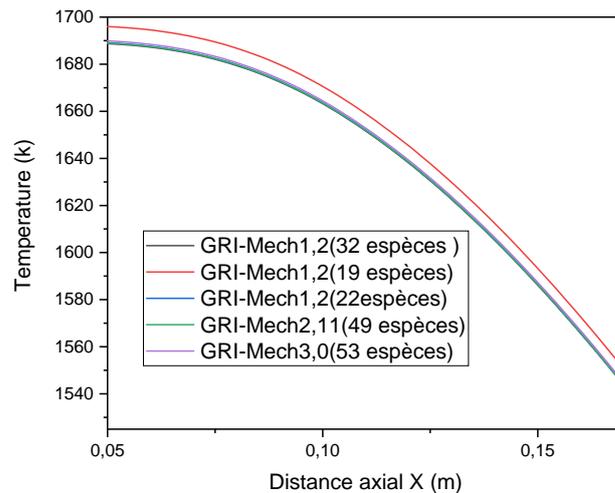


Figure 4.5 zoom sur l'effet des mécanismes réactionnels sur le profil de température

Les versions testées ne montrent aucune influence ou déstabilisation sur la forme et la structure globale de la flamme, la maintenance de front de la flamme a une distance non nulle du bec du bruleur ce qui signifie une stabilité des émissions du NO_x ; ceci est montré dans la Figures 4.6

Chapitre IV : résultats et discussions

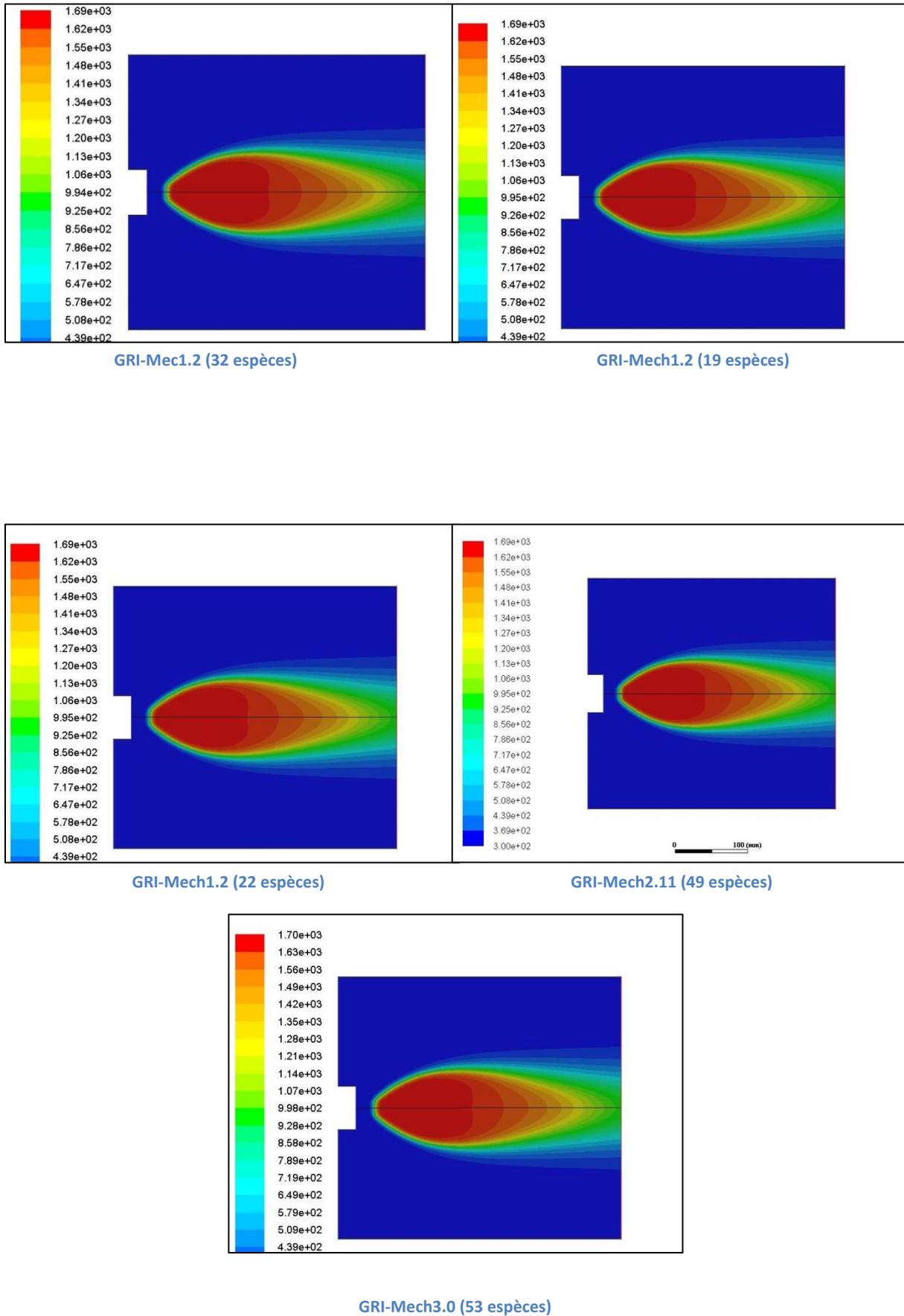


Figure 4.6 Contours de température (k) sur l'axe du brûleur pour les différentes versions de la GRI-Mech

IV3.2.Effet des mécanismes réactionnels GRI-Mech sur la vitesse

Les différents tests effectués le champ de vitesse de la flamme ne montrent aucune influence sur la vitesse de la flamme, les résultats sont pratiquement identiques. La vitesse de réaction des espèces chimique augmentent rapidement dans la zone de réaction puis diminue lorsque le mélange est consommé et les produit sont générées. Les résultats sont montrés dans La figure 4.6.

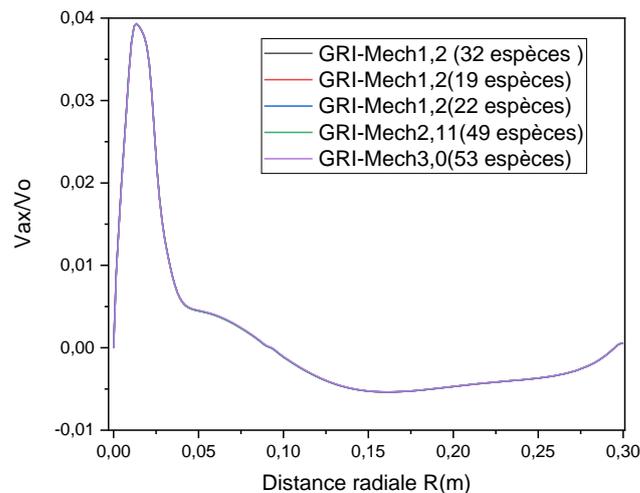


Figure 4.7 Effet des mécanismes réactionnels GRI-Mech sur la vitesse

La figure 4.8 montre les différents champs de vitesse de différentes versions de la GRI-Mech, ont incluent plus d'espèces chimique, le développement de champs de vitesse reste plus large, la vitesse axiale atteinte et de 3.82m/s mais la structure de la flamme est plus stable.

Par contre pour la version GRI-Mech1.2 (32 espèces) on trouve un désaccord par rapport au champ de vitesse, la structure de la flamme est plus mince et la vitesse maximale de la flamme calculée est de 4.75m/s. ce résultat a été trouver aussi pour les études expérimentale élaboré

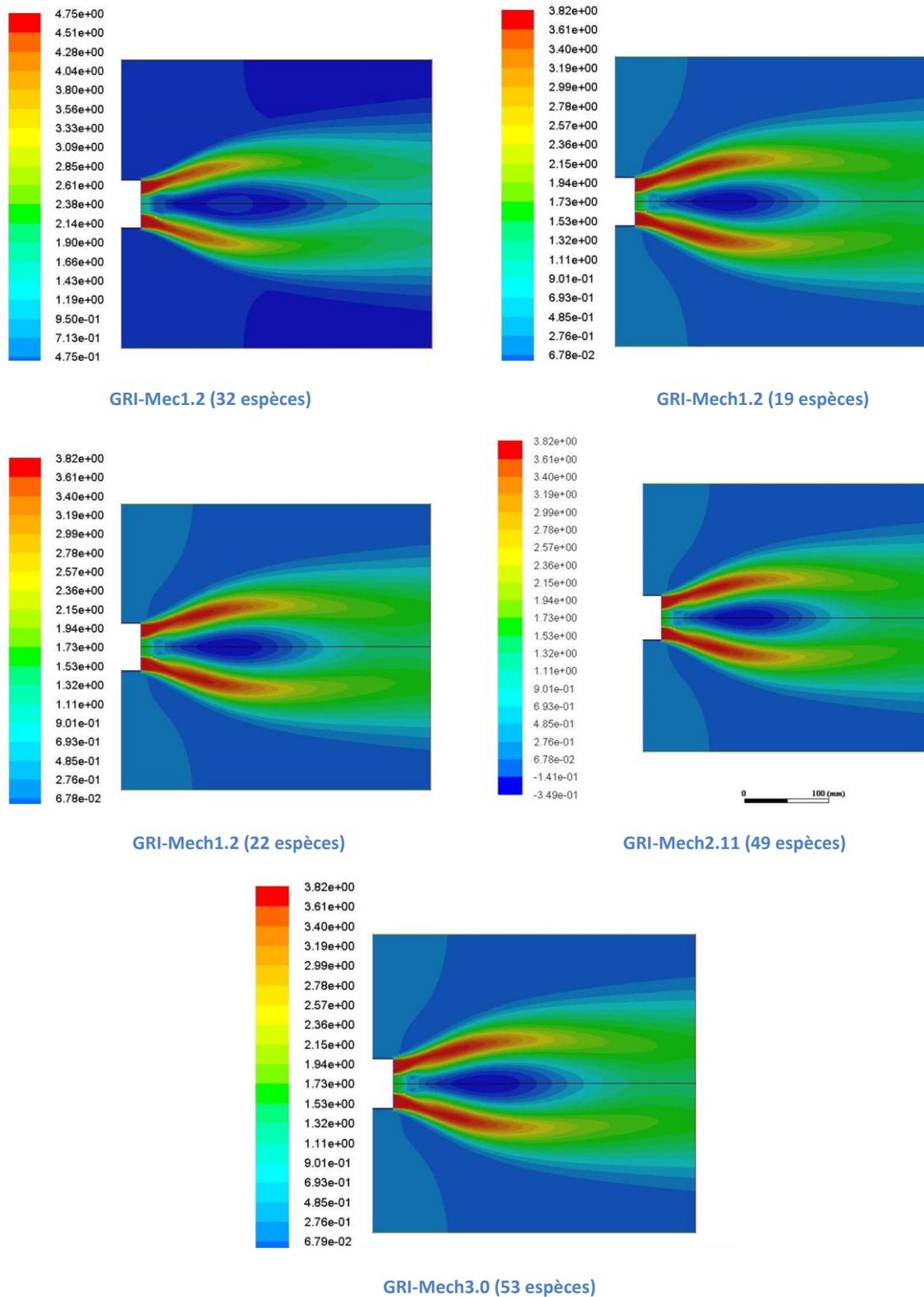


Figure 4.8 Contours des vitesses axiales (m/s) des espèces chimiques pour les différentes versions de la GRI-Mech

IV.3.3.Effet des mécanismes réactionnels GRI-Mech sur la distribution du CH₄

La figure 4.9 montre les différents schémas réactionnels des versions de GRI-Mech et leur influence sur la distribution du CH₄. Les résultats obtenus sont pratiquement les mêmes pour toutes les versions. On peut considérer que le CH₄ est consommé presque complètement pour donner le dioxyde de carbone et la vapeur d'eau. Cela signifie la présence de combustion. La version 3.0 a une meilleure influence sur le taux de réaction du CH₄ par rapport aux autres versions. Les versions qui incluent plus de chimie (53 espèces et 325 réactions), sur le taux de consommation de méthane ce qui a été aussi montré sur la figure 4.10.

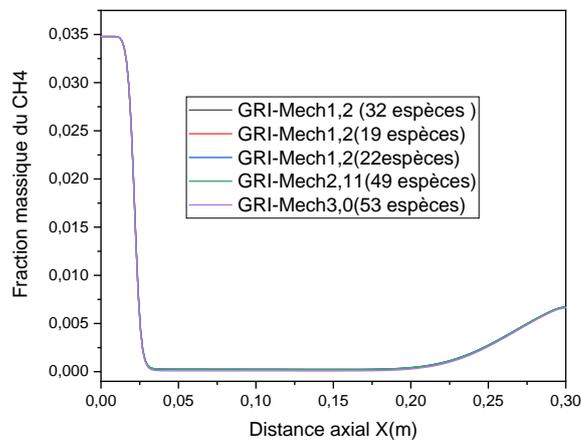


Figure 4.9 Effet des mécanismes réactionnels sur la distribution du CH₄ sur l'axe du brûleur

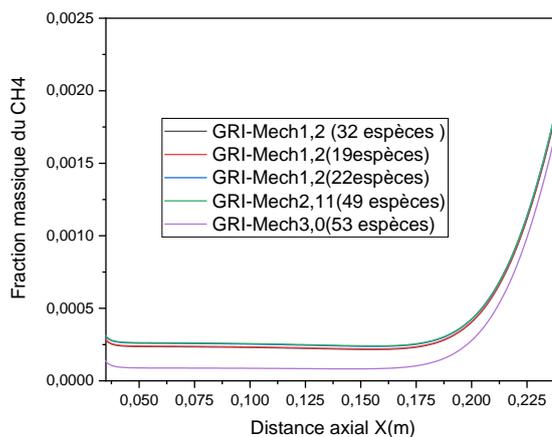


Figure 4.10 zoom sur l'effet des mécanismes réactionnels sur la distribution du CH₄ sur l'axe du brûleur

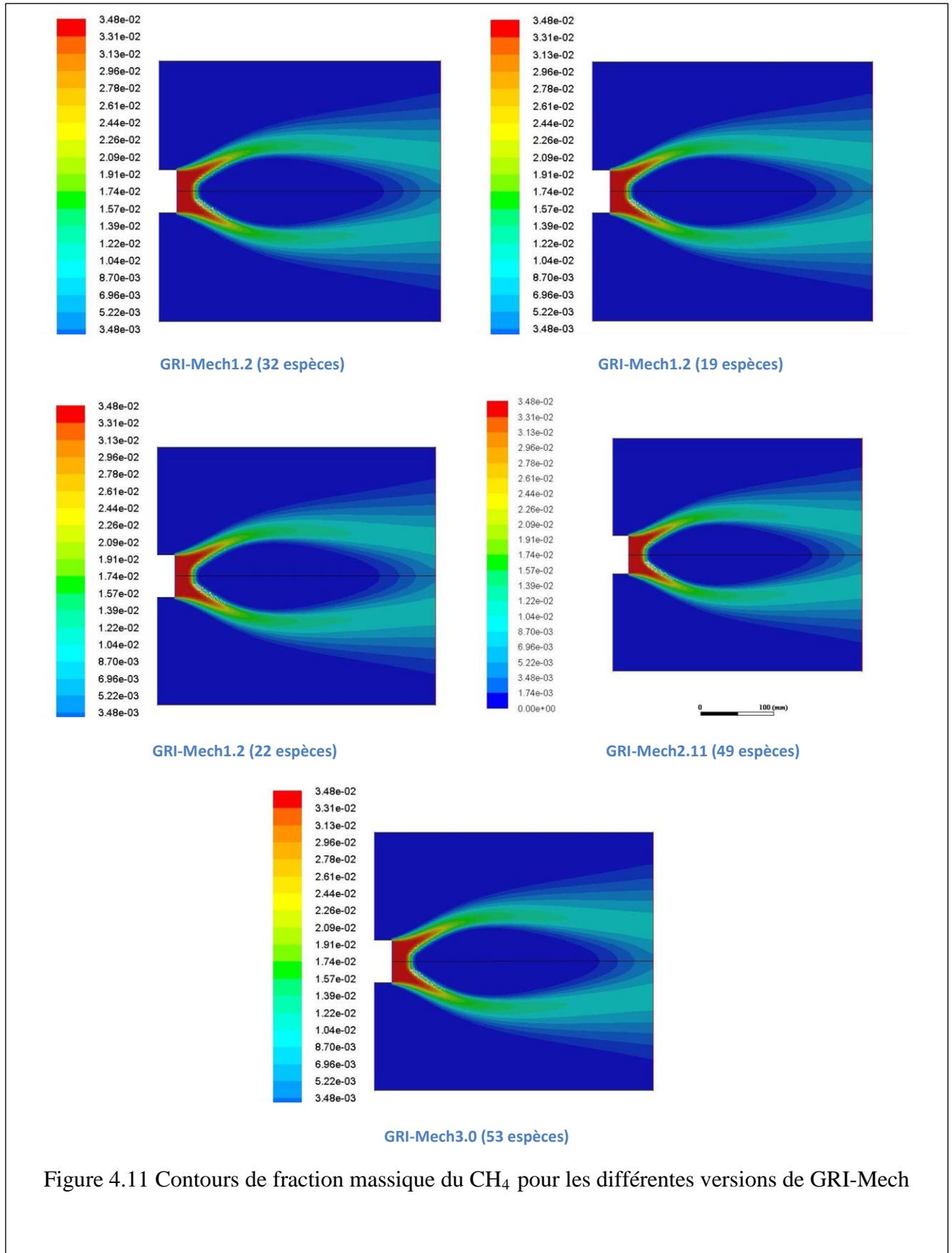


Figure 4.11 Contours de fraction massique du CH_4 pour les différentes versions de GRI-Mech

IV.3.4.Effet des mécanismes réactionnels sur l'apparition du CO

Le monoxyde de carbone est un gaz dangereux pour la santé. Il faudrait une concentration inférieure à 1ppm de CO dans l'air pour une respiration sécuritaire. Donc son étude est très importante dans la conception d'un dispositif de combustion.

Les figures 4.12, 4.13, et 4.14 montrent une très bonne prédiction du CO sur l'axe du brûleur, le taux d'apparition du CO est trop petit, la flamme manque de carburant. La version GRI-Mech3.0 montre une très bonne prédiction du CO en incluant plus de chimie (53 espèces et 325 réactions) par rapport aux autres versions testées.

L'apparition du CO est due à la dissociation des espèces chimiques. La température du mélange augmente et les espèces commencent leur transformation. Le monoxyde de carbone apparaît et augmente au fur et à mesure, dans le même sens que la température des réactifs. Il atteint son maximum lorsque la température de combustion est atteinte.

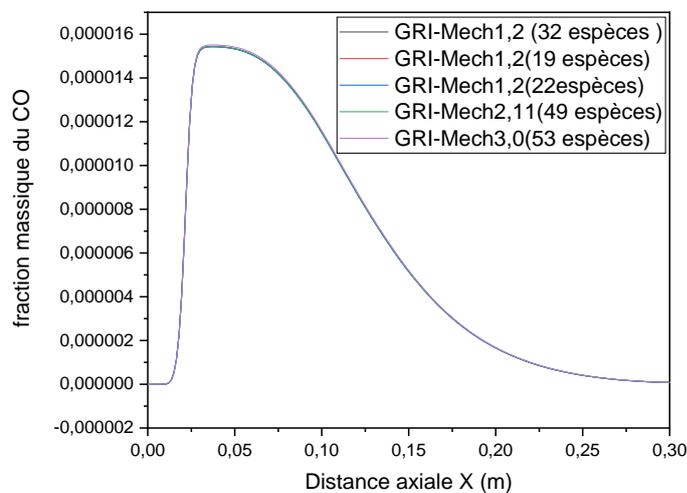


Figure 4.12 Effet des mécanismes réactionnels sur l'apparition du CO

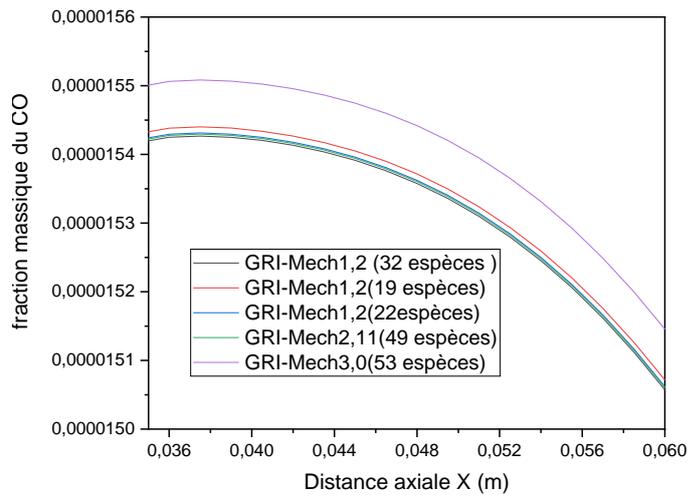


Figure 4.13 zoom sur l'effet des mécanismes réactionnels sur l'apparition du CO

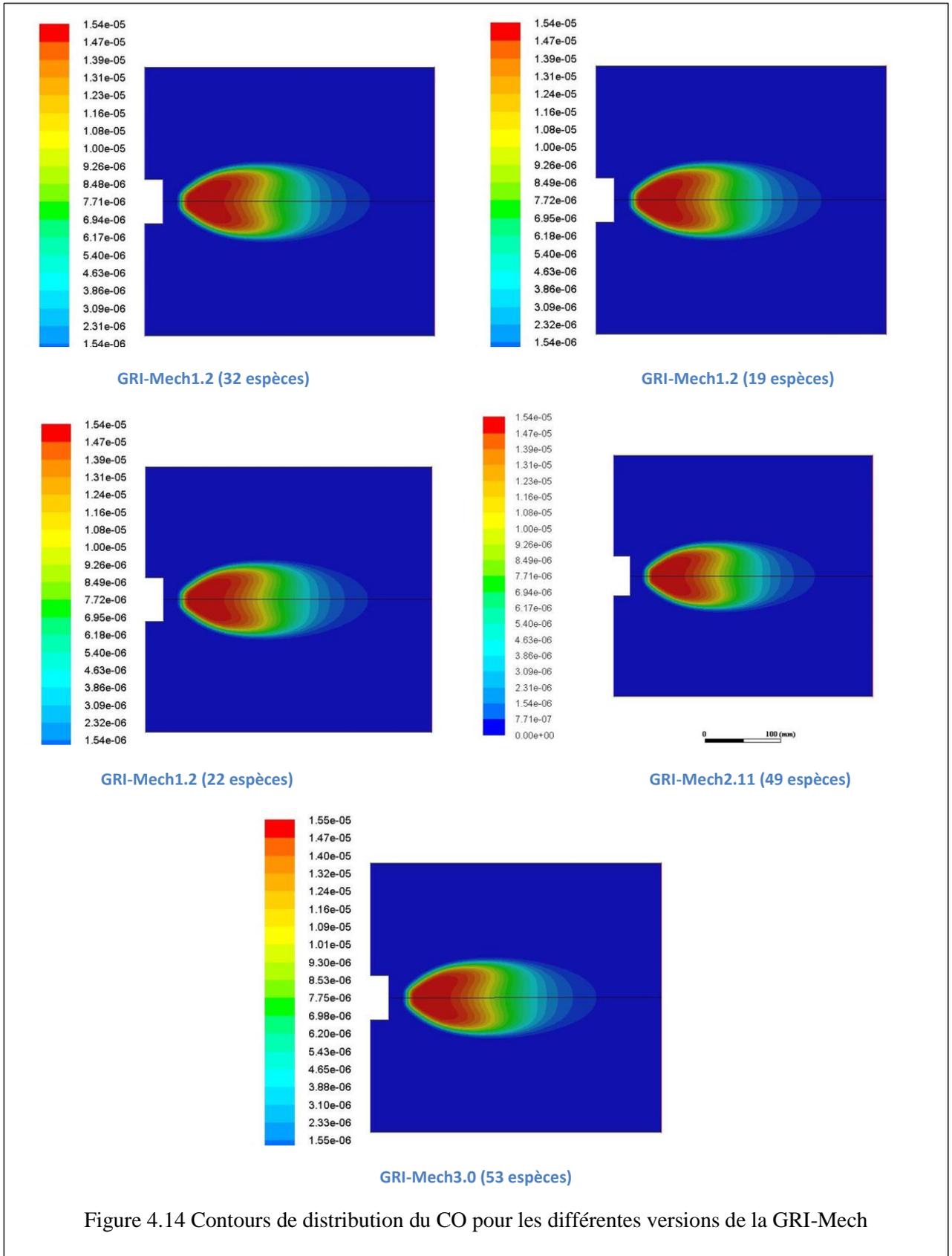


Figure 4.14 Contours de distribution du CO pour les différentes versions de la GRI-Mech

IV.3.5.Effet des mécanismes réactionnels sur l'apparition du CO₂

Le CO₂ est un gaz inévitablement présent dans les produits de combustion.

La figure 4.15 présente l'effet de différents tests des mécanismes réactionnels sur l'axe du brûleur. Le résultat obtenu montre un taux de prédictions de CO₂ pratiquement semblable pour toutes les versions testées. La figure 4.16 montre une petite augmentation des taux d'apparition du CO₂ des pour la version GRI-Mech 3.0 (53 espèces et 325) qui traite plus de chimie par rapport aux autres versions, ce qui signifie sa bonne prédictions des espèces chimiques.

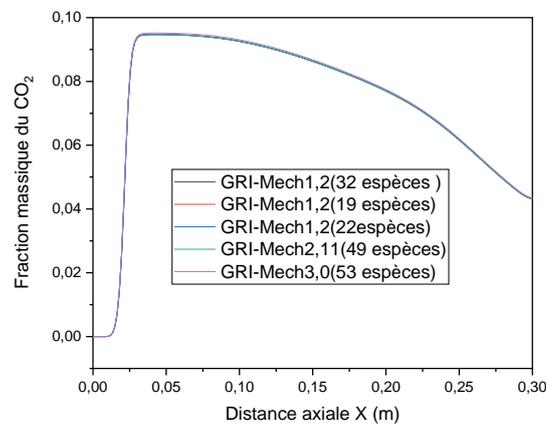


Figure 4.15. Effet des mécanismes réactionnels sur l'apparition du CO₂ sur l'axe du brûleur

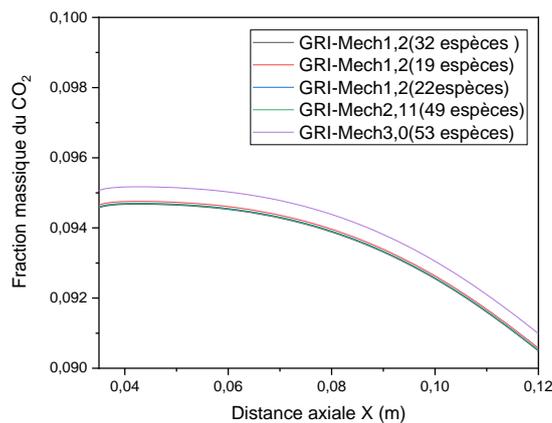


Figure 4.16. (Zoom) Effet des mécanismes réactionnels sur l'apparition du CO₂ sur l'axe du brûleur

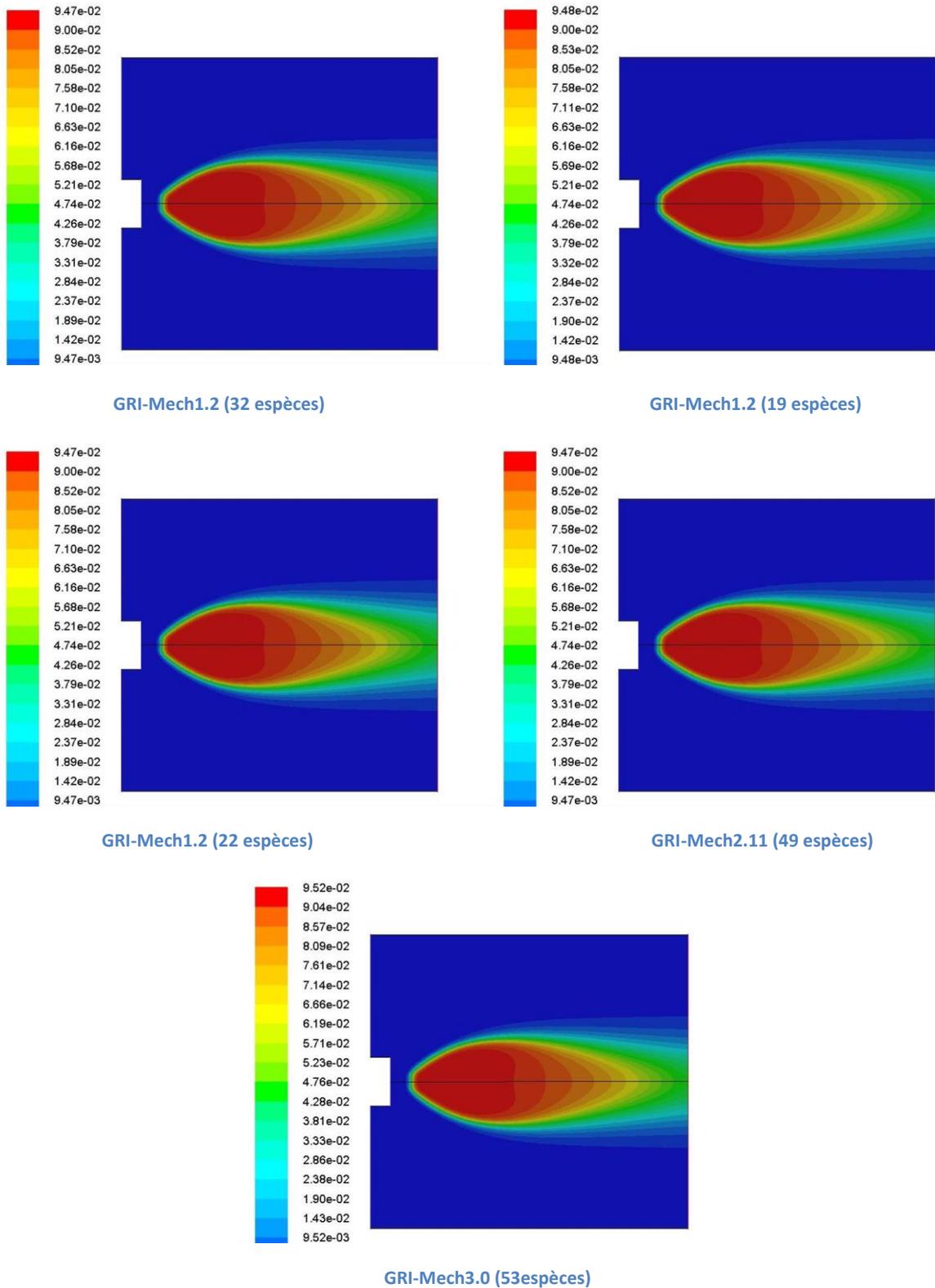


Figure 4.17 Contours de distribution du CO₂ sur l'axe du bruleur pour différentes versions de GRI-Mech

IV.3.6. Effet des mécanismes réactionnels sur l'apparition des NOx

Les oxydes d'azote ou oxydes nitriques se forment dans les gaz brûlés à haute température au cours du processus de combustion. Les oxydes d'azote n'entrent pas dans la formulation des équations chimiques que décrit une cinétique chimique. Leur processus se fait en marge, mais doit toujours être considéré dans la mesure où la combustion du combustible se fait avec de l'air ambiant

L'analyse de l'apparition des NOx est le but majeur de cette étude. La figure 4.18 et 4.19 montre l'effet des mécanismes réactionnel sur l'apparition des NO. Les valeurs maximum prédites par les différentes versions de la GRI-Mech sur l'axe du brûleur. On constate que pour les courbes qui représente les versions 1.2 qui inclus (19 espèces et 84 réaction), (32 espèces et 175 réaction) et (22 espèces et 104 réaction) et la version 2.11 qui traite (49 espèces et 277 réaction) ont presque le même taux de prédiction de NO $2.14.10^{-7}$, sauf que pour la version 1.2 on remarque une petite surestimation des résultats. Pour la version 3.0 qui traite (53 espèces et 325) on remarque que le taux de prédiction d'émissions NO est très élevé par rapport aux autres versions, cela signifie qu'on inclut plus de chimie on obtiendra une bonne prédiction d'émission NOx

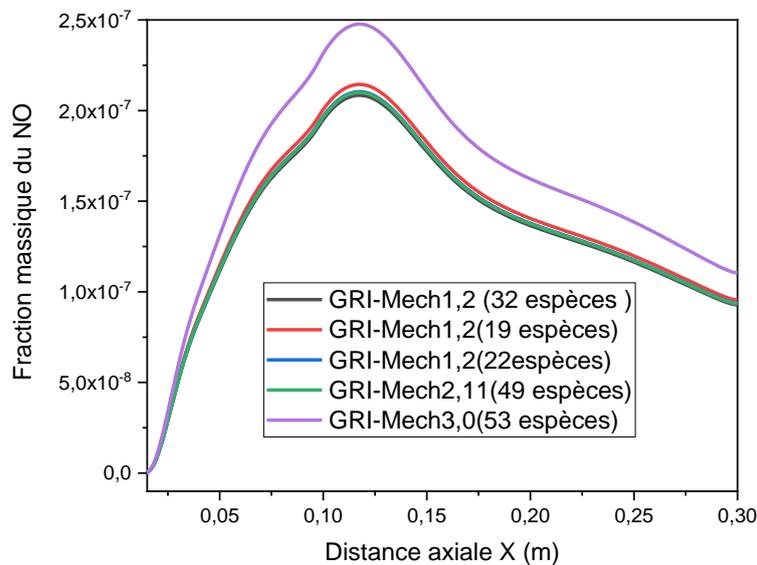


Figure 4.18. Effet des mécanismes réactionnels sur l'apparition des NOx sur l'axe de brûleur

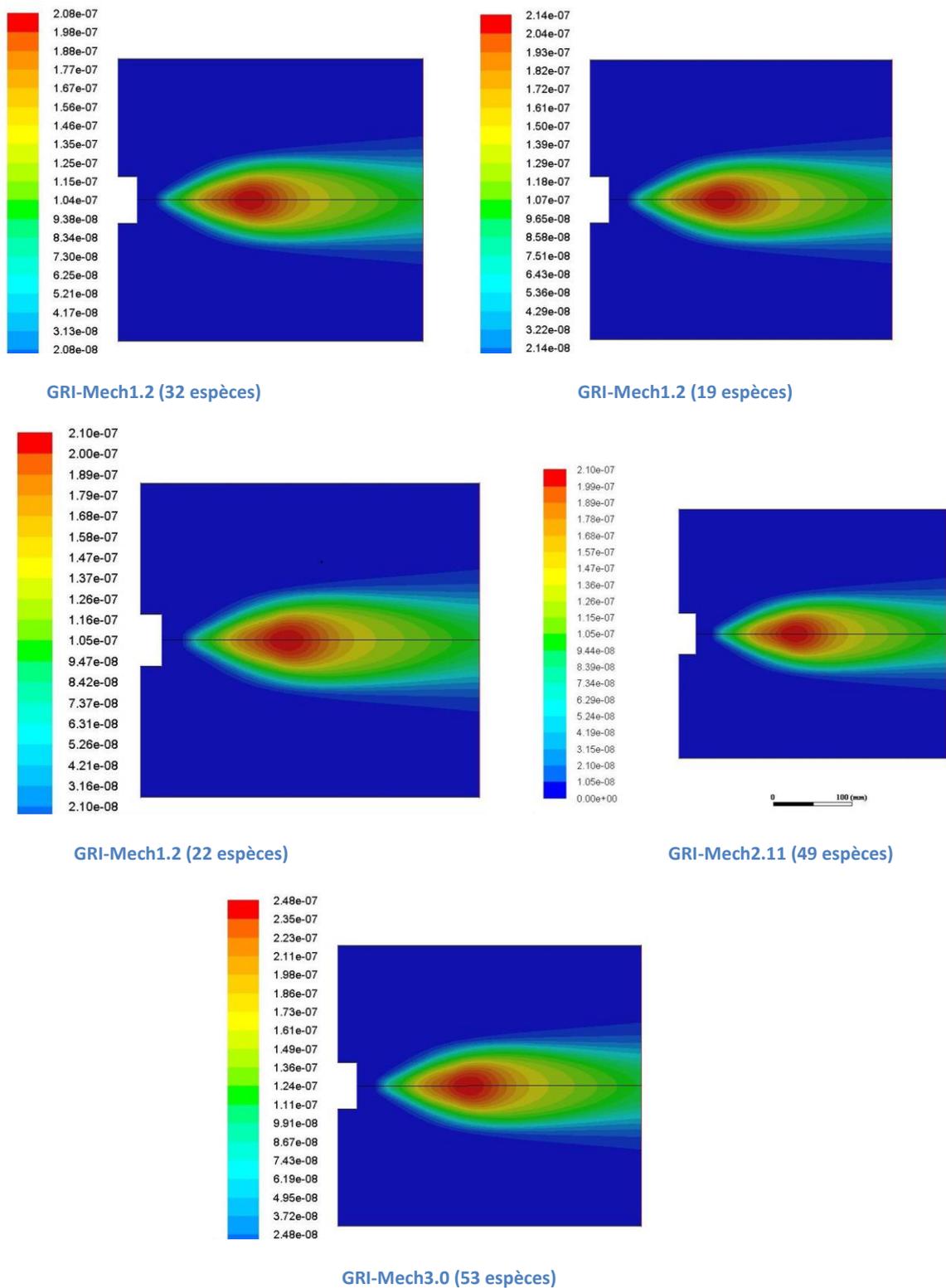


Figure 4.19 Contours des fractions massiques de l'émission polluante NO pour différents version de GRI-Mech

IV.4. Conclusion

Dans ce chapitre, on a présenté les résultats de la simulation numérique des tests du mécanisme réactionnels GRI-Mech sur des flammes prémélangées turbulente de méthane-air swirlées pour une configuration de bruleur LSB. Le modèle Partially Premixed a été testé et validé. GRI-Mech a été étudié en s'intéressant sur la température, vitesse de réaction, la distribution du CH₄ et la prédiction d'émissions polluantes (CO et NO_x). La version GRI-Mech3.0 montre une meilleur précision ont ce qui concerne l'apparition des espèces chimique

Conclusion générale

La recherche présentée dans ce mémoire est une étude de simulation numérique sur les mécanismes réactionnels des flammes prémélangées turbulentes de méthane-air stabilise par un faible nombre de swirl. L'écoulement réactif traverse un bec bruleur de type LSB constitué d'une plaque perforée axiale où l'écoulement réactif est purement axial avec un taux de turbulence réduit et d'un espace annulaire générateur de swirl de 10 mm

Le but majeur de cette étude est la compréhension du processus de combustion des flammes de méthane-air, en particulier l'effet des mécanismes réactionnels. Un autre aspect important de cette recherche est l'analyse de l'apparition des polluants (NO_x thermique et CO). Pour ce fait :

- Une revue bibliographique des recherches scientifiques disponibles qui s'intéressent à la combustion ont été présentés
- Les écoulements réactifs swirlés ont été expliqués en détail.
- Le code de calcul ANSYS Fluent 17.2 a été utilisé pour toutes les simulations numériques.
- le modelé Partially Premixed a été utilisé pour le test des mécanismes réactionnel détaillé
- Les hypothèses du problème ont été posées.
- L'étude de la structure a été faite avec un choix de maillage testé
- Les différentes versions de la GRI-Mech ont montrés des résultats très satisfaisante n'ont pas fait apparaitre des zones de recirculation. Ce qui certifie la technique de stabilisation des flammes à une distance non-nul du bec pour les bruleurs LSB qui restent une alternative pour les bruleurs à basses émissions polluantes.
- La valeur maximale des NO_x thermiques et l'apparition du CO ont été prédites avec une très bonne précision pour la GRI-Mech3.0 qui traite 53 espèces et 325 réactions

Références

- [1]. Rohani, B., & Saqr, K. M. (2012). Effects of hydrogen addition on the structure and pollutant emissions of a turbulent unconfined swirling flame. *International Communications in Heat and Mass Transfer*, 39(5), 681–688. doi:10.1016/j.icheatmasstransfer.2012.03.020
- [2]. Sweeney, M. S., Hochgreb, S., Dunn, M. J., & Barlow, R. S. (2012). The structure of turbulent stratified and premixed methane/air flames II: Swirling flows. *Combustion and Flame*, 159(9), 2912–2929. doi:10.1016/j.combustflame.2012.05.014
- [3]. SAYAD, Parisa, SCHÖNBORN, Alessandro, et KLINGMANN, Jens. Experimental investigations of the lean blowout limit of different syngas mixtures in an atmospheric, premixed, variable-swirl burner. *Energy & fuels*, 2013, vol. 27, no 5, p. 2783-2793
- [4]. Zhen, H. S., Leung, C. W., & Cheung, C. S. (2013). Effects of hydrogen addition on the characteristics of a biogas diffusion flame. *International Journal of Hydrogen Energy*, 38(16), 6874–6881.
- [5]. Hermeth, S., Staffelbach, G., Gicquel, L. Y. M., Anisimov, V., Cirigliano, C., & Poinso, T. (2014). Bistable swirled flames and influence on flame transfer functions. *Combustion and Flame*, 161(1), 184–196. doi:10.1016/j.combustflame.2013.07.022
- [6]. Stöhr, M., Arndt, C. M., & Meier, W. (2015). Transient effects of fuel–air mixing in a partially-premixed turbulent swirl flame. *Proceedings of the Combustion Institute*, 35(3), 3327–3335. doi:10.1016/j.proci.2014.06.095
- [7]. Branco, J., Coelho, P. J., & Costa, M. (2016). Experimental and numerical investigation of turbulent diffusion flames in a laboratory combustor with a slot burner. *Fuel*, 175, 182–190. doi:10.1016/j.fuel.2016.02.046

- [8]. MOHAMED, CHAOUR, SOFIANE, BOULKROUNE, MOUNIRA, Bourebia, et al. Étude numérique de l'influence des mélanges gazeux dans un four de réchauffage. In : Journées d'Etudes Nationales de Mécanique, JENM'2015. 2015.
- [9]. Colorado, A. (2016). Pollutant Emissions and Lean Blowoff Limits of Fuel Flexible Burners Operating on Gaseous Renewable and Fossil Fuels. *UC Irvine*. ProQuest ID: Colorado_uci_0030D_13823. Merritt ID: ark:/13030/m53n6qps. Retrieved from <https://escholarship.org/uc/item/2488h7t1>
- [10]. Bouras, F., El Hadi Attia, M., Khaldi, F., & Si-Ameur, M. (2017). Control of methane flame properties by hydrogen fuel addition: Application to power plant combustion chamber. *International Journal of Hydrogen Energy*, 42(13), 8932–8939. doi:10.1016/j.ijhydene.2016.11.146
- [11]. ATTIA, Mohammed El Hadi, DRISS, Zied, et KHECHEKHOUICHE, Abderrahmane. Effet de l'ajout de Carburant d'Hydrogène sur la Flamme de Méthane: Application pour les Paramètres Thermochimique.
- [12]. Rajpara, P., Shah, R., & Banerjee, J. (2018). Effect of hydrogen addition on combustion and emission characteristics of methane fuelled upward swirl can combustor. *International Journal of Hydrogen Energy*, 43(36), 17505–17519. doi:10.1016/j.ijhydene.2018.07.111
- [13]. Zhanga, W., Wang, J., Lina, W., Lin, B., Wub, Y., Zhanga, M., & Huang, Z. Effects of hydrogen addition on the stabilization of lean premixed swirl flames.
- [14]. GE, Bing, JI, Yongbin, ZHANG, Zilai, et al. Experiment study on the combustion performance of hydrogen-enriched natural gas in a DLE burner. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2019, vol. 44, no 26, p. 14023-14031.
- [15]. SAMIRAN, Nor Afzanizam, CHONG, Cheng Tung, NG, Jo-Han, *et al.* Experimental and numerical studies on the premixed syngas swirl flames in a model combustor. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2019, vol. 44, no 44, p. 24126-24139.

- [16]. WANG, Mingxiao, ZHONG, Yingjie, et DENG, Kai. Experiment investigation of the effects of hydrogen content on the combustion instability of methane/hydrogen lean premixed swirl flames under different acoustic frequency ranges. *AIP Advances*, 2019, vol. 9, no 4, p. 045206
- [17]. OZTARLIK, Gorkem, SELLE, Laurent, POINSOT, Thierry, *et al.* Suppression of instabilities of swirled premixed flames with minimal secondary hydrogen injection. *Combustion and Flame*, 2020, vol. 214, p. 266-276.
- [18]. <http://combustion.berkeley.edu/gri-mech/new21/overview.html#cautionarynotes>
- [19]. M. Frenklach, H. Wang, C.-L. Yu, M. Goldenberg, CT Bowman, RK Hanson, DF Davidson, EJ Chang, GP Smith, DM Golden, WC Gardiner
- [20]. CT Bowman, RK Hanson, DF Davidson, WC Gardiner, Jr.V. Lissianski, GP Smith, DM Golden, M. Frenklach etM.Goldenberg, http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/
- [21]. Gregory P. Smith, David M. Golden, Michael Frenklach, Nigel W. Moriarty, Boris Eiteneer, Mikhail Goldenberg, C. Thomas Bowman, Ronald K. Hanson, Soonho Song, William C. Gardiner, Jr. Vitali V. Lissianski et Zhiwei Qin http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/
- [22]. Vincent Fichet. Modélisation de la combustion du gaz naturel par réseaux de réacteurs avec cinétique chimique détaillée. Modélisation et simulation. Ecole Centrale Paris, 2008. Français.
- [23]. Cellek, M. S., & Pınarbaşı, A. (2018). Investigations on performance and emission characteristics of an industrial low swirl burner while burning natural gas, methane, hydrogen-enriched natural gas and hydrogen as fuels. *International Journal of Hydrogen Energy*, 43(2), 1194–1207. doi:10.1016/j.ijhydene.2017.05.107

[24]. Yu, M., Zheng, K., Zheng, L., Chu, T., & Guo, P. (2015). *Effects of hydrogen addition on propagation characteristics of premixed methane/air flames*. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 34, 1–9. doi:10.1016/j.jlp.2015.01.017

[25]. Vincent Robin. Contribution à la modélisation des écoulements turbulents réactifs partiellement prémélangés. Electric power. Université de Poitiers; ENSMA, 2007. French.

[24]. Yu, M., Zheng, K., Zheng, L., Chu, T., & Guo, P. (2015). *Effects of hydrogen addition on propagation characteristics of premixed methane/air flames*. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 34, 1–9. doi:10.1016/j.jlp.2015.01.017

[25]. Vincent Robin. Contribution à la modélisation des écoulements turbulents réactifs partiellement prémélangés. Electric power. Université de Poitiers; ENSMA, 2007. French.

[26]. Abdelbaki Mameri. Etude numérique de la combustion turbulente du prémélange pauvre méthane/air enrichi à l'hydrogène. Other. Université d'Orléans, 2009. French.

[27]. BOUAROUJ, Asma et GUEMINI, Miloud. Etude par modélisation cinétique du mécanisme de combustion de l'hydrogène. 2012.

[28]. SAVRE, Julien. Simulation numérique instationnaire de la combustion turbulente au sein de foyers aéronautiques et prédiction des émissions polluantes. 2010. Thèse de doctorat.

[29]. BORGHI, Roland et CHAMPION, Michel, Modélisation et théorie des flammes. Editions Technip, 2000.

[30]. MAMERI, A., GÖKALP, I., et BOUKEFFA, D. Simulation numérique de la stabilisation d'une flamme turbulente de méthane en régime pauvre par ajout d'hydrogène. *Revue des énergies renouvelables*, 2007, vol. 10, no 1, p. 39-48.