

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



Université Echahid Hamma Lakhdar d'El-Oued

FACULTE DE TECHNOLOGIE

DEPARTEMENT DE GENIE MECANIQUE

Mémoire de fin d'étude

Présenté pour l'obtention du diplôme de

MASTER ACADEMIQUE

Domaine: Sciences et Technologies

Filière: Génie mécanique

Spécialité: Energétique et énergie renouvelable

Thème

Simulation Numérique de la Combustion Non
Prémélangée Méthane-Hydrogène dans l'air :
Application dans une Chambre de Combustion
Cylindrique

Devant le jury composé de :

Présenté par :

LETAIM Fethi

Président

- Aya Bilal

MENECEUR Redah

Examineur

- Messalem Chaouki

BOUKHARI Ali

Examineur

ATTIA Mohammed El Hadi

Encadreur

2016-2017

Remerciements

Le plus grand Merci tout d'abord revient à «Dieu» qui, lui seul, nous a guidé dans le bon sens durant notre vie et qui nous a donné le courage, la volonté, et la force pour élaborer ce travail de recherche.

*Ce mémoire de master est le résultat de travail de recherche de plusieurs mois. Nous souhaitons adresser tous nos remerciements aux personnes qui nous ont apporté leur soutien et qui ont ainsi contribué à l'élaboration de ce mémoire. Nous remercions vivement et chaleureusement **Dr. ATTIA MOHAMMED EL HADI** encadreur de ce mémoire, pour nous avoir guidé et soutenu tout au long de ce mémoire. Nous la remercions particulièrement pour la confiance qu'elle nous a accordée, pour sa rigueur scientifique, pour sa patience et pour ses conseils judicieux qui ont contribué à la réalisation et à l'accomplissement de ce travail. Nous tenons à remercier également les membres de jury d'avoir bien accepté d'examiner notre travail. Nous exprimons notre reconnaissance aux enseignants du département de Génie Mécanique à l'université Hamma Lakhdar d'El Oued, pour l'encadrement pédagogique durant ces deux années de formation de master. Nous adressons enfin nos remerciements à nos familles et nos amis pour leurs encouragements le long de la réalisation de ce travail.*

Dédicace

*Nous avons le grand plaisir de dédier ce modeste travail à :
Nos chers parents, qui nous toujours soutenu dans notre études.*

Tous nos femmes et nos enfants.

Tous nos frères et sœurs chacun avec son nom.

Tous nos familles chacun son nom.

Tous nos enseignants chacun son nom.

Tous nos collègues chacun son nom.

Chaque personne qui nous aidé chacun son nom.

Promo Energétique et énergie renouvelable 2016/2017

La table des matières

Liste des figures.....	vi
Liste des tableaux.....	vii
Nomenclature.....	viii

Introduction et études bibliographiques

1. Motivation.....	1
2. Étude bibliographique.....	2
3. Objectif.....	4
4. Contenu du mémoire.....	5

Chapitre I : Les Combustibles : Hydrogène (H_2) et Méthane (CH_4)

I.1 Aspect énergétique de l'hydrogène.....	7
I.2 Sources naturelles de l'hydrogène.....	8
I.2.1 Le gaz naturel.....	8
I.2.1.1 Caractéristiques.....	8
I.2.1.2 Valorisation.....	9
I.2.2 Le biogaz.....	10
I.2.2.1 Caractéristiques.....	10
I.2.2.2 Composition.....	12
I.2.2.3 Valorisation.....	12
I.2.3 L'eau.....	13
I.2.3.1 Généralités.....	13
I.2.3.2 Electrolyse à Haute Température.....	14
I.2.4 La production d'hydrogène à partir du méthane.....	15
I.2.4.1 Le vaporeformage.....	15
I.3 Méthane (CH_4)	16
I.3.1 Définition.....	16
I.3.2 Propriétés physico-chimiques.....	17
I.3.3 Comparaison entre l'hydrogène H_2 et Méthane CH_4	18

I.3.4 Application.....	19
Conclusion.....	20

Chapitre II : Modélisation de la Combustion Turbulente Non-Prémélangée

II.1 Modes de combustion élémentaires.....	22
II.2 La simulation numérique de la combustion turbulente.....	23
II.2.1 RANS.....	23
II.2.2 DNS.....	24
II.2.3 LES.....	24
II.3 Description statistique sur l'écoulement turbulent.....	25
II.3.1 Nombre de Reynolds élevé.....	25
II.3.2 Équations de Navier- Stokes compressibles.....	26
II.3.3 La théorie de la turbulence de Kolmogorov.....	28
II.4 Modèle dynamique de turbulent.....	29
II.4.1 Généralité sur le modèle la simulation aux grandes échelles LES.....	29
II.4.2 Les équations de LES.....	31
II.4.3 Modèles de sous-maille.....	32
II.4.4 Le modèle WALE.....	33
II.5 Le modèle de la Fonction de Densité de Probabilité (PDF).....	34
II.5.1 La Fraction de mélange.....	34
II.5.2 La variable d'avancement.....	36
II.6 Généralité du modèle PDF.....	38
II.7 Types de l'approche PDF.....	40
II.7.1 Le modèle à PDF présumée.....	40
II.8 Application des modèles.....	42
Conclusion.....	43

Chapitre III : Le Comportement de la Combustion de l'Hydrogène et le Méthane

III.1 Configuration expérimentale et domaine d'application.....	46
III.1.1 La configuration de la chambre de combustion.....	46
III.1.2 Équations de bilan.....	47

III.2 Résultats et discussion.....	49
III.2.1 Validation Numérique.....	49
III.2.1.1 Vitesse axiale.....	49
III.2.1.2 Température	50
III.2.1.3 Fraction massique de monoxyde de carbone.....	52
III.2.2 Comparaison des combustibles H ₂ et CH ₄	53
III.2.2.1 Vitesse axiale.....	53
III.2.2.2 Température.....	54
III.2.2.3 Fraction de masse de monoxyde de carbone.....	55
Conclusion.....	56
 Conclusion générale.....	 57
Références.....	58

Liste des figures

Figure I.1: Principales origines de la production d'hydrogène	8
Figure I.2: Production d'énergie primaire de biogaz de l'Union européenne en 2007..... (en ktep)	11
Figure I.3: Energie à fournir pour une réaction d'électrolyse d'eau.....	14
Figure I.4: Les sources d'hydrogène et son utilisation.....	19
Figure II.1: Représentation temporelle du degré de détail des différentes méthodes de... simulation	25
Figure II.2: le spectre d'énergie d'une Turbulence Homogène Isotrope : concept LES...	29
Figure II.3: Exemple de l'injection non-prémélangée.....	35
Figure II.4: Définition de la variable d'avancement.....	36
Figure III.1: Schéma du brûleur.....	47
Figure III.2: Profils de vitesse axiale moyenne.....	50
Figure III.3: Profils de la température moyenne.....	51
Figure III.4: Profils de la fraction massique de monoxyde de carbone.....	52
Figure III.5: Profils des vitesses axiales considérées de l'hydrogène et le méthane.....	53
Figure III.6: Profils des températures moyennes considérées de l'hydrogène et le..... méthane.	54
Figure III.7: Profils des fractions massiques de monoxyde de carbone considéré de..... l'hydrogène et le méthane	55

Liste des Tableaux

Table I.1 : Composition moyenne de trois sortes de biogaz	12
Table I.2 : Comparaison entre les propriétés d'hydrogène (H_2) et le méthane (CH_4).....	19

Nomenclature

Lettres latines

S	terme de Source
F	le flux descriptif des variables Conservatives
Q	variables Conservatives
A	Tenseur de la déformation
C	Chaleur spécifique
c	Paramètre d'avancement
C_S	Constant de Smagorinsky
C_W	Constant WALE
D	Coefficient de diffusion
E	Spectre d'énergie
e	Energie interne
J	Flux diffusif
h	Enthalpie
h_i	Enthalpie de l'espèce i
k	Energie cinétique
L	Grande échelle de l'écoulement de Kolmogorov
p	Pression
Pr	Nombre de Prandtl
N	Nombre des espèces chimiques
M	Masse molaire des espèces chimique
q	Flux de chaleur du à la diffusion
R	Constante de gaz parfait
Re	Nombre de Reynolds
s	Terme source
Sc	Nombre de Schmidt
t	Temps
T	Température
u	Vitesse

V_i	Vitesse de diffusion de l'espèce i
y_i	Fraction massique de l'espèce i
Z	Fraction de mélange

Lettres grecques

ε	Taux de dissipation
ρ	Masse volumique
λ	Conductivité thermique
κ	Diffusivité thermique
σ	Tenseur de contrainte
μ	Viscosité dynamique
ν	Viscosité cinématique
μ_T	Viscosité turbulente
η	Petite échelle de l'écoulement de Kolmogorov
ω_i	Terme source chimique de l'espèce i
τ_{ij}	Contrainte visqueuse
Φ	Richesse d'un écoulement d'alimentation
γ	Température ambiante
σ^2	la variance de la distribution
$\tilde{g}_{ij}^2$	gradient de vitesse résolu
δ_{ij}	delta Kronecker
$\tilde{S}_{ij}$	la vitesse de déformation de Tensor
T_{ij}	Tenseur de Reynolds

Indice

f	Espèces chimique
i	Composantes selon les axes x , y et z
les	Termes de sous maille
P	A pression constant
v	A volume constant
V	Termes visqueux et modèles de transport

r	coordonnées radiales
x	coordonnées spatiales

Abréviations

CFD	Computational Fluid Dynamics
ktep	kilotonne d'équivalent pétrole
EHT	Electrolyse à Haute Température
WGS	Water-Gaz-Shift
PAC	Pile à Combustible
DNS	Direct Numérique Simulation
LES	Large eddy simulation
PDF	Probability Density Function
RANS	Reynolds Averaged Nervier Stokes
WALE	Wall Adapting Local Eddy viscosity

Introduction

1- Motivation

Avec l'augmentation du souci concernant la baisse de la production d'énergie et la protection de l'environnement, la recherche sur les combustibles de substitution propres a attiré ces dernières années l'attention des scientifiques et des ingénieurs. De plus, la réglementation de plus en plus rigoureuse concernant les émissions de CO₂ d'une part et l'épuisement des réserves de combustible fossile d'autre part, a poussé la communauté scientifique à trouver des alternatives à ces combustibles. En effet, l'accroissement du parc automobile a engendré une augmentation de la consommation des combustibles conventionnels responsables de la hausse continue des émissions de polluants (monoxyde de carbone, hydrocarbures imbrûlés, oxydes d'azote et particules) et des gaz à effet de serre. La recherche dans les domaines de la qualité des carburants et de la combustion permettra une réduction progressive des émissions de polluants, une protection accrue de l'environnement et une amélioration du cadre de vie. L'addition de l'hydrogène au méthane a un effet sur la réduction du délai d'inflammation du mélange et l'augmentation de l'avance à l'allumage et la réduction de la pollution [1].

La combustion est l'un des procédés les plus importants dans la transformation de l'énergie, elle permet de convertir l'énergie chimique contenue dans les combustibles en chaleur. La combustion est nécessaire pour le transport, la génération d'énergie électrique, les procédés de fabrication, les moyens de chauffage,... Malgré les bienfaits de la combustion, elle reste le plus grand pollueur de notre planète. En plus de la chaleur, la combustion produit des émissions nocives pour l'environnement. Cette pollution résulte principalement des gaz et particules jetés dans l'air par les véhicules à moteur, les installations de chauffage, les centrales thermiques et les installations industrielles. Les émissions polluantes sont les oxydes de carbone, de soufre et d'azote, gaz à effet de serre, poussières, particules radioactives, produits chimiques, dioxygène, etc [2].

Le gaz naturel, qui est principalement constitué de méthane, offre de nombreux avantages économiques et environnementaux. Le gaz naturel a des niveaux d'émission de polluants relativement bas comparés aux autres combustibles fossiles. En ce qui concerne le dioxyde de carbone, la combustion du gaz naturel engendre respectivement 30 à 40% moins que le pétrole et le charbon à quantité d'énergie consommée identique. Toutefois, les émissions de polluants dues à la combustion du gaz naturel peuvent être réduites. Une alternative intéressante consiste à substituer l'hydrogène à une partie du gaz naturel, créant un combustible hybride moins polluant. Cette solution est une première étape vers une économie

hydrogène afin d'adapter graduellement les infrastructures, les normes et réglementations ainsi qu'informer et préparer le public. La participation de l'hydrogène provient de sa rareté sur la terre à l'état naturel, de sa forte capacité énergétique massique et de son caractère non polluant, sous réserve de le produire à partir de filières technologiques elles-mêmes propres [3].

L'hydrogène est perçu comme un vecteur énergétique actuellement prometteur tout comme l'électricité mais contrairement aux sources primaires d'énergie, il doit être fabriqué avant d'être utilisé. Si l'hydrogène présente actuellement tant d'attraits, c'est que cette molécule se combine aisément à l'oxygène de l'air pour donner de l'énergie et de l'eau comme seul sous-produit. Il est de plus très réactif et largement valorisable. Son utilisation n'est pas nouvelle puisque depuis son identification par Cavendish en 1766 et la mise au point de sa préparation par Lavoisier et Meunier en 1784, il intervient dans de nombreux processus industriels. Parmi les plus importantes applications, la synthèse de l'ammoniac est la première consommatrice d'hydrogène au niveau mondial. Il est utilisé également au cours du raffinage du pétrole lors des étapes d'hydrotraitement et d'hydrocraquage, lors de la synthèse du méthanol ou encore pour la synthèse d'hydrocarbures par le procédé Fisher-Tropsch. L'application la plus exigeante de ce vecteur énergétique reste de l'injecter dans la pile à combustible qui joue le rôle de convertisseur direct de l'énergie chimique de l'hydrogène en énergie électrique [4].

2. Étude bibliographique

Plusieurs travaux ont porté sur la combustion pauvre, **M. CANON *et al.* (1999)** ont étudié numériquement l'interaction de la flamme avec l'injecteur pour une combustion pauvre prémélangée du méthane en utilisant une chimie tabulée avec un mécanisme réactionnel réduit de cinq réactions élémentaires, déduit du GRIMECH. Pour modéliser la turbulence, les auteurs ont choisi le modèle $k-\epsilon$ avec un modèle PDF pour la vitesse et les composantes du gaz. Les conditions prises sont celles du fonctionnement des turbines à gaz pour une richesse entre 0.4-0.6 et une pression $P=30$ atm. Les résultats trouvés sont en bon accord avec l'expérience dans la zone proche de l'injection $x/d < 6$, cependant ils restent insuffisants dans la couche de mélange. L'amélioration du modèle de la turbulence peut résoudre le problème dans ce cas [5].

Plus tard en (1986), **G.YU *et al.*** Ont repris les mesures, ils ont utilisé un montage à jets opposés adiabatiques avec la technique LDV (Laser Doppler Anémométrie) pour les vitesses des flammes. Les mesures ont été faites sur des flammes étirées puis une extrapolation

linéaire a permis de trouver les vitesses des flammes non étirées. Ils ont montré que la vitesse de la flamme est fortement affectée par l'ajout de l'hydrogène. Une corrélation linéaire du taux de dopage par l'hydrogène avec la vitesse de flamme du combustible pure a été trouvée [6].

En (2003), une autre étude expérimentale faite par **P. GRIEBEL *et al.*** porte sur la mesure du champ d'écoulement et la structure de la flamme prémélangée pauvre (égale 0.5) du méthane sous haute pression (conditions des turbines à gaz). Une mesure PIV (Partille Image Vélocimétrie) est faite pour les intensités de turbulence et les échelles intégrales dans l'écoulement isotherme. La position du front de flamme moyen et la structure de la flamme ont été mesurée par le PLIF (Fluorescence induite par laser planaire) du radical OH. Les auteurs ont fait les mesures pour plusieurs grilles de turbulence, ils ont mis en évidence que le champ d'écoulement est divisé en deux zones: une proche de l'injecteur, où la turbulence de grille est dominante, et l'autre loin de l'injection, où la turbulence est générée par la couche de mélange [7].

Une étude expérimentale et numérique est faite par **S. GREGORY *et al.* (2003)** pour connaître l'effet de l'hydrogène sur la réponse des flammes prémélangées pauvres de méthane aux forts étirements (jusqu'à 8000 s^{-1}) induits par l'écoulement. La plage de richesse investiguée est de moins de 0.4 à 0.75. Les auteurs ont montré que l'ajout de l'hydrogène augmente la vitesse de la flamme et par conséquent son taux d'étirement maximal qui provoque l'extinction. Ces auteurs ont également noté le faible impact de la richesse d'extinction sur le taux d'étirement de l'écoulement, et la dépendance de la température d'extinction sur la richesse et non pas sur la composition du mélange [8].

Le but de l'étude de **K. Zhao *et al.* (2008)** est de connaître l'effet de l'hydrogène sur la caractéristique de la combustion du méthane. Les compositions de gaz de sortie ont été mesurées en ligne par un analyseur de gaz Gasmet DX4000 FTIR. Ils ont montré que l'hydrogène améliore l'activité du méthane pour toute la gamme de concentration en méthane [9].

En même année **F. Tabet, B. Sarh *et al.*** faire une étude de l'analyse la structure de $\text{CH}_4\text{-H}_2$ /air flamboyants turbulents, en mettant particulièrement l'accent sur le mélange et l'entraînement d'air. La quantité de H_2 dans le mélange de carburant varie avec un débit de carburant volumétrique constant. Le mélange est décrit par la fraction de mélange et sa variance tandis que l'entraînement d'air est caractérisé par le rapport entre le débit massique de

gaz et le débit massique de combustible au niveau de la section d'entrée. Le champ de flux et la chimie sont couplés par l'hypothèse du feuillage. La fraction de mélange et sa variance sont transportées par le code de la dynamique des fluides de calcul (CFD). L'aspect chimique lent des NO_x est traité en résolvant une équation de transport supplémentaire avec un terme source dérivé de la bibliothèque de fléaux. Les résultats obtenus montrent une amélioration du mélange avec addition d'hydrogène entraînant une forte consommation de CH₄ et un fort entraînement d'air dans la région de ligne centrale. En tant qu'effet global, les combustibles composites brûlent plus rapidement et réduisent ainsi le temps de séjour qui raccourcit finalement la longueur et l'épaisseur de la flamme. D'autre part, l'hydrogène est trouvé pour augmenter le niveau de NO_x [10].

En (2013), **Lotfi Ziani et al.** OÙ on a étudié la combustion turbulente non prémélangée avec l'approche PDF en utilisant trois modèles de turbulence: le modèle κ - ϵ , le modèle κ - ϵ modifié et le modèle RSM. Un mécanisme cinétique détaillé est utilisé dans les simulations numériques. Les trois modèles de la turbulence sont comparés et évalués avec les données expérimentales et les résultats numériques de la littérature. L'évaluation conclut que le κ - ϵ modifié est le plus approprié pour simuler ce type de flamme [11].

En (2011), **S. Bougrine et al.** Ont appliqué une approche numérique pour évaluer les propriétés de flamme prémélangée CH₄-H₂ diluée. Ils ont utilisé une chimie complexe [12]. Afin d'examiner les effets de H₂O₂ sur la mise en valeur des flammes de méthane prémélangées. **G.B.Chen et al. (2011)** ont étudié les caractéristiques de la vitesse laminaire de combustion, la température de la flamme adiabatique, et la concentration des espèces. Ils ont utilisé des méthodes numériques et le code de PREMIX avec le mécanisme chimique GRI-Mech3.0. Les résultats montrent que la vitesse laminaire de combustion et la température de flamme adiabatique de la flamme de méthane sont renforcées par l'addition de H₂O, qui augmente la consommation de CH₄ et le taux de production de CO réduit la production de CO₂ pour réduire la formation de monoxyde de carbone. La concentration en OH est augmentée avec l'augmentation de l'addition de H₂O₂ [13].

3. Objectif

Ce travail, nous avons étudié numériquement une flamme turbulente de (méthane où hydrogène)/air générée par un bruleur cylindrique non prémélangée. Les simulations numériques sont réalisées à l'aide du code de calcul CFD "FLUENT" comme solveur et "Gambit" pour le maillage. La méthode des volumes finis a été utilisée pour résoudre les

équations de Navier-Stokes régissant l'écoulement. La modélisation de la combustion est basée sur les modèles LES/PDF. Dans cette étude, les modèles de turbulence a été faite sur la base de la répartition les paramètres de combustion où nous avons constaté que la modélisation numérique d'un écoulement turbulent d'une flamme de diffusion, en utilisant le modèle couplée LES/PDF, donne des résultats plus satisfaisantes d'une manière qualitative et quantitative.

Les résultats obtenus donnent un bon accord avec d'autre résultat de simulation. Nous concluons en discutant et en expliquant ces résultats dans le dernier chapitre et la conclusion.

4. Contenu du mémoire

Ce mémoire comporte trois chapitres organisés comme suit:

Chapitre I : Ce premier chapitre comporte des généralités sur la combustion et la turbulence, tout en illustrant les caractéristiques et les équations de chacun de ces deux phénomènes. On donne des informations générales sur la combustion et rappeler les caractéristiques des combustibles l'hydrogène (H_2) et le méthane (CH_4), et faire une comparaison entre leur propriété de combustion.

Chapitre II : Dans ce chapitre on commence par montre les Modèles de combustion élémentaires ensuite il donne une présentation de la simulation numérique de la combustion turbulente après on à faire une description statistique sur l'écoulement turbulent. Ainsi, on a consacré à la présentation du modèle de la combustion PDF ; Le principe, les modèles, et le couplage avec LES.

Chapitre III : Ce dernier chapitre présente l'application le couplage des modèles LES-WALE et l'approche Beta-PDF à une configuration industrielle tridimensionnelle: deux jets coaxiaux qui injectent l'air et l'hydrogène ou le méthane dans une chambre de combustion cylindrique. Dans ce chapitre, nous validons avec les données expérimentales dans les mêmes stations et les mêmes conditions. Et, les calculs réalisés permettent de tester le comportement des combustibles (H_2 - CH_4). Les résultats montrent que les modèles sélectionner donne un accord satisfaisant avec toutes les régions considérées.

Chapitre I

Les Combustibles : Hydrogène (H₂) et Méthane (CH₄)

Depuis que l'homme a su les déclencher et les maîtriser, les phénomènes de combustion lui ont permis d'assurer sa survie (chauffage, éclairage, alimentation) puis d'accéder à la civilisation industrielle. Dans notre monde moderne, la combustion vive du charbon, des hydrocarbures ou d'autres produits organiques permet le fonctionnement des foyers domestiques et industriels et des différents types de moteurs utilisés eux-mêmes pour le transport terrestre, maritime et aérien, ou encore pour l'agriculture.

Les combustibles les plus divers, qu'ils soient sous forme gazeuse, liquide ou solide peuvent être utilisés. Parmi les plus courants, citons le bois, le charbon, les hydrocarbures (**méthane CH₄**, propane C₃H₈, essence, gasoil, kérosène, fioul...), **l'hydrogène (H₂)**. Le comburant est le plus souvent l'oxygène de l'air, plus exceptionnellement de l'oxygène pur (moteur-fusée, certains fours industriels) qui permet d'atteindre des températures plus élevées mais pose des problèmes de sécurité. Plus rarement, d'autres comburants sont utilisés (moteurs fusée ergols).

I.1 Aspect énergétique de l'hydrogène

L'hydrogène a de nombreuses qualités pour devenir un vecteur énergétique majeur. Il est très abondant, non polluant, non toxique et sa combustion dans l'air ne génère que de l'eau, il possède un haut pouvoir énergétique gravimétrique. On peut, en effet, obtenir une énergie de 120 MJ par kg d'hydrogène brûlé, 2,2 fois plus que celle du gaz naturel par exemple, et son contenu énergétique en kWh/kg est de 5 fois plus important que celui du charbon. Son pouvoir énergétique volumétrique de 10,8 MJ.m⁻³ est par contre très faible par rapport à d'autres combustibles comme le méthanol et le gaz naturel qui ont des pouvoirs énergétiques volumétriques de 16 MJ.m⁻³ et 39,77 MJ.m⁻³ [13,14].

L'hydrogène est plus inflammable que le gaz naturel ou les hydrocarbures classiques : sa limite d'inflammabilité est de 4% en volume dans l'air alors qu'elle est de 5,3% pour le gaz naturel; sa flamme est quasi-invisible. En situation confinée (c'est-à-dire emprisonné avec de l'air dans un volume fermé), l'énergie nécessaire à son explosion est 3,5 fois plus faible que celle du gaz naturel. Toutefois, en situation non confinée, il est moins dangereux que le gaz naturel, contrairement aux idées reçues. Mais son image auprès du public n'est pas bonne et son acceptabilité n'est pas encore acquise.

Bien qu'étant un des éléments les plus abondants de la planète, l'hydrogène est Presque systématiquement lié à d'autres atomes dans la nature, il n'existe pas de gisements permettant

de l'extraire directement. Sa production nécessite donc une source d'hydrogène (gaz naturel, biogaz, eau...) et une source d'énergie. La figure (I.1) représente les principales origines de l'hydrogène produit aujourd'hui dans le monde. 96% de l'hydrogène est produit à partir d'énergie fossile, en particulier à partir du gaz naturel. Le reformage du gaz naturel à la vapeur d'eau (vaporeformage) constitue le procédé le plus économique à l'heure actuelle. L'hydrogène peut également être produit à partir du charbon ou d'hydrocarbures plus lourds mais les procédés utilisés (oxydation partielle, reformage à sec...) sont plus coûteux en termes d'investissement. La production par électrolyse de l'eau reste néanmoins la plus coûteuse et n'est utilisée que marginalement [15].

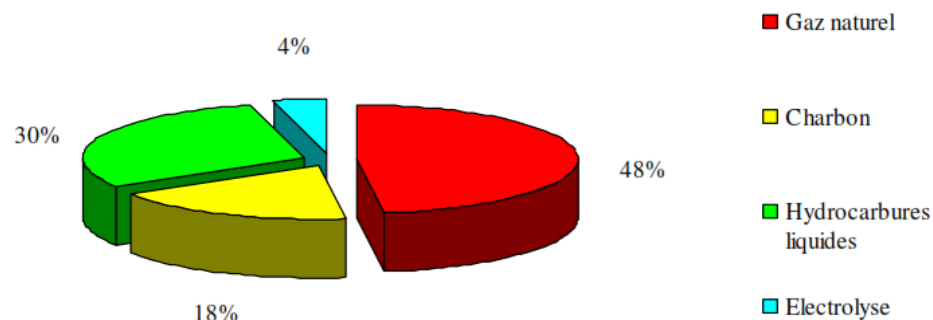


Figure I.1: Principales origines de la production d'hydrogène

L'hydrogène peut être produit à partir de nombreuses sources. Son utilisation permet de diversifier le bouquet énergétique et de s'affranchir de la dépendance aux ressources fossiles dont les réserves sont limitées et géographiquement concentrées. Utilisé dans une pile à combustible, l'hydrogène produit de l'électricité de façon propre et silencieuse en n'émettant que de l'eau.

I.2 Sources naturelles de l'hydrogène

I.2.1 Le gaz naturel

I.2.1.1 Caractéristiques

Parmi les sources énergétiques disponibles, le gaz naturel fait partie des plus abondantes. Ses réserves mondiales prouvées sont en constante progression et correspondent actuellement aux estimations des ressources mondiales en pétrole brut. Les réserves actuelles ont une durée de vie estimée à 60 ans environ si le rythme de consommation reste constant. Elles restent très

concentrées puisque 3 pays en possèdent plus de la moitié, à savoir 26% en Russie, 15% en Iran et 14% au Qatar. D'après l'Agence Internationale de l'Energie (AIE), demande mondiale de gaz est amenée à augmenter de 2,1 % an d'ici 2030. De plus, la part du gaz dans la production d'énergie devrait doubler en Europe d'ici 2020, compensant en partie la fermeture d'un certain nombre de centrales nucléaires. Il est intéressant de noter que c'est le secteur de l'électricité qui tire la demande, il est en effet possible de convertir l'énergie thermique provenant de la combustion du gaz naturel en énergie électrique. Le gaz est préféré à d'autres énergies pour des raisons d'ordre économique et environnemental. En effet, il peut être totalement désulfuré et sa combustion n'engendre pas de pluies acides ni de poussières. De plus, grâce à sa teneur élevée en hydrogène et à son fort pouvoir calorifique (37500 kJ.m⁻³), il se brûle en contribuant moins que le pétrole et le charbon à l'effet de serre provoqué par l'accumulation de dioxyde de carbone dans l'atmosphère.

I.2.1.2 Valorisation

Il est important de développer des sources d'énergie permettant à la fois de répondre à la demande et de remplacer les ressources déclinantes. De plus, les avancées significatives dans le domaine de la recherche sont nécessaires pour développer une gamme d'options énergétiques. Les recherches menées pour la valorisation du gaz naturel font parties intégrantes de ces objectifs.

Dans l'avenir, le marché de la conversion chimique du gaz naturel pourrait s'élargir considérablement dans le contexte d'une augmentation du prix de pétrole et dans la perspective de progrès techniques améliorant la rentabilité des procédés.

Le constituant majoritaire du gaz naturel est le méthane. Il contient également des impuretés, tels que les composés soufrés (H₂S), les composés azotés, du dioxyde de carbone (CO₂) ou des métaux lourds (Hg, Pb, As), qu'il convient d'éliminer avant son utilisation. Notons que le procédé de désulfuration est une étape plus facile pour le gaz naturel que pour le pétrole ce qui permet d'obtenir de manière efficace des teneurs résiduelles en soufre très faibles. On trouve également en proportions variables des hydrocarbures légers contenant entre 2 et 4 atomes de carbone. Les gaz naturels qui contiennent des hydrocarbures plus lourds subissent un dégazolinage. Ainsi, parler de «**valorisation du gaz naturel**» revient souvent à parler de «**valorisation du méthane**» [16].

Le méthane est difficilement converti de manière directe. Rappelons d'ailleurs que l'énergie de la liaison C-H est forte et donc difficile à casser (104 kcal.mol⁻¹ à 298K). La plupart des études de conversion directe du méthane en produits intéressants sont restées au stade expérimental. C'est le cas du brevet de Benson relatif à la formation d'hydrocarbures saturés et insaturés à partir d'une flamme CH₄/Cl₂ ou encore du procédé IFP sur la pyrolyse du méthane à haute température en présence d'hydrogène pour la formation de composés C₂, de benzène et d'hydrogène ainsi que du procédé Gaz de France pour la formation d'acétylène à partir de méthane dans une flamme H₂/O₂ [17].

Récemment, les industries s'intéressent de plus en plus à la transformation indirecte du méthane en hydrogène par le procédé catalytique du vaporeformage.

I.2.2 Le biogaz

I.2.2.1 Caractéristiques

Le biogaz est un gaz combustible, mélange de gaz carbonique et de méthane, qui provient de la dégradation des matières organiques mortes, végétales ou animales, dans un milieu en raréfaction d'air dit "fermentation anaérobie". Cette fermentation est le résultat de l'activité microbienne naturelle ou contrôlée [18]. C'est également un gaz riche en méthane, mais qui comporte des éléments difficiles à traiter, notamment les organes halogénés (chlore et fluor) provenant de la décomposition des plastiques et de la présence de déchets toxiques (bidons de lessive, piles...) [18,19].

Le biogaz est produit à partir de la fermentation. Il existe donc plusieurs sources possibles d'émission suivant leurs Caractéristiques:

- Les boues des stations d'épuration
- Le biogaz provenant des matières organiques contenues dans les eaux
- Les biogaz industriels ou agricoles (des industries agro-alimentaires, du lisier de porc)
- Les biogaz des unités spécifiques de méthanisation liée au compostage
- Le biogaz de décharge

Les décharges produisent spontanément du biogaz car les déchets fermentescibles y sont régulièrement déposés. L'émission peut durer plusieurs dizaines d'années, d'abord à un rythme

croissant, puis décroissant. Le processus peut être accéléré en humidifiant la matière, auquel cas le potentiel de production peut être récupéré entre 5 et 10 ans. Sans installation particulière autre que le captage des gaz dans les alvéoles, on peut ainsi récupérer 60 m³ de méthane par tonne enfouie [20].

Cette technique de traitement des déchets présente la caractéristique très particulière de produire de l'énergie au lieu d'en consommer. Le méthane produit est évidemment le même que celui du gaz naturel et il possède donc la même valeur technique et commerciale [21,22].

La figure (I.2) ci-dessous montre la répartition de la production d'énergie à partir du biogaz en Europe [23].

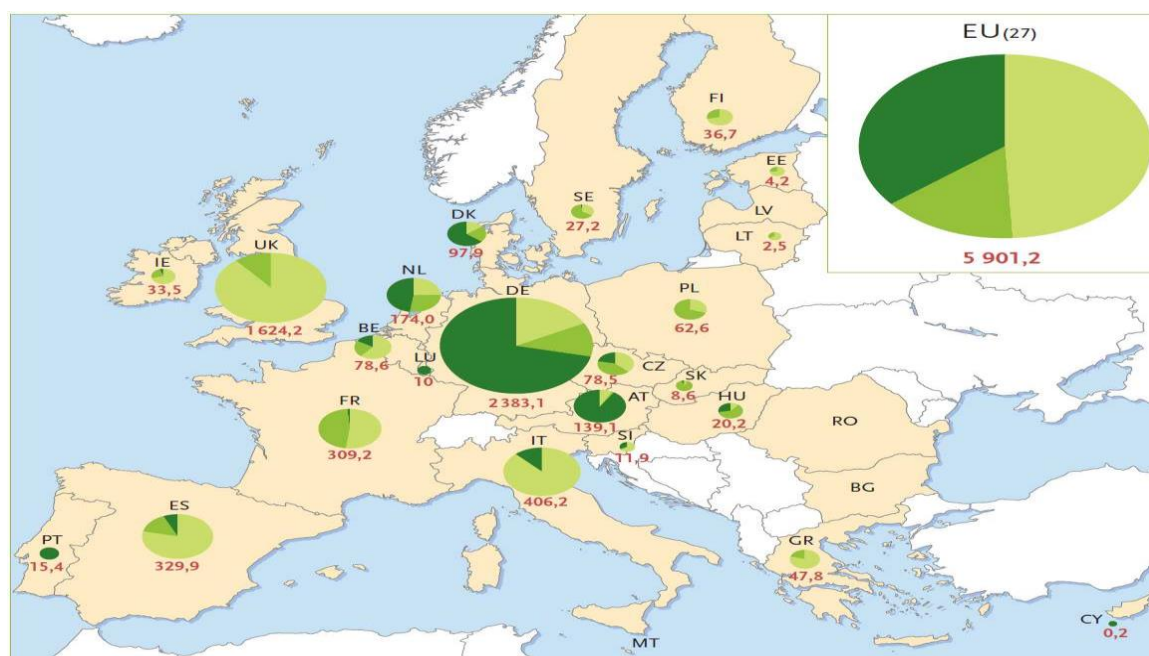
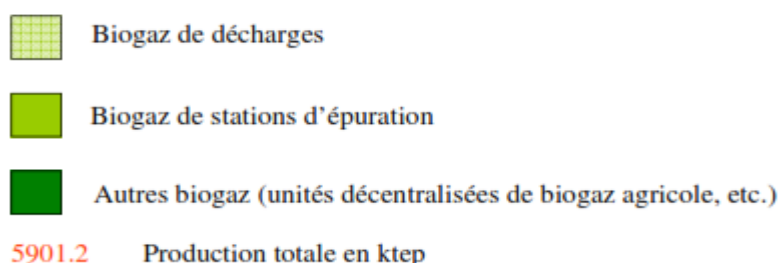


Figure I.2: Production d'énergie primaire de biogaz de l'Union européenne en 2007(en ktep)



Avec une production totale en 2007 de 5 901,2 ktep, la France se situe en cinquième position avec une contribution d'à peine 5%. De plus les biogaz de décharges et de stations est

d'épuration constituent la presque totalité de la production du biogaz. Seule une petite quantité de biogaz agricole produite à ce jour.

Pourtant la production et l'utilisation du biogaz semblent offrir quelques avantages particulièrement intéressants. Elle favorise le développement économique local, préserve des emplois dans les régions rurales et augmente le pouvoir d'achat régional. Elle améliore les standards de vie et contribue au développement économique et social.

I.2.2.2 Composition

La composition d'un biogaz dépend à la fois du procédé de méthanisation et de ses conditions de fonctionnement, et aussi de la nature et de la composition des déchets utilisés. L'ensemble des paramètres étant en pratique très variable et aléatoire, la composition d'un biogaz est très différente d'un site à l'autre mais aussi très variable dans le temps.

Le tableau (I.1) indique la composition moyenne de trois sortes de biogaz issues de trois filières de production différentes : la fermentation spontanée au sein d'une décharge équipée d'une aspiration du biogaz (Biogaz 1), une installation de méthanisation d'ordures ménagères brutes (Biogaz 2), une installation de méthanisation d'effluents industriels (Biogaz 3) [24].

Composition	Biogaz 1	Biogaz 2	Biogaz 3
CH ₄	47-57%	61-65%	55-58%
CO ₂	37-41%	36-38%	37-38%
N ₂	<1-17%	< 2%	< 2%
O ₂	<1%	<1%	<1%
H ₂ O	4%	5%	4%
H ₂ S	36-115 ppm	-	32-169 ppm

Tableau I.1: Composition moyenne de trois sortes de biogaz [24]

I.2.2.3 Valorisation

De façon générale, le biogaz peut être utilisé en substitut du gaz naturel dans toutes les applications où celui-ci est utilisé comme carburant. Néanmoins, la voie de valorisation d'un biogaz conditionne le niveau de qualité et de pureté nécessaire, et donc les traitements de purification à mettre en œuvre [25].

L'application la plus exigeante reste l'injection dans le réseau de gaz de ville, pour laquelle il faut séparer le méthane de tous les autres composés. Parmi les autres utilisations possibles et envisagées on peut citer:

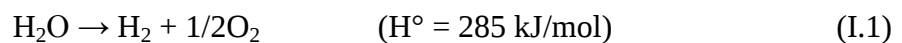
- La combustion directe dans des fours, torchères et chaudières pour la production de chaleur
- L'utilisation comme carburant dans des moteurs pour la production d'électricité
- La production d'hydrogène destinée aux piles à combustible [26,27].

Même si ces voies de valorisation sont sources d'émissions de CO₂, leur impact environnemental est bien moindre que celui d'une émission de biogaz à l'atmosphère. En effet, le pouvoir de réchauffement global du méthane est bien supérieur à celui du CO₂. Sur une période de vingt ans par exemple, il est 70 fois plus important. La production et la valorisation du biogaz permettent aussi de réduire la dépendance aux énergies exogènes (fossile et nucléaire), en même temps qu'il est un moyen de traiter les déchets organiques.

I.2.3 L'eau

I.2.3.1 Généralités

L'eau est l'une des ressources d'hydrogène les plus abondantes sur terre. Ce procédé repose sur le fait que l'énergie électrique permet de dissocier la molécule d'eau en deux éléments constitutifs (l'hydrogène et l'oxygène). La décomposition de l'eau par électrolyse s'écrit selon la réaction (1):



Cette décomposition, nécessitant un apport d'énergie électrique, dépend essentiellement de l'enthalpie et de l'entropie de réaction. Cela correspond à un potentiel théorique de décomposition de l'ordre de 1,23 V/molécule d'eau à 298 K. en pratique, le potentiel est plutôt entre 1,7 et 2,3 V, ce qui correspond à des rendements d'électrolyse de 70 à 85% . Une cellule d'électrolyse est constituée de deux électrodes (anode et cathode) et un générateur de courant continu séparé par un électrolyse (milieu conducteur ionique). L'utilisation des sources d'énergie renouvelables et propres, telles que l'hydroélectricité, l'énergie éolienne et l'énergie solaire, comme source d'électricité, présente des avantages sur le plan environnemental. Le coût de l'hydrogène produit par électrolyse est d'abord et avant tout lié à celui de l'électricité et à son mode de production [28].

I.2.3.2 Electrolyse à Haute Température

L'Electrolyse à Haute Température (EHT) est une technique avancée basée sur l'électrolyse en phase gazeuse, en présence de la vapeur d'eau, à une température comprise entre 1023K et 1223K. Les réactions ayant lieu à l'anode et à la cathode du dispositif d'électrolyse sont similaires au cas de l'électrolyse alcaline. Le fait d'augmenter la température du système présente des avantages thermodynamiques, car une diminution de l'énergie électrique nécessaire pour la réaction d'électrolyse est observée (figure I.3). A 298K, la quantité totale d'énergie nécessaire pour décomposer la molécule d'eau est d'environ 285 kJ/mol, dont une faible partie peut éventuellement être apportée sous forme thermique (~17%). Lorsque la réaction est réalisée en phase gazeuse, la quantité d'énergie totale pour la réaction d'électrolyse diminue sensiblement: elle est de l'ordre de 246 kJ/mol, à une température de 473K, dont 10% peuvent être sous forme thermique. Par ailleurs, le rapport de l'énergie électrique (travail) sur l'énergie totale diminue avec la température. Ainsi, par exemple, à une température égale à 773K, la quantité d'énergie électrique nécessaire est de 204 kJ/mol, alors qu'elle est de 186 kJ/mol à 1073K (figure I.3) [29,30].

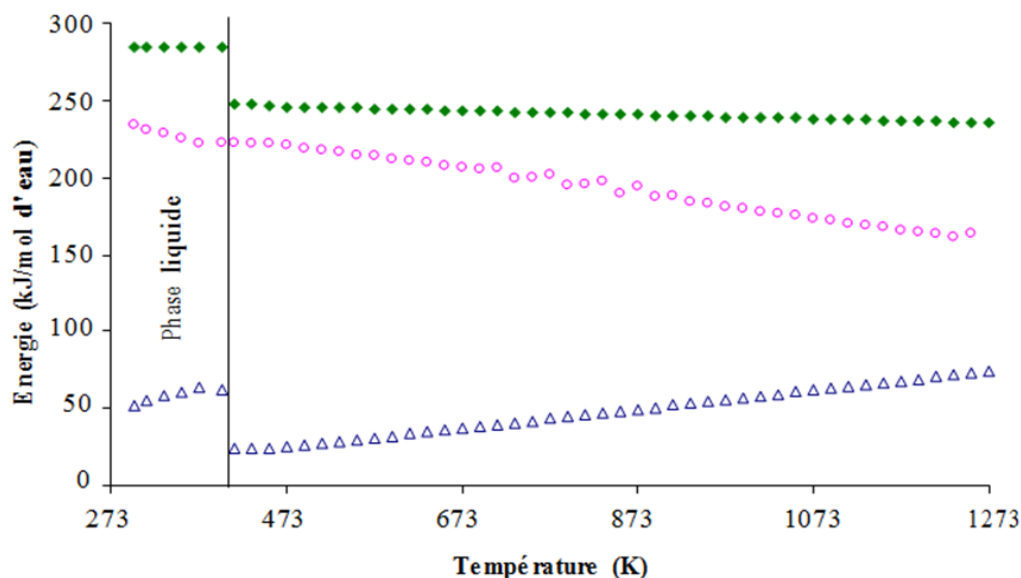


Figure I.3: Energie à fournir pour une réaction d'électrolyse d'eau

En réalisant la vaporisation par une source d'énergie thermique, l'EHT est favorisée par rapport à l'électrolyse alcaline sur un plan énergétique, en s'abstrayant pour partie du

rendement de conversion de la chaleur en électricité, ce qui permet de gagner en rendement énergétique global.

Dans ce cas, la production d'hydrogène sera réalisée grâce à un procédé particulièrement "propre" mais plus coûteux que le procédé de vaporeformage du méthane qui reste la solution la plus économique à l'heure actuelle.

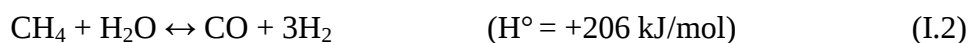
I.2.4 La production d'hydrogène à partir du méthane

Le gaz d'hydrogène (H₂), peut être obtenu à partir du méthane par différents procédés. L'oxydation partielle non catalytique et le vaporeformage sont les plus couramment utilisés sur le plan industriel. Par ailleurs, le reformage par le dioxyde de carbone et l'oxydation partielle catalytique sont envisageables et très documentés dans la littérature. Il est à noter que le rapport H₂/CO a une influence considérable sur la suite du procédé et varie d'une manière importante en fonction des procédés mis en œuvre.

I.2.4.1 Le vaporeformage

Le vaporeformage est le procédé le plus répandu dans la production d'hydrogène. Le premier brevet faisant référence à la réaction, en présence d'un catalyseur à base de nickel, date de 1912 et la première unité industrielle a été mise en place au début des années 1930 à Baton Rouge en Louisiane (USA) [31].

Au cours du vaporeformage, le méthane réagit avec de la vapeur d'eau (comme principale agent d'oxydation), avec un temps de contact de plusieurs secondes, sur un catalyseur, suivant la réaction (I.2), pour former l'hydrogène et le monoxyde de carbone. La réaction conduite dans les conditions stœchiométriques à un rapport H₂/CO égale à 3.



Il s'agit d'une technologie largement utilisée en vue de la production de méthanol mais aussi de la génération d'hydrogène. Ce dernier a par la suite des utilisations industrielles diverses et importantes, notamment pour les hydrotraitements dans les raffineries ou pour les unités de production d'ammoniac. Il est à signaler qu'à l'heure actuelle, la demande en hydrogène dans la plupart des pays industrialisés est en pleine croissance essentiellement pour son utilisation dans des procédés liés à la préservation de l'environnement (hydrotraitement). Lorsque le but de la réaction de reformage est la production d'hydrogène, le vaporeformage

est suivi d'une deuxième étape dite de Water-Gaz-Shift (WGS) afin de transformer le CO en CO₂ avec une production supplémentaire d'hydrogène, selon la réaction (3).



La combinaison des réactions (2) et (3) donne :



L'hydrogène est ensuite purifié par passage à travers d'un absorbeur qui permet l'élimination de tous les constituants autres que l'hydrogène.

La réaction de vaporeformage est une réaction très endothermique. Elle nécessite des conditions de températures assez élevées ($T > 800^\circ\text{C}$) afin de favoriser la formation d'H₂, par rapport à CO et CO₂. Des pressions de travail assez fortes (10-40 bar) sont également employées industriellement. L'utilisation d'un catalyseur approprié pourra en particulier réduire la température de fonctionnement du procédé. Ce dernier contrôlera les mécanismes réactionnels et jouera donc un rôle dans l'équilibre entre les réactions de vaporeformage [32,33,34].

I.3 Méthane (CH₄)

I.3.1 Définition

Le méthane, qui est l'élément principal de la composition du gaz naturel, avec un faible rapport carbone sur hydrogène, libère des quantités très faibles de CO₂ par rapport aux carburants d'origine pétrolière. Les émissions de polluants dans les moteurs alimentés au gaz naturel sont donc plus faibles que celles des moteurs conventionnels à l'essence ou au gasoil. De plus, le gaz naturel présente un indice d'octane assez élevé (de l'ordre de 130), ce qui permet d'une part une résistance accrue à la détonation et une augmentation du rendement du moteur d'autre part. Toutefois, le méthane possède certains inconvénients à savoir sa vitesse de flamme faible et sa sensibilité accrue aux variations cycliques au cours du fonctionnement, ne permet pas d'utiliser ce carburant pour une motorisation sans qu'il ne soit associé à un autre combustible ayant une vitesse de flamme plus grande et une sensibilité à la variation cyclique plus faible. L'hydrogène est un excellent additif pour améliorer la combustion du gaz naturel en raison de sa faible énergie d'allumage et de sa grande vitesse de flamme. L'addition d'une petite quantité d'hydrogène dans le gaz naturel pourrait améliorer la combustion du mélange et de réduire les émissions de gaz polluants à l'échappement. De

plus, l'amélioration de l'efficacité thermique du moteur et la réduction des émissions de CO et de HC peuvent être obtenus en ajoutant une petite quantité d'hydrogène dans le gaz naturel lors du fonctionnement en mélange pauvre. Dans cette étude, on montre l'effet de l'addition de l'hydrogène au méthane sur le moment et la durée de l'auto inflammation du mélange [35].

I.3.2 Propriétés physico-chimiques

Dans les conditions normales de température et de pression, le méthane est un gaz incolore et inodore. Environ deux fois plus léger que l'air, il est explosif en milieu confiné (grisou). En milieu non confiné il se dilue dans l'air et s'échappe vers la haute atmosphère, où il a moins tendance à former des nuages explosifs que les gaz plus lourds que l'air (propane, butane) ; par contre c'est un gaz à effet de serre.

La solubilité du méthane dans l'eau dépend beaucoup de la température et de la pression (il diminue avec l'une et augmente avec l'autre). Ainsi le grisou minier peut être en partie solubilisé et transporté par de l'eau (qui contient alors aussi du radon ainsi que du dioxyde de carbone et du dioxyde de soufre qui l'acidifient). Selon l'Inerties, une eau à 10 °C initialement saturée en gaz de mine sous une pression de 10 bars (équivalente à 100 m de charge hydraulique), va perdre lors de sa détente environ 0,5 m³ de méthane et 12 de CO₂ par m³ d'eau.

Le méthane est un combustible qui compose jusqu'à 90 % le gaz naturel. Sa température d'auto-inflammation dans l'air est de 540 °C. La réaction de combustion du méthane s'écrit :



La combustion du méthane à 25 °C libère une énergie de 39,77 MJ/m³ (55,53 MJ/kg), soit 11,05 kWh/m³ (15,42 kWh/kg).

Le gaz naturel, (constitué à plus de 90 % de méthane) est transporté par navires (méthaniers) à une température de -162 °C et à une pression voisine de la pression atmosphérique. Les réservoirs sont construits sur le principe de la bouteille isotherme et leur capacité peut aller jusqu'à 200 000 m³ de gaz liquide par réservoir. Un méthanier comportant plusieurs réservoirs, sa cargaison peut actuellement atteindre 154 000 m³ de GNL, Gaz Naturel Liquéfié. Les futurs méthaniers pourront transporter jusqu'à 260 000 m³ de GNL. Le volume du méthane à l'état gazeux est égal à 600 fois son volume à l'état liquide, à pression atmosphérique.

Présent à tous les stades de l'industrie pétrolière, mais mal valorisé, il est fréquemment brûlé dans une torchère ; ce comportement contribuant à l'effet de serre, les pétroliers tentent de plus en plus de restreindre ce procédé [36].

I.3.3 Comparaison entre l'hydrogène H_2 et Méthane CH_4

L'hydrogène H_2 et méthane CH_4 sont deux combustibles importants du point de vue scientifique ainsi que pour l'application pratique. Ils sont les plus simples et les mieux étudiés. En outre ; la description physico-chimique de leur oxydation est l'élément de base pour les combustibles plus complexes. En pratique CH_4 a une application pratique importante dans le secteur énergétique puisqu'il est le constituant major du gaz naturel. H_2 est utilisé principalement comme combustible de moteur-fusée de lanceurs spatiaux grâce à une haute impulsion spécifique et un pouvoir important de refroidissement [37].

Pour ces raisons, l'hydrogène, vecteur énergétique a le plus fort potentiel à moyen et long terme pour devenir le combustible propre et durable dans le secteur du transport. Cependant, divers obstacles technico économiques retardent la généralisation de l'utilisation de l'hydrogène via la Pile à Combustible (PAC) dans le transport. En plus, il sera très difficile de remplacer tout le parc automobile mondial en un temps réduit. C'est pour cela qu'une période de transition est nécessaire pour permettre la levée de ces obstacles. Cette période sera caractérisée par l'utilisation d'un nouveau carburant constitué du mélange Gaz Naturel Carburant dopé par de l'hydrogène [2].

L'hydrogène est vu comme un futur vecteur d'énergie clé, il subsiste plusieurs points de résistance d'aspect technique, «économique et sociétal. Premièrement, les technologies relatives à la production, au stockage et à la distribution doivent être développées afin que l'hydrogène soit utilisé comme un combustible usuel. Deuxièmement, les limites d'inflammabilité de l'hydrogène sont très étendues. Cela nécessitera de redéfinir certaines normes de sécurité. Les mélanges gaz naturel/hydrogène peuvent être une solution de transition vers une 'énergie hydrogène'. La combustion de ces mélanges permettrait une réduction globale des émissions en attendant le développement de nouvelles technologies.

Dans le tableau suivant (Tableau I.2) il y a une comparaison entre les deux combustibles l'hydrogène et le méthane et leur propriété de combustion.

Propriétés	Hydrogène	Méthane
Masse molaire	2.0158 g.mol ⁻¹	16.046 g.mol ⁻¹
Température d'ébullition (à 1013 hPa)	20.27 K	109.15 K
Température de solidification	14.01 K	90.67 K
Masse volumique gazeuse à 273 K	0.08988 kg/m ⁻³	0.6512 kg/m ⁻³
Température d'auto inflammation dans l'air	858 K	813 K
Température de flamme dans l'air à 300 K	2318 K	2148 K
Limites d'inflammabilité dans l'air (Vol%)	4 - 75	5.3 - 15
Vitesse de flamme dans l'air	260 cm.s ⁻¹	37 cm.s ⁻¹
Vitesse de détonation dans l'air	2 km/s	1.8 km/s
Mélange stœchiométrique dans l'air (Vol%)	29.56	9.48
Energie explosive	2.02 kg TNT/m ³	7.03 kg TNT/m ³

Tableau I.2: Comparaison entre les propriétés d'hydrogène (H_2) et le méthane (CH_4)

I.3.4 Application

Des larges quantités d'hydrogène sont nécessaires dans l'industrie, notamment dans le procédé Haber-Bosch de production de l'ammoniac, l'hydrogénation des graisses et des huiles et la production de méthanol. D'autres utilisations de l'hydrogène sont la fabrication de l'acide chlorhydrique, le soudage, les carburants pour fusées et la réduction de minerais métalliques, L'hydrogène liquide (LH_2) est utilisé pour les recherches à très basses températures, y compris l'étude de la supraconductivité, l'hydrogène était utilisé dans les ballons car il est quatorze fois plus léger que l'air. Le deutérium (2H) est utilisé dans les applications nucléaires comme modérateur pour ralentir les neutrons. Les composés du deutérium sont aussi utilisés en chimie et en biologie pour étudier ou utiliser l'effet isotopique [38].

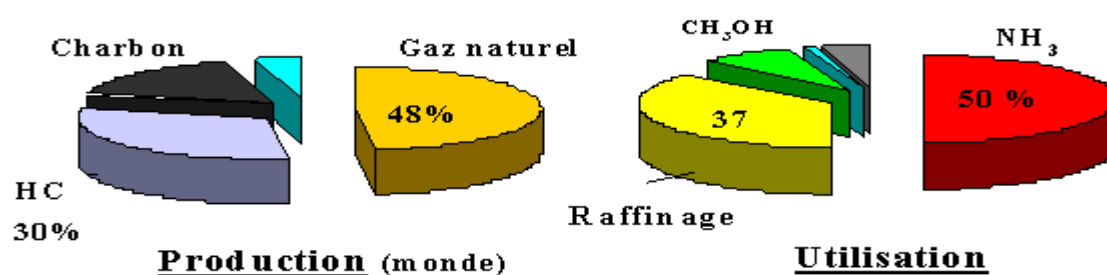


Figure I.4: Les sources d'hydrogène et son utilisation.

Les gisements fossiles de gaz_naturel comportent entre 50 et 60 % de méthane, le gaz naturel brut est épuré avant d'être injecté sur le réseau de distribution.

La proportion de méthane présent dans le gaz_naturel que nous utilisons est supérieure à 90 % dans la plupart des gaz.

Le biogaz produit dans les décharges pourrait être (bien davantage) récupéré et valorisé sous forme d'électricité, de chaleur ou comme carburant automobile. Pour l'instant, seules quelques expériences isolées (dans des fermes, des déchèteries...) ont vu le jour, spécialement dans les régions les plus froides (nord de l'Allemagne, de la France, Scandinavie...), mais la rentabilité économique de ces installations est loin d'être acquise.

Le méthane est valorisable comme combustible mais d'autres usages en seraient possibles. Par exemple, des chercheurs ont réussi à transformer à température presque ambiante (40°C) du méthane en un ester (préopinante d'éthyle) potentiellement valorisable. Pour ce faire, un carbone (composé très réactif) a été introduit dans une liaison du méthane via un catalyseur Organométallique [36].

Conclusion

Dans ce chapitre, nous examinons les caractéristiques générales des deux éléments chimiques l'hydrogène et le méthane, et nous avons discuté des moyens de produire les deux éléments, et faire une comparaison entre leur propriété de combustion, ainsi que leurs applications dans la vie humaine. L'hydrogène H_2 et le méthane CH_4 sont deux combustibles importants du point de vue scientifique ainsi que pour l'application pratique. Ils sont les plus simples et les mieux étudiés. En outre, la description physicochimique de leur oxydation est l'élément de base pour les combustibles plus complexes.

Chapitre II

Modélisation de la Combustion Turbulente Non- Prémélangée

La description phénoménologique et les diagrammes de combustion turbulente sont nécessaires pour comprendre le phénomène, mais ils ne donnent aucune base mathématique pour la simulation numérique. Le système d'équations réactives de Navier-stokes avec un mécanisme réactionnel élémentaire décrivent le fondement physique et chimique de la combustion turbulente non prémélangée. D'une part, les échelles de temps des réactions chimiques sont généralement inférieures aux petites échelles de temps de la turbulence, donnant ainsi un système d'équations différentielles très complexe, non-linéaire et couplé. Par comparaison avec les calculs DNS, RANS, LES des écoulements turbulents non réactifs, les efforts de calcul pour un écoulement réactif dépassent largement les ressources de calcul disponibles aujourd'hui et dans un futur moyen.

Dans ce chapitre, on a fait une étude phénoménologique de l'interaction entre la turbulence et la flamme non prémélangée, nous utilisons les modèles suivent la simulation aux grandes échelles «LES» et la fonction de densité de probabilité «PDF» .

II.1 Modes de combustion élémentaires

Il existe un nombre important de techniques menant à la combustion d'un carburant par un oxydant. En se limitant à la combustion gazeuse, deux modes de combustion élémentaires peuvent être identifiés: la combustion prémélangée et la combustion non prémélangée. Entre ces deux modes de combustion élémentaires se trouvent différents modes de combustion intermédiaires, comme le prémélange partiel ou la combustion stratifiée.

– **La combustion prémélangée** est un mode de combustion où carburant et oxydant sont prémélangés avant d'atteindre le front de flamme. Ce mode est souvent utilisé en régime pauvre (le carburant est en quantité inférieure aux conditions stœchiométriques), permettant ainsi d'augmenter le rendement du système de combustion et de réduire la production d'oxydes d'azote, polluant très nocif dont on veut limiter la production. En contrepartie, les flammes obtenues sont souvent difficiles à maîtriser, nécessitant l'utilisation de dispositifs complexes d'accrochage de flamme. De même, la question du stockage d'un mélange air/carburant dans la gamme de flammabilité est prépondérante et n'est pas envisageable dans un contexte industriel.

– **La combustion non prémélangée** est un mode de combustion où carburant et oxydant sont injectés par deux courants différents, le front de flamme se positionnant à la rencontre des deux lignes de courant. Ce mode de combustion, qui est donc plus facile à maîtriser, a le

désavantage de former plus de polluants, du fait des hautes températures atteintes dans le front de flamme.

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

II.2 La simulation numérique de la combustion turbulente

Pendant de nombreuses années, les études expérimentales ont servi à développer et valider les méthodes de simulation numérique. De nos jours, la simulation numérique est devenue suffisamment développée pour être utilisée en parallèle des essais expérimentaux, et devient ainsi un outil prédictif.

Mais la simulation numérique n'apporte pas toujours les réponses aux problèmes des constructeurs. Lorsqu'on s'intéresse aux écoulements turbulents et réactifs dont la complexité mène aux instabilités qui ont été évoquées, il faut considérer un large spectre d'échelles à la fois en espace et en temps et autoriser de nombreux phénomènes physiques [39,40].

Il existe trois principales approches de résolution numérique des phénomènes physiques.

II.2.1 RANS

Historiquement la plus ancienne, la résolution des équations moyennées (RANS pour Reynolds Average Navier-Stokes se contente de décrire le comportement moyen de l'écoulement mais nécessite la modélisation de tous les effets instationnaires. Bien adaptée au dimensionnement des moteurs, elle a toujours été en peine lorsqu'il a été question d'aborder les instabilités de combustion [41,42].

II.2.2 DNS

Au contraire, la simulation numérique directe (DNS pour Direct Numérique Simulation) consiste à calculer toutes les structures de l'écoulement sans modélisation autre que le choix d'un schéma cinétique et la description du transport moléculaire [43,44]. Malheureusement, cette approche est numériquement extrêmement coûteuse (la qualité des résultats ne doit pas être oblitérée par la diffusion numérique du code de calcul) et limitée à de faibles nombres de Reynolds (qui contrôlent la gamme des tailles de structures présentes dans l'écoulement). Cette approche est donc restreinte à des situations académiques simples, malgré la puissance des machines de calcul disponibles aujourd'hui, mais constitue un outil irremplaçable pour étudier précisément certains phénomènes fondamentaux et aider au développement de modèles. Il est hors de question de simuler un foyer aéronautique ou industriel avec une telle méthode [45,46,47,48].

II.2.3 LES

Relativement récente, la simulation aux grandes échelles (LES pour Large Eddy Simulation) apparaît comme intermédiaire entre la RANS et la DNS [49,50]. Il s'agit cette fois de calculer complètement les plus grandes structures turbulentes présentes dans l'écoulement comme en DNS tandis que seul l'effet des plus petites structures est modélisé comme en RANS. Nettement plus coûteuse que la RANS (il faut calculer un écoulement instationnaire, tri-dimensionnel, et renoncer aux simplifications usuelles de la RANS telles que la symétrie, la bidimensionnalité, etc.), cette approche est beaucoup moins limitée que la simulation directe et donne accès à une précision jamais égalée avec la RANS [51,52]. L'échelle de coupure est en principe choisie dans la zone inertielle du spectre de turbulence en raison des hypothèses faites pour développer les modèles. L'impact des modèles sur le résultat final est logiquement moindre qu'en RANS. Enfin, il faut sur tout retenir que couplée à des études acoustiques, la LES apparaît comme un outil adapté à l'études des phénomènes d'instabilités de combustion [53,54,55].

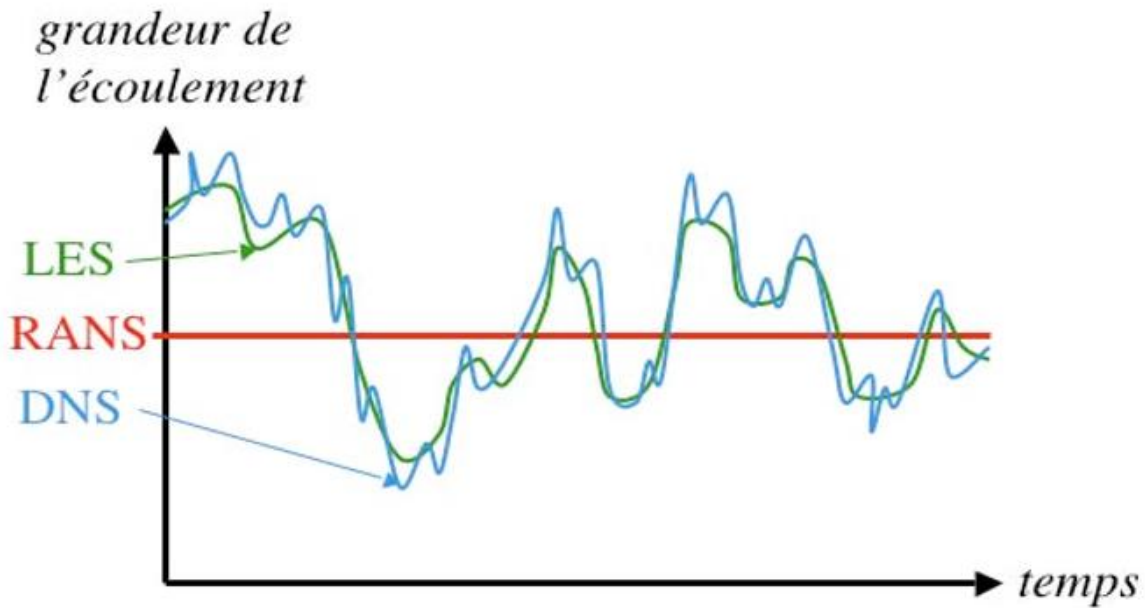


Figure II.1: Représentation temporelle du degré de détail des différentes méthodes de simulation

II.3 Description statistique sur l'écoulement turbulent

L'objectif de cette partie est de rappeler quelques-unes des bases de la théorie de la turbulence et de son analyse statistique. L'accent est mis sur les caractéristiques de l'écoulement turbulent qui sont d'un intérêt primordial pour la prédiction et la modélisation des écoulements: échelles de turbulence, cascade de Kolmogorov, les structures cohérentes dans les écoulements cisailés, la production de turbulence et la dissipation d'énergie.

II.3.1 Nombre de Reynolds élevé

La turbulence apparaît dans des écoulements dont le nombre de Reynolds est élevé. Elle a souvent pour origine le développement d'une instabilité d'un écoulement laminaire. Lorsque le nombre de Reynolds dépasse une certaine valeur critique, les petites perturbations de l'écoulement deviennent instables et leur croissance rapide produit la transition vers la turbulence. C'est ainsi que la couche limite laminaire sur une plaque plane devient turbulente lorsque le nombre de Reynolds Re dépasse $5 \cdot 10^5$. De même, la transition apparaît dans un écoulement en conduit cylindrique pour un nombre de Reynolds 2500.

II.3.2 Équations de Navier- Stokes compressibles

En coordonnées cartésiennes, les équations du bilan aérothermique peuvent être exprimées sous la forme de flux suivant [56,57,58]:

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial F_1}{\partial x_1} + \frac{\partial F_2}{\partial x_2} + \frac{\partial F_3}{\partial x_3} = s \quad (\text{II.1})$$

Où:

S : terme de Source.

F : le flux descriptif des variables Conservatives.

Q: variables Conservatives

Où:

$$Q = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u_1 \\ \rho u_2 \\ \rho u_3 \\ \rho e \end{pmatrix} \quad (\text{II.2})$$

C'est la matrice de la densité, quantité de mouvement et l'énergie totale définie ici pour les gaz parfait :

$$\rho e = \rho C_v T + \frac{1}{2} \rho (u_1^2 + u_2^2 + u_3^2) \quad (\text{II.3})$$

Si on néglige l'effet de la gravité, le flux F_i s'écrit $\forall i \in \{3, 2, 1\}$.

$$F_i = \begin{pmatrix} \rho u_i \\ \rho u_i u_1 - \sigma_{i1} \\ \rho u_i u_2 - \sigma_{i2} \\ \rho u_i u_3 - \sigma_{i3} \\ \rho e u_i - u_j \sigma_{ij} - \lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} \end{pmatrix} \quad (\text{II.4})$$

Avec :

$\lambda = \rho C_p \kappa$ Conductivité thermique

κ : Diffusivité thermique.

La composante σ_{ij} du tenseur de contrainte présenté à l'Eq (II.5), peut s'écrire pour un fluide newtonien sous la forme [56,57].

$$\sigma_{ij} = -p\delta_{ij} + 2\mu A_{ij} \quad (\text{II.5})$$

Tel que :

$$A_{ij} = \frac{1}{2} \left[\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{2}{3} (\nabla u) \delta_{ij} \right] \quad (\text{II.6})$$

Désigne maintenant le tenseur de la déformation. On obtient ainsi:

$$F_i = \begin{pmatrix} \rho u_i \\ \rho u_i u_1 + p\delta_{i1} - 2\mu A_{i1} \\ \rho u_i u_2 + p\delta_{i2} - 2\mu A_{i2} \\ \rho u_i u_3 + p\delta_{i3} - 2\mu A_{i3} \\ (\rho e + p)u_i - 2\mu u_j A_{ij} - \lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} \end{pmatrix} \quad (\text{II.7})$$

Pour le départ on utilise la relation empirique de Sutherland afin de présenter la viscosité.

$$\mu(T) = \mu(273,15) \left(\frac{T}{273,15} \right)^{1/2} \frac{1+T_0/273,15}{1+T_0/T} \quad (\text{II.8})$$

Avec : $\mu(273,15) = 1,711 \cdot 10^{-5} \text{ Pl}$ et $T_0 = 110,4 \text{ K}$

Dans le cas où $T < 120 \text{ K}$ on utilise une extension de la loi précédente.

$$\mu(T) = \mu(120) \left(\frac{T}{120} \right) \quad (\text{II.9})$$

La viscosité et la conductivité thermique sont reliées par le nombre de Prandtl.

$$\text{Pr} = \frac{\nu}{k} = \frac{C_p \mu(T)}{\lambda} \quad (\text{II.10})$$

Ce dernier égal à 0,7 dans le cas de l'air à température ambiante. L'équation de l'état thermodynamique est donnée par.

$$p = \rho RT \quad (\text{II.11})$$

On fermant le système des équations avec, $R = C_p - C_v = 287.06 \text{ J.Kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$ pour l'air à température ambiante. On rappelle que $\gamma = C_p / C_v$.

II.3.3 La théorie de la turbulence de Kolmogorov

Il existe une théorie qui a contribué de façon majeure dans la compréhension de la turbulence: la théorie de Kolmogorov (1941). Elle repose sur une vision "statistique" de la turbulence. Selon cette théorie les tourbillons dans l'écoulement ont une taille comprise entre les deux tailles limites suivantes [56,59]:

- La plus grande échelle de l'écoulement L (imposée par la géométrie de l'écoulement, par exemple typiquement le diamètre d'un cylindre, le diamètre d'une cheminée, ou encore la hauteur d'une voiture).
- La plus petite échelle de l'écoulement η : imposée par la viscosité du fluide; cette échelle est appelée échelle de Kolmogorov, ou échelle de dissipation visqueuse.

L'ordre de grandeur entre L et η est le suivant :

$$\frac{L}{\eta} \approx \text{Re}^{9/4} \quad (\text{II.12})$$

La théorie de la "cascade" énergétique prédit que les tourbillons reçoivent de l'énergie des échelles plus grandes qu'eux, et la transmettent ensuite aux échelles plus petites qu'eux, et ainsi de suite jusqu'à la plus petite échelle existant dans l'écoulement, l'échelle η . On parle de production d'énergie lorsque les grosses structures sont générées - par un décollement par exemple - et de dissipation d'énergie lorsque les tourbillons disparaissent complètement en aval de l'obstacle. Lorsque la production d'énergie est égale à la dissipation d'énergie, on parle de turbulence "en équilibre".

L'idée fondatrice de la théorie de la turbulence de Kolmogorov montre que pour un nombre de Reynolds suffisamment grand, il y a une séparation d'échelle entre les structures énergétiques de l'écoulement et les structures qui dissipent cette énergie. De plus, le spectre d'énergie a une structure générique [60,61].

$$E(k) = \text{Re}^{-5/3} \quad (\text{II.13})$$

Entre ces deux fréquences (L et η) (figure II.5), l'idée de la LES consiste à appliquer un filtre sur les équations dans l'espace. Les structures qui sont plus grandes que la fréquence de coupure du filtre sont explicitement représentées par les équations tandis que les petites structures sont modélisées (figure II.5).

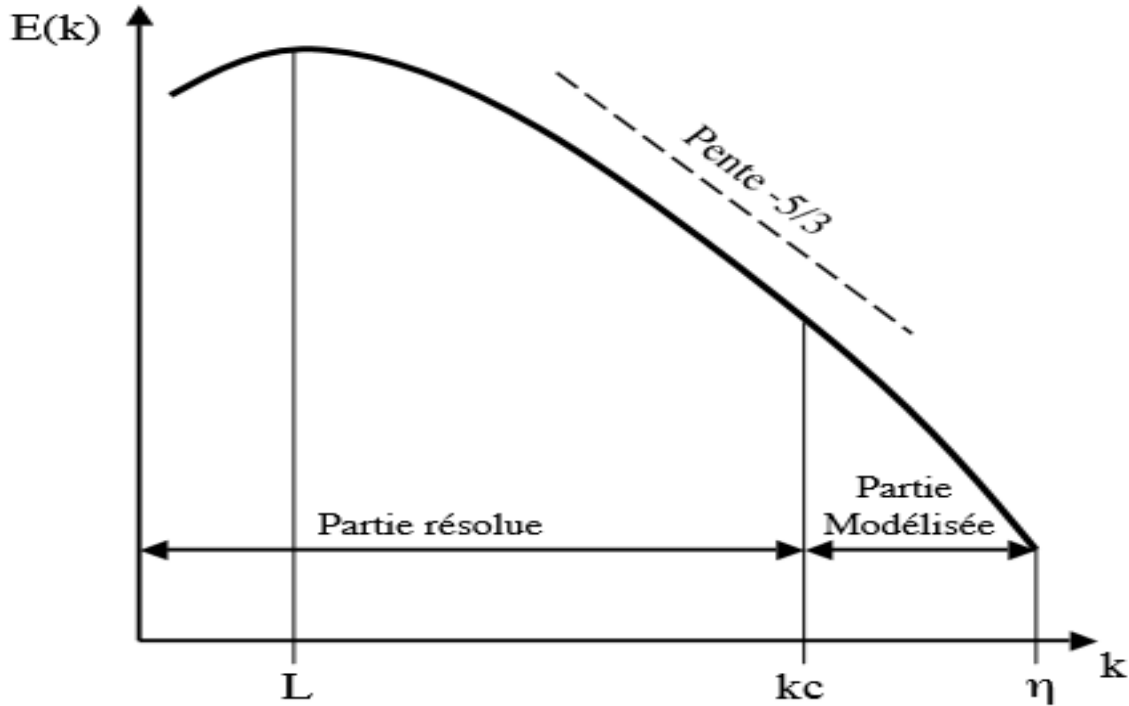


Figure. II.2: le spectre d'énergie d'une Turbulence Homogène Isotrope : concept LES

II.4 Modèle dynamique de turbulent

II.4.1 Généralité sur le modèle la simulation aux grandes échelles LES

La simulation des grandes échelles (LES) des écoulements turbulents est une technique extrêmement puissante qui consiste à surmonter un problème théorique très difficile, liée à la modélisation du comportement dynamique à petite échelle dans les équations de mouvement à grande échelle. LES est un outil précieux pour filtrer la structure tourbillonnaire de l'écoulement, car il permet de capturer d'une manière déterministe la formation et l'évolution ultérieure de tourbillons cohérents et de structures. Il permet aussi la prédiction de nombreux paramètres statistiques liés à la turbulence et le mélange induit. LES s'applique aux écoulements turbulents pour remédier au problème de fermeture [56,60].

Le concept du modèle LES est maintenant mieux connu dans la communauté scientifique. L'idée fondatrice vient de la théorie de la turbulence de Kolmogorov [62,63]. Pour faire une LES de bonne qualité, il faut que toutes les structures résolues sur le maillage soient correctement, tandis que la contribution des petites structures, sous-maille, est modélisée. Il faut donc éviter au maximum les artefacts numériques tels que la dissipation ou la dispersion. L'utilisation de schémas numériques centrés d'ordre élevé permet de minimiser la dissipation et la dispersion. Cependant, les schémas centrés sont relativement sensibles aux oscillations numériques d'une part et à la qualité des maillages d'autre part. Ainsi, le manque de robustesse des méthodes numériques faiblement dissipatives est un problème central pour le calcul des écoulements à fort nombre de Reynolds.

On considère un champ f quelconque, on note $\bar{f}$ ce champ après filtrage LES. Alors dans le modèle (LES), les paramètres sont traités par l'utilisation de la décomposition de Reynolds, $f' = f - \bar{f}$, afin de faciliter l'arrangement des termes de sous-maille pour les modéliser. Dans le cas des équations de Navier-Stokes compressibles, pour simplifier la modélisation des termes filtrés, on ne va pas écrire les équations pour la variable filtrée $\bar{f}$, mais pour le cas d'un écoulement turbulent compressible une quantité pondérée par la densité appelée "moyenne de Favre" notée $\tilde{f}$, définie par [61,64,65]:

Où bien :

$$\overline{\rho f} = \overline{\rho} \tilde{f} \quad (\text{II.14})$$

$$\tilde{f} = \frac{\overline{\rho f}}{\overline{\rho}} \quad (\text{II.15})$$

Le système des équations définies au-dessus Eq (II.2)- Eq (II.7) devient.

$$\bar{Q} = (\bar{\rho}_f, \bar{\rho}\tilde{u}_1, \bar{\rho}\tilde{u}_2, \bar{\rho}\tilde{u}_3, \bar{\rho}\tilde{e})^T \quad (\text{II.16})$$

L'énergie totale filtrée peut s'écrire sous la forme.

$$\bar{\rho e} = \bar{\rho}\tilde{e} = \bar{\rho}C_v\tilde{T} + \frac{1}{2}\overline{\rho(u_1^2 + u_2^2 + u_3^2)} \quad (\text{II.17})$$

Le flux filtré $\bar{F}_i$ est donc.

$$\bar{F}_i = \begin{pmatrix} \bar{\rho}\tilde{u}_i \\ \overline{\rho u_i u_1} + \overline{p\delta_{i1}} - \overline{2\mu A_{i1}} \\ \overline{\rho u_i u_2} + \overline{p\delta_{i2}} - \overline{2\mu A_{i2}} \\ \overline{\rho u_i u_3} + \overline{p\delta_{i3}} - \overline{2\mu A_{i3}} \\ \overline{(\rho e + p)u_i} - \overline{2\mu u_j A_{ij}} - \lambda \frac{\partial \bar{T}}{\partial x_i} \end{pmatrix} \quad (\text{II.18})$$

Avec: $i=1, 2, 3$ et $j=1, 2, 3$

II.4.2 Les équations de LES

Ceci assure que le procédé de filtration ne change pas la forme des lois de conservations. Les équations LES pour le volume résolu sont formellement dérivées en substituant les décompositions ci-dessus dans les équations régissantes. Où les équations sont écrites comme [60,66].

Continuité

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho}\tilde{u}_i) = 0 \quad (\text{II.19})$$

Quantité de mouvement

$$\frac{\partial \bar{\rho}\tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho}\tilde{u}_i \tilde{u}_j) = -\frac{\partial}{\partial x_i} [\bar{\rho}(\overline{u_i u_j} - \tilde{u}_i \tilde{u}_j)] - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{\tau_{ij}}}{\partial x_i} \quad (\text{II.20})$$

Energie

$$\frac{\partial}{\partial t} \bar{\rho}\tilde{h} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho}\tilde{u}_i \tilde{h}) = -\frac{\partial}{\partial x_i} [\bar{\rho}(\overline{u_i h} - \tilde{u}_i \tilde{h})] + \frac{\partial \bar{p}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} \overline{u_j \tau_{ij}} \quad (\text{II.21})$$

Espèces

$$\frac{\partial}{\partial t} \bar{\rho}\tilde{Y}_f + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho}\tilde{u}_i \tilde{Y}_f) = -\frac{\partial}{\partial x_i} [\bar{\rho}(\overline{u_i Y_f} - \tilde{u}_i \tilde{Y}_f)] + \bar{\dot{\omega}}_f \quad (\text{II.22})$$

Avec: $i=1, 2, 3$ et $j=1, 2, 3$

De même pour l'équation d'état thermodynamique

$$\bar{p} = \bar{\rho} R \tilde{T} \quad (\text{II.23})$$

$(\overline{u_i u_j} - \tilde{u}_i \tilde{u}_j)$: Les tensions de Reynolds de sous-maille.

$(\overline{u_i Y_f} - \tilde{u}_i \tilde{Y}_f)$ et $(\overline{u_i h} - \tilde{u}_i \tilde{h})$: La diffusion des espèces et le flux de chaleur en sous-maille.

$\overline{\dot{\omega}_f}$: Le taux de production massique de l'espèce f .

On trouve que les fermetures apparaissent dans les équations ce qui nécessite de modéliser les termes sources et faire intervenir des modèles pour enlever cette fermeture et résoudre ces équations.

L'énergie totale non-chimique E et la somme des énergies cinétique e_c et l'énergie interne (sensible) e_s du mélange :

$$E = \overline{\rho} [\tilde{e}_c + \tilde{e}_s] = \overline{\rho} \left[\frac{1}{2} (\overline{u_1^2} + \overline{u_2^2} + \overline{u_3^2}) + \sum_{f=1}^N \tilde{Y}_f \tilde{e}_{sf} \right] \quad (\text{II.24})$$

L'énergie sensible $\tilde{e}_{s,f}$ de l'espèce f est calculée à partir de la loi thermodynamiques [68], elle est définie par :

$$\tilde{e}_{sf}(T) = \int_0^T C_{v,f}(T) dT \quad (\text{II.25})$$

Le tenseur des contraintes visqueuses filtré est défini par [62,66,68]:

$$\bar{\tau}_{ij} = 2\overline{\rho\nu}(\tilde{S}_{ij} - \frac{1}{3}\delta_{ij}\tilde{S}_{ll}) \quad , \quad i,j=1,2,3 \quad (\text{II.26})$$

Et :

$$\tilde{S}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} + \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} \right) \quad , \quad i,j=1,2,3 \quad (\text{II.27})$$

II.4.3 Modèles de sous-maille

Ce modèle de sous-maille qu'il faut "injecter" toute la physique des écoulements turbulents. Aussi, cette modélisation a fait l'objet d'un nombre considérable d'études que nous n'allons pas résumer ici. On peut par exemple consulter pour une description détaillée de la méthodologie LES [57, 63,69]. On se contentera ici de décrire brièvement les modèles utilisés en explicitant leurs points forts et leurs limites. La fermeture de modèle sous maille pour les équations régissant du système sont présentés ci-dessous. La majorité des modèles de sous-

maille est basée sur l'hypothèse de Bousines qui lie le tenseur des contraintes non résolues $\overline{\tau_{ij}}$ Eq (II.28) au tenseur des vitesses de déformation $\tilde{S}_{ij}$ Eq (II.27) par l'intermédiaire d'une viscosité turbulente μ_T [56,70,71]:

$$\overline{\tau_{ij}} = 2\mu_T \left(\tilde{S}_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \tilde{S}_{ll} \right) \quad (\text{II.28})$$

Le choix du modèle consiste donc à expliciter la viscosité turbulente $\nu_T = \overline{\rho} \mu_T$

II.4.4 Le modèle WALE

Ce modèle est une adaptation du modèle de Smagorinsky et permet d'obtenir une décroissance de μ_T en suivant asymptotiquement une loi en $(y^+)^3$, (y^+ est la distance à la paroi normalisée) [1]. Ce modèle permet de corriger un défaut du modèle de Smagorinsky qui surévalue la viscosité turbulente en proche paroi et ceci à cause des gradients dus à la couche limite [71].

Cette méthode permet de tenir compte du transfert d'énergie des petites structures de l'écoulement vers les grandes (Back-Scatter). Mais elle nécessite l'emploi de limiteurs pour borner les valeurs de μ_T . De plus ce modèle est plus complexe à mettre en œuvre que ceux présentés ici, surtout sur des maillages non-structurés. Le modèle WALE a été développé pour améliorer [57,72]:

- La décroissance de ν_T à la paroi.
- La transition vers la turbulence.

La viscosité turbulente est définie par :

$$\nu_t = (C_w \Delta)^2 \frac{(s_{ij}^d s_{ij}^d)^{3/2}}{(\tilde{s}_{ij}^d \tilde{s}_{ij}^d)^{5/2} + (s_{ij}^d s_{ij}^d)^{5/4}} \quad (\text{II.29})$$

Avec :

$$s_{ij}^d = \frac{1}{2} (\tilde{g}_{ij}^2 + \tilde{g}_{ji}^2) - \frac{1}{3} \tilde{g}_{kk}^2 \delta_{ij} \quad (\text{II.30})$$

Et :

$$\tilde{g}_{ij}^2 = \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \quad (\text{II.31})$$

D'après Nicoud et Ducros, la constant C_w varie très peu selon la configuration (contrairement à C_s dans le modèle de Smagorinsky). La valeur de $C_w = 0.49$ si l'écoulement est bi-dimensionnel [57,72].

II.5 Le modèle de la Fonction de Densité de Probabilité (PDF)

II.5.1 La Fraction de mélange

La fraction de mélange, Z , est un paramètre scalaire conservé adimensionnel caractérisant un mélange binaire. Elle n'est pas affectée par les réactions chimiques car elle concerne les éléments et pas les molécules chimiques. La fraction de mélange permet la mesure du degré du mélange du combustible et du comburant. C'est une variable générique de mélange qui représente le montant par rapport à ce que chaque flux de rentrées contribue au mélange local. Lorsque les entrées sont les flux de combustible et le comburant, la fraction de mélange peut être considérée comme établissant le rapport air et combustible ou stœchiométrie du mélange local. Dans la combustion d'hydrocarbure, une des méthodes expérimentales utilisée pour calculer la fraction de mélange est basée sur le calcul des fractions atomiques du carbone et l'hydrogène, quelle que soit la méthode dans laquelle ils se trouvent. La fraction de mélange peut s'écrire [73,74]:

$$Z = \frac{(Y_H - Y_{H,o}) / (\mu_H M_H) + (Y_C - Y_{C,o}) / (\mu_C M_C)}{(Y_{H,F} - Y_{H,o}) / (\mu_H M_H) + (Y_{C,F} - Y_{C,o}) / (\mu_C M_C)} \quad (\text{II.32})$$

Avec μ_f le nombre d'éléments atomiques « f » contenus dans les réactifs à la stœchiométrie. Par exemple, dans la combustion méthane / air.



$$\mu_C = 1, \mu_O = 4, \mu_H = 4$$

$Y_{H,o} = 0$ est la fraction massique totale des atomes d'hydrogène dans le comburant, $Y_{H,F} = 0.251$, dans le combustible. L'indice C correspond au carbone ($Y_{C,o} = 0, Y_{C,F} = 0.749$). M_F est la masse molaire de l'élément atomique «f ». Y_H et Y_c sont les fractions massiques atomiques qui dépendent du mélange. Elles sont calculées par la relation [73,74]:

$$Y_H = \sum_{f=1}^N \frac{\mu_H^f \cdot M_H}{M_f} Y_f \quad (\text{II.34})$$

Avec μ_H^f le nombre d'atomes d'hydrogène dans l'espèce f . Par exemple $\mu_H^{CH_4} = 4$.

Cette définition permet de conserver la valeur de la fraction de mélange à la stœchiométrie pour de nombreux réactifs, même quand la diffusion différentielle des espèces est significative. Aussi, elle peut être étendue en ajoutant les fractions atomiques de l'oxygène et de l'azote lorsque de nombreuses espèces chimiques interviennent dans le mélange réactifs (CO, OH,...) [73,75].

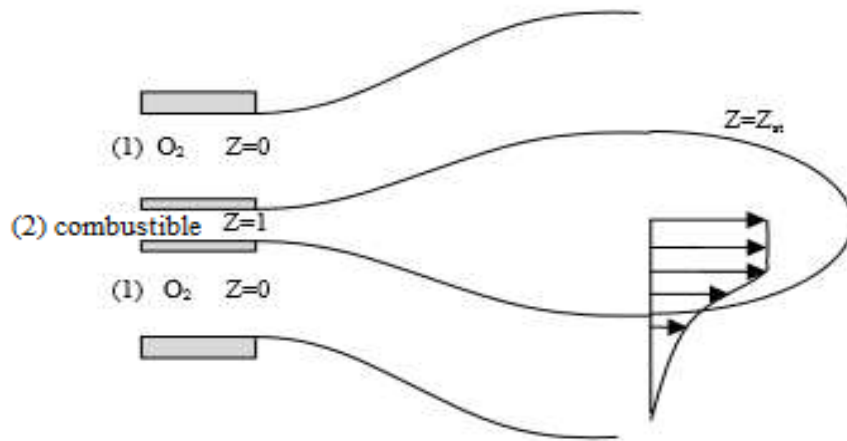


Figure.II.3: Exemple de l'injection non-prémélangée [1].

La fraction de mélange est également un scalaire conservé qui est représentatif des autres scalaires conservés comme la température et la fraction massique des espèces de mélange réactif. Les équations de ces derniers peuvent être formellement dérivée en prenant des combinaisons linéaires des équations de transport des espèces de telle sorte que le terme source de réaction s'annule. L'équation résultant décrira une grandeur physique qui est conservé au cours de la réaction chimique, comme l'enthalpie totale ou la fraction de masse

d'un élément chimique particulier. Tout scalaire conservé satisfait l'équation d'advection-diffusion, écrite ici pour la

fraction de mélange [1,76,77]:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho Z + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i Z) = \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho \alpha_c \frac{\partial}{\partial x_i} Z) \quad i=1, 2, 3 \quad (\text{II.35})$$

Parce que la conservation de transport scalaire est linéaire, un petit nombre de scalaires conservés formant une base complète est suffisante pour construire tous les autres scalaires conservés par superposition. Un système d'écoulement contenant « N » espèces nécessiterait en général « N » fractions de masses variables, cependant, une seule fraction de mélange suffit pour constituer une base complète sur le même mélange. Par convention, la fraction de mélange permet la mesure du degré du mélange du combustible et du comburant. Les valeurs de Z sont comprises entre 0 zéro (dans le comburant) et 1 un (dans le combustible) [1,77,78].

II.5.2 La variable d'avancement

L'avancement de la réaction ou de la flamme est le résultat d'un grand nombre de réactions chimiques élémentaires. Pour l'hydrocarbure le plus simple, une dizaine d'espèces intermédiaires et une centaine de réactions chimiques sont nécessaires. Cependant, il faut noter que peu de réactions ont de l'influence sur le processus général. Par conséquent, l'avancement chimique peut être représenté par peu de variables et dans le cas le plus simple par une variable d'avancement de la réaction c . Cette variable doit être normalisée, elle varie entre 0 zéro (pour le mélange frais) et 1 un (pour le gaz brûlé) figure (II.4) [66,1,76].

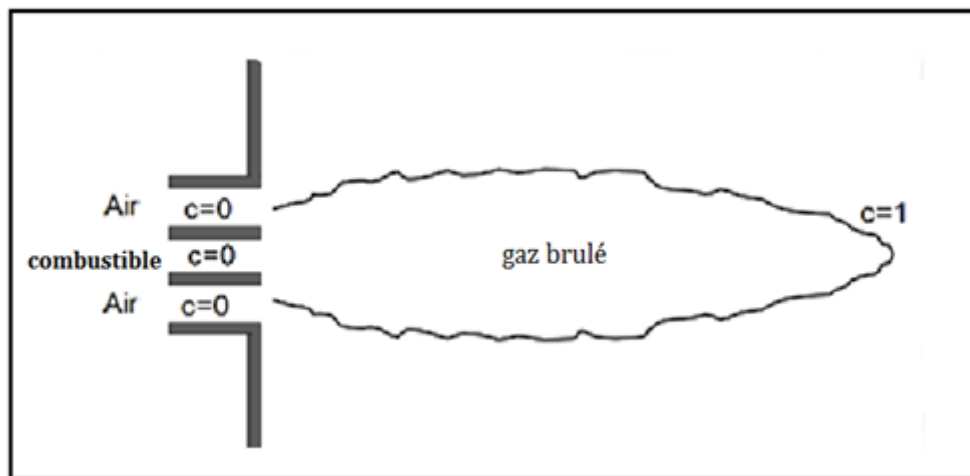


Figure. II.4: Définition de la variable d'avancement [1].

Couramment utilisée dans les flammes prémélangées cette variable peut aussi remplacer le taux de dissipation scalaire de la fraction de mélange ε_Z , soit ϕ_i un paramètre physique de l'écoulement [1,78]:

$$\varphi_i(Z, \varepsilon_Z) = \varphi_i(Z, c) \quad (\text{II.36})$$

Dans ce cas, la borne inférieure est limitée par l'avancement de la réaction à l'extinction de la flamme de diffusion. Cette transformation arbitraire permet d'utiliser les mêmes paramètres de contrôle dans un régime de l'écoulement de combustion prémélangé et combustion non-prémélangé, et ainsi faciliter les comparaisons. Il existe plusieurs définitions possibles pour décrire l'avancement global de la réaction. Elles peuvent être définies en fonction des réactifs et des produits de combustion, ou encore de la température. Le choix de la définition de c reste important. Une évolution homogène dans toute la flamme est nécessaire, ce qui écarte les espèces chimiques ayant des cinétiques chimiques trop rapides ou trop lentes. On voit alors apparaître un problème lié au nombre de variables d'avancement: peut-on connaître, pour un mélange donné, le vecteur de concentration des espèces chimiques et la température avec une seule variable d'avancement? Si cela est possible, le surcoût du temps de calcul en chimie complexe devient alors anodin, puisque les 50 (ou plus) équations de transport des espèces chimiques se résument à seulement 2 équations (Z, c) [74,78].

Les fractions massiques des produits de combustion, ou la température, ont un maximum de la variation à la stœchiométrie; elles sont donc des variables privilégiées pour définir l'avancement de la réaction [1].

$$c = \frac{T - T_0}{T_{eq} - T_0} \quad (\text{II.37})$$

$$c = \frac{Y_{CO_2}}{Y_{CO_2}^{eq}} \text{ Ou encore } c = \frac{Y_{H_2O}}{Y_{H_2O}^{eq}} \quad (\text{II.38})$$

Il est possible de faire des combinaisons entre les espèces chimiques :

$$c = \frac{Y_{CO_2} + Y_{CO}}{Y_{CO_2}^{eq} + Y_{CO}^{eq}} \quad (\text{II.39})$$

Et :

$$c = \frac{Y_{CO_2} + Y_{CO} + Y_{H_2O}}{Y_{CO_2}^{eq} + Y_{CO}^{eq} + Y_{H_2O}^{eq}} \quad (II.40)$$

L'équation de transport donnant la variable d'avancement c peut être sous la forme [66,79]:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho c + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i c) = \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho \alpha_c \frac{\partial}{\partial x_i} c) + \rho \omega_c \quad (II.41)$$

II.6 Généralité du modèle PDF

Les concepts de simulation peuvent être prévus pour fonctionner pour la fermeture des équations du bilan du système, où on utilise des approches de la fonction de densité de probabilité (PDF). Par exemple, la fonction d'état pour la masse volumique Eq (II.26) peut en général être une fonction non-linéaire arbitraire des variables scalaires $P(\phi_1, \phi_2, \dots)$. Si l'on couple le PDF au modèle de sous-maille on obtient, $\bar{\rho}$ connu par la densité filtrée qui peut être évaluée et employée :

$$\bar{\rho} = \overline{f(\phi_1, \phi_2, \dots)} = \int f(\phi_1, \phi_2, \dots) P(\phi_1, \phi_2, \dots) d\phi_1 d\phi_2 \dots \quad (II.42)$$

Quand le filtrage de Favre est employé pour les variables scalaires, il est plus approprié d'évaluer les quantités filtrées en utilisant le couplage PDF / Favre pour le sous-maille Eq(II.42) sous la forme suivante [77,80,81]:

$$\bar{y} = \int y(\phi_1, \phi_2, \dots) \tilde{P}(\phi_1, \phi_2, \dots) d\phi_1 d\phi_2 \dots \quad (II.43)$$

Où la fonction de densité probabilité filtrée par Favre s'écrit [18, 29, 57, 58, 61, 63-65] :

$$\tilde{P}(\phi_1, \phi_2, \dots) = \frac{\rho(\phi_1, \phi_2, \dots) P(\phi_1, \phi_2, \dots)}{\bar{\rho}} \quad (II.44)$$

La densité filtrée peut être obtenue en utilisant $\tilde{P}$:

$$\bar{\rho} = \left[\int \frac{\tilde{P}(\phi_1, \phi_2, \dots)}{\rho(\phi_1, \phi_2, \dots)} d\phi_1 d\phi_2 \dots \right]^{-1} \quad (II.45)$$

L'un des objectifs des modèles de combustion turbulente est de déterminer le taux de production moyen engendré par les réactions chimiques. Du fait de la forte non linéarité des taux de production (ou de destruction) des différentes espèces, l'estimation du taux de production chimique moyen n'est pas directe et doit être basée sur une approche phénoménologique. L'analyse décrite au cours du chapitre précédent conduit à une classification des régimes de combustion et permis de développer des modèles adaptés à chaque régime de combustion. Ces différents modèles ont chacun une approche physique du problème de combustion turbulente qui leur est propre. Nous utiliserons une variable d'avancement de la réaction c définie de telle sorte qu'elle soit nulle ($c=0$) dans les gaz frais et égale à l'unité ($c=1$) dans les gaz complètement brûlés. La fraction de mélange Z introduite ici est nulle ($Z=0$) dans l'oxydant pur et égale à l'unité ($Z=1$) dans le combustible pur [1,77,78].

Le taux de réaction chimique moyen peut également être estimé en cherchant à quantifier précisément le mélange que la turbulence engendre entre les gaz frais et les gaz brûlés ou entre le combustible et l'oxydant. Les termes qui représentent ce mélange sont les termes de dissipation scalaire ε_c et ε_Z qui apparaissent dans les équations pour les variances $\tilde{c}^2$ et $\tilde{Z}^2$. Dans le cas des flammes non-prémélangées, comme le combustible et l'oxydant doivent se mélanger pour réagir, le taux de dissipation ε_Z joue également un rôle essentiel. La réaction chimique n'agit pas directement sur ce taux de dissipation scalaire ε_Z mais indirectement par le biais des variations de masse volumique. Les taux de dissipation scalaire ε_c et ε_Z sont des paramètres clés pour la modélisation de la combustion turbulente. Quelle que soit l'approche physique utilisée les taux de dissipation scalaire interviennent directement ou indirectement dans les modèles. Certaines méthodes proposent d'ailleurs de résoudre directement des équations de transport pour ces quantités [82].

Les propriétés statistiques des champs scalaires, en un point de l'écoulement (moyennes, variances ...), peuvent être déduites de la fonction densité de probabilité (PDF). Contrairement à l'analyse géométrique qui considère souvent la flamme comme une interface, l'utilisation d'une méthode de PDF permet d'obtenir les propriétés statistiques d'états intermédiaires c'est-à-dire dans le front de flamme. $P(c)dc$ est la probabilité que la variable c ait une valeur comprise entre c et $c+dc$ au point x et au temps t . Les quantités statistiques peuvent alors être exprimées à l'aide de la PDF, par exemple [82,83]:

$$\bar{c} = \int_0^1 c P(c; x, t) dc \quad \text{et} \quad \overline{c^2} = \int_0^1 (c - \bar{c})^2 P(c; x, t) dc \quad (\text{II.46})$$

La PDF doit être normalisée, ce qui permet d'écrire la relation suivante :

$$\int_0^1 P(c; x, t) dc = 1 \quad (\text{II.47})$$

Lorsque plusieurs variables sont nécessaires pour décrire la structure de la flamme, une PDF doit être utilisée. Si les variables sont la fraction de mélange et l'avancement de la réaction, la PDF s'écrit $P(c, Z; x, t)$. Une quantité statistique dont la valeur locale et instantanée est fonction de ces deux variables, comme par exemple le taux de réaction chimique moyen s'écrit alors :

$$\overline{\omega_c} = \int_{Z_1}^{Z_2} \int_0^1 \omega_c P(c, Z; x, t) dz dc \quad (\text{II.48})$$

On peut noter que Klimenko et Bilger ont proposé d'utiliser des fermetures pour ces moyennes, cette démarche semble a priori bien adapté pour les flammes non-prémélangées puisque la réaction chimique se produit préférentiellement au voisinage des conditions stœchiométrique. Les modèles de la turbulence basés sur l'approche statistique de PDF sont de deux types différents [57,82]:

- Les modèles à PDF présumée.
- Les modèles à PDF transportée.

II.7 Types de l'approche PDF

II.7.1 Le modèle à PDF présumée

Le bêta PDF a été évalué en tant que modèle pour des fluctuations de fraction de mélange de sous-maille pour LES. Le Cook et le Riley (1994) ont examiné le bêta PDF dans la simulation de la turbulence homogène en considérant que la chimie est de type infiniment rapide. Jiménez (1997) a démontré la fiabilité de bêta PDF pour le cas d'une couche incompressible d'un mélange turbulente. De même, Wall et Moins (2000) ont testé le bêta PDF en présence du dégagement de la chaleur. L'équation d'état et d'autres fonctions non linéaires peuvent être déterminées souvent avant de lancer le calcul, dans ce cas les intégrales de PDF peuvent être calculées et stockées dans des tables de consultation avant que la simulation commence [84,66,69].

Le premier type de modèle consiste à présumer la forme de la PDF. Par exemple, si on présume que la PDF de la fraction de mélange a la forme d'une fonction bêta (fonction définie par trois paramètres), la connaissance de la moyenne Z , la variance $\tilde{Z}^2$ et la condition de normalisation de la PDF vont permettre de déterminer complètement la forme de la PDF $P(Z;x, t)$ en chaque point de calcul. La résolution des équations pour la valeur moyenne $\bar{Z}$ et la variance $\tilde{Z}^2$ suffisent, via la PDF, à déterminer n'importe quelle quantité statistique dont la valeur locale et instantanée n'est fonction que de Z .

Dans le modèle de PDF présumé, la fonction de densité de probabilité est modélisée directement en utilisant les formes analytiques simples, telles que la bêta distribution. Cependant, la bêta distribution peut être prévue pour être valide seulement pour des grandeurs scalaires conservées.

La fonction de densité de probabilité du modèle PDF présumé pour la bêta distribution sur l'intervalle, $0 \leq x \leq 1$, est donnée par [66,69]:

$$P(x;a,b) = x^{a-1}(1-x)^{b-1} \frac{\Gamma(a+b)}{\Gamma(a)\Gamma(b)} \quad (\text{II.49})$$

Où les paramètres a et b sont liés à la moyenne de distribution et la variance de (μ, σ^2) on les écrit :

$$a = \frac{\mu(\mu - \mu^2 - \sigma^2)}{\sigma^2}, b = \frac{(1-\mu)(\mu - \mu^2 - \sigma^2)}{\sigma^2} \quad (\text{II.50})$$

Une fois appliqué à la fraction de mélange, on a $x \rightarrow Z$, $\mu \rightarrow \tilde{Z}$ et $\sigma^2 \rightarrow \tilde{Z}^2$

Où :

Z : fraction de mélange.

$\tilde{Z}$: fraction de mélange moyenne.

$\tilde{Z}^2$: fraction de mélange moyenne variance.

II.8 Application des modèles

Jusqu'à maintenant, on a considéré l'interaction de la combustion avec la variable d'avancement et la fraction de mélange. Il s'agit de séparer les hypothèses utilisées dans le modèle de chimie de celles utilisées dans le modèle de turbulence. Lorsqu'on est écrit en termes quantités filtrées les équations (II.35) et (II.41) deviennent [66,82].

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho \tilde{Z}}{\partial t} + \nabla(\rho \tilde{u} \tilde{Z}) = \nabla \left[\bar{\rho}(\alpha_z + a_t) \nabla \tilde{Z} \right] \\ \frac{\partial \rho \tilde{c}}{\partial t} + \nabla(\rho \tilde{u} \tilde{c}) = \nabla \left[\bar{\rho}(\alpha_c + a_t) \nabla \tilde{c} \right] + \bar{\rho} \tilde{\omega}_c \end{cases} \quad (\text{II.51})$$

Où a_t est la diffusivité turbulente. Pour tenir compte des fluctuations sous-maille dans la fraction de mélange et la variable d'avancement, les variables de contrôle de la combustion sont filtrées et on obtient en intégrant Eq (II.41) et (II.49) pour PDF de Z et C [66,73,82]:

$$\tilde{y}_i = \int y_i(c, Z) \tilde{P}(c, Z, x, t) dZ dc \quad (\text{II.52a})$$

$$\tilde{\omega}_c = \int \omega_c(c, Z) \tilde{P}(c, Z, x, t) dZ dc \quad (\text{II.52b})$$

L'implémentation des paramètres de contrôle dans des études similaires de la combustion a mis en œuvre l'emploi des relations d'état chimique déterminée par l'application du PDF assumé afin de représenter les fluctuations sous-maille. La grande différence, bien sûr, est de calculer les paramètres physiques (fraction massique, température) par la variable d'avancement au lieu d'utiliser le taux de dissipation. Une fois les paramètres sont évalués, le reste des variables peuvent être générés pour le but de fournir les variables chimiques filtrées en fonction des quantités disponibles en permanence LES ($\tilde{Z}''^2$, $\tilde{Z}$ et $\tilde{c}$) [74,79,82]:

$$\tilde{y}_i = \tilde{y}_i(\tilde{Z}, \tilde{Z}''^2, \tilde{c}), \quad \tilde{T} = \tilde{T}(\tilde{Z}, \tilde{Z}''^2, \tilde{c}) \quad \text{et} \quad \bar{\rho} = \bar{\rho}(\tilde{Z}, \tilde{Z}''^2, \tilde{c}) \quad (\text{II.53})$$

Notez que Eq (II.53) comprend des expressions similaires pour $\tilde{\mu}$, $\tilde{\alpha}_z$, $\tilde{\alpha}_c$ et $\tilde{\omega}_c$ qui sont utilisés dans la solution à grande échelle du bilan des équations dynamique et équations de transport à paramètres scalaires. Le temps de calcul de l'approche PDF est petit par rapport aux autres modèles chimiques, car les fonctions d'Eq (II.53) peuvent être pré-calculées et exploitées avant d'exécuter une simulation [85]. La source du coût additionnel est causée par la résolution de l'équation de transport pour la variable d'avancement Eq (II.50).

Lorsque le temps chimique n'est plus infiniment petit devant le temps caractéristique de la turbulence, la PDF de l'avancement de la réaction c ou de la température ne peut plus être considérée comme quasi bimodale et sa forme dépend de l'endroit considéré dans le flamme. La forme de la PDF doit passer d'un pic dans les gaz frais à un pic dans les gaz brûlés de façon continue. La variance $\tilde{c}''^2$ doit également varier à la traversée de la flamme tout en restant inférieure à sa valeur maximale $\tilde{c}(1-\tilde{c})$, valeur pour laquelle la PDF est bimodale. On peut donc se donner une forme présumée de la PDF qui dépend d'un nombre fini de paramètres. Ces paramètres de la PDF sont calculés à partir des différents moments de la variable c . Si, par exemple, la forme de la PDF ne dépend que de trois paramètres, alors la valeur moyenne $\tilde{c}$ (premier moment), la variance $\tilde{c}''^2$ (second moment) et la condition de normalisation de la PDF suffisent à calculer ces paramètres [66,86,58].

Pour déterminer la forme locale de ces PDF, les équations de transport pour la valeur moyenne $\tilde{c}$ et la variance $\tilde{c}''^2$ doit être résolue. Dans ces équations les termes liés à la réaction chimique ne posent plus de problème puisque la PDF est connue, en revanche les termes de diffusion turbulente et les termes de dissipation scalaire sont toujours inconnus et nécessitent un effort particulier de modélisation. Ces derniers termes, peuvent être fermés en résolvant des équations de transport pour les flux turbulents et la dissipation scalaire ou en utilisant des modèles algébriques pour ces quantités (loi gradient et relaxation linéaire de la variance) [79,82].

Conclusion

La turbulence est un phénomène cinétique, où les équations de Navier- stocks s'écrivent sous une forme compliquée avec des termes additionnelles, dans ce cas la solution du système des équations est quasiment impossible, car le nombre des variables est supérieur aux nombres des équations, ce qui t'appelé le problème de « fermeture ». De raison de surmonter se problème il faudrait utiliser l'un des modèles de la turbulence, la simulation aux grandes échelles "LES" et la fonction de densité de probabilité du modèle (PDF).

Nous avons choisi le calculer des équations de transport pour la fraction de mélange Z dans les calculs en chimie complexe pour la combustion non-prémélangée. Ces définitions de la fraction de mélange permettent de faire des comparaisons entre les calculs en chimie complexe et l'expérience avec des incertitudes qui restent raisonnables. L'objectif est de

capturer le vecteur de concentration d'espèces chimiques et la température, lorsque la fraction de mélange, Z , et l'avancement de la réaction, C , sont fixés.

Ces résultats, qualitativement plus que quantitativement, ne suffisent pas à déterminer clairement si le choix de la méthode de calcul est primordial dans la modélisation de la combustion turbulente.

L'objectif de ce chapitre, est de traiter la combustion turbulente non-prémélangé, en choisissant le couplage de LES/PDF comme un modèle de la turbulence pour ces motifs :

- Géométries complexes et 3D,
- Différentes longueurs des échelles de turbulence,
- Indépendance de la viscosité turbulente aux constantes semi- empiriques,
- Calcul des paramètres dynamiques loin et proches des parois,
- Couplage avec les modèles de combustion.
- En plus, le modèle PDF offre une réduction des équations du système, une fois la fraction de mélange et la variable d'avancement sont intégrées. Ce qui apparaît dans la minimisation du temps de calcul.
- Est compatible avec l'approche « LES».
- Le choix de (LES-PDF) est basé sur sa capacité de réduire le temps de calcul grâce aux deux paramètres générique (Z , C).

Chapitre III

Le Comportement de la Combustion de l'Hydrogène et le Méthane

Les modèles mathématiques décrits dans la deuxième chapitre ont été étudiée la simulation numérique de la combustion turbulente non prémélangée dans une chambre cylindrique fournie par (Méthane-Hydrogène/air). Nous avons utilisé le code FLUENT-CFD. Le calcul a été effectué en utilisant le couplage du modèle LES avec l'approche PDF afin de surmonter la fermeture du système des équations du bilan aéro-thermochimiques, dans des conditions identiques à celle de l'expérience. En outre, l'importance de l'estimation des paramètres dans les différentes stations et les différentes zones du brûleur, nous fournit plus d'informations sur la fiabilité des modèles utilisés pour la simulation. On considère trois paramètres sont: la vitesse axiale moyenne, la température et la fraction massique du monoxyde carbone CO. De plus, dans cette partie, nous validons le couplage des modèles LES-WALE et l'approche Beta-PDF avec les données expérimentales dans les mêmes stations et les mêmes conditions. Les résultats montrent que les modèles sélectionnés donnent un accord satisfaisant avec toutes les régions considérées.

III.1 Configuration expérimentale et domaine d'application

III.1.1 La configuration de la chambre de combustion

La configuration qui confine la chambre de combustion est donnée dans la figure (III.1). Là où il s'agissait de nombreuses recherches expérimentales en raison de sa géométrie relativement simple et de sa similarité avec le brûleur à turbine à gaz [87]. Nous avons donc étudié la validation numérique des modèles couplés LES/PDF avec les données expérimentales, pour étudier le comportement de la combustion non prémélangée alimentée par CH_4 et H_2 . Alors que l'étude se compose de trois paramètres principaux: vitesse axiale moyenne, température moyenne et la fraction massique moyenne du monoxyde de Carbone. La chambre de combustion cylindrique est de rayon $R_4=0.06115$ m et longueur $L=1$ m en fournie par deux jets coaxiaux, la centrale a un rayon interne $R_1=0.03157$ m et un rayon externe $R_2=0.03175$ m, qui injecte le méthane avec un débit massique d'entrée $Q_1=0.0072$ kg/s et une température respectivement $T_1=300$ K. L'annulaire a un rayon interne $R_3=0.04685$ m, qui injecte l'air avec un débit massique d'entrée $Q_2=0.137$ kg/s et à une température préchauffé $T_2=750$ K. La chambre de combustion est mise sous pression de 3,8 atm et a une paroi de température constante de $T_{\text{paroi}}=500$ K [87].

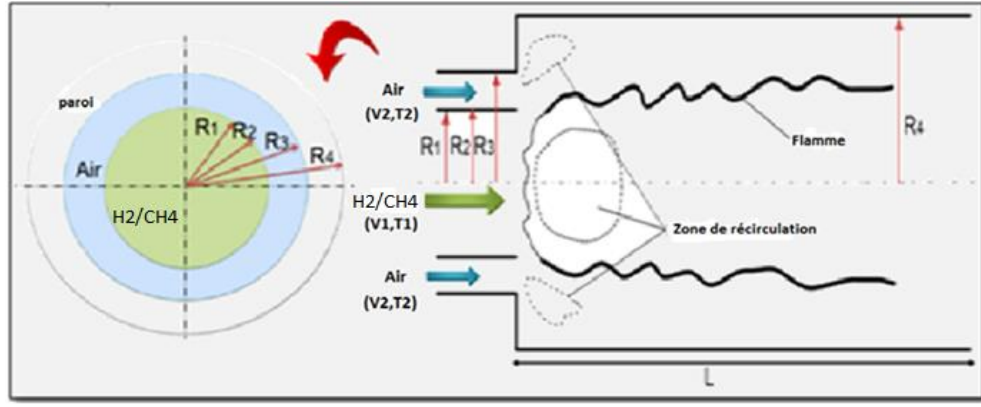


Figure.III.1: Schéma du brûleur

L'étude numérique actuelle étudie le brûleur cylindrique à trois dimensions (3D). Dans le cas où, la grille utilisée pour toutes les simulations est réalisée par Gambit. Par conséquent, les maillages sélectionnés sont de type parallélépipédique; La grille est lisse et raffinée pour les limites presque solides du brûleur et dans la direction longitudinale dans le niveau d'interaction de l'air et du carburant, pour recevoir plus d'informations dans la limite solide et la zone de flamme. Le volume contient environ 2,7 millions de cellules, la taille d'une cellule va de $2.934596e-07 \text{ m}^3$ à $3.057304e-09 \text{ m}^3$.

III.1.2 Équations de bilan

Dans ce chapitre, nous étudions le comportement d'une combustion turbulente non prémélangée, en trois dimensions à l'aide de la simulation numérique. Nous pouvons écrire les équations de régulation pour le flux compressible dans les coordonnées cartésiennes comme suit [66,88]:

$$\text{Continuité} \quad \frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i) = 0 \quad (\text{III.1})$$

$$\text{Quantité de mouvement} \quad \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j) = - \frac{\partial}{\partial x_i} [\bar{\rho} (\overline{u_i u_j} - \tilde{u}_i \tilde{u}_j)] - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{\tau}_{ij}}{\partial x_i} \quad (\text{III.2})$$

$$\text{Energie} \quad \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{h}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{h}) = - \frac{\partial}{\partial x_i} [\bar{\rho} (\overline{u_i h} - \tilde{u}_i \tilde{h})] + \frac{\partial \bar{p}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} \overline{u_j \tau_{ij}} \quad (\text{III.3})$$

$$\text{Espèces} \quad \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_f}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{Y}_f) = - \frac{\partial}{\partial x_i} [\bar{\rho} (\overline{u_i Y_f} - \tilde{u}_i \tilde{Y}_f)] + \bar{\omega}_f \quad (\text{III.4})$$

Etat Thermodynamique $\bar{p} = \bar{\rho} R \tilde{T}$ (III.5)

$$i = 1,2,3 \text{ et } j = 1,2,3$$

Les nombreux modèles de sous-grille sont basés sur l'hypothèse de Bousinés qui présente le tenseur des contraintes non résolues τ_{ij} à la vitesse du tenseur de déformation $\tilde{S}_{ij}$ par l'intermédiaire d'une viscosité turbulente. Les petites écailles influencent les grandes échelles par le stress LES :

$$\bar{\tau}_{ij} = 2\bar{\rho}v_T\tilde{S}_{ij} - \frac{1}{3}\bar{\rho}\tilde{K}_u\delta_{ij} \quad (III.6)$$

Où se trouve l'énergie cinétique de la sous-grille.

Le tensor du taux de déformation filtré est défini par [90,91]:

$$\tilde{S}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} + \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} \right) - \frac{1}{3} \tilde{u}_l \delta_{ij} \quad (III.7)$$

Nous avons choisi le modèle de viscosité WALE pour représenter le terme de viscosité de Fouille dans l'équation (III.8). L'idée principale de ce modèle est de récupérer le comportement approprié de la viscosité des Fougères près du mur dans le cas d'écoulements délimités à la paroi, tout en conservant des propriétés intéressantes telles que la capacité de ne fournir aucune viscosité de Foucault en cas de turbulence de fuite [89].

L'intérêt majeur de ce modèle repose d'abord sur le fait qu'il n'a pas besoin d'informations sur la direction et la distance du mur, ce qui est réellement approprié pour les réseaux non structurés, où l'évaluation d'une distance par rapport au mur est précaire. Le tenseur de contrainte résiduelle du modèle de viscosité de Foucault de WALE peut être trouvé comme [90]:

$$v_t = (C_w \Delta)^2 \frac{(s_{ij}^d s_{ij}^d)^{3/2}}{(\tilde{s}_{ij}^d \tilde{s}_{ij}^d)^{5/2} + (s_{ij}^d s_{ij}^d)^{5/4}} \quad (III.8)$$

$$s_{ij}^d = \frac{1}{2} (\tilde{g}_{ij}^2 + \tilde{g}_{ji}^2) - \frac{1}{3} \tilde{g}_{kk}^2 \delta_{ij} \quad (III.9)$$

$$\tilde{g}_{ij} = \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} \quad (III.10)$$

C_w : constante de modèle WALE ($C_w = 0,49$). La largeur du filtre spatial est généralement liée à la taille de la grille du champ résolu.

III.2 Résultats et discussion

Dans cette section, nous commençons par la validation des modèles couplés décrits précédemment avec les données expérimentales. Les résultats sont validés dans les mêmes stations et définis dans l'expérience. En outre, les mêmes paramètres utilisés pour la validation sont utilisés également pour contrôler le comportement de flamme fourni par CH_4 ou H_2 . En outre, la présentation et la comparaison des résultats sont basées sur la normalisation de la longueur et de la vitesse en utilisant, respectivement, le rayon de l'injecteur ($R \equiv R_3$) et la vitesse de l'air d'entrée ($U \equiv V_2$).

III.2.1 Validation Numérique

III.2.1.1 Vitesse axiale

Les figures (III.2) illustrent la comparaison des profils radiaux de la vitesse axiale moyenne obtenue par le calcul des modèles couplés LES_WALE/PDF et les données expérimentales [66]. En fait, les résultats numériques atteignent significativement un bon accord avec les données expérimentales. Ainsi, les valeurs négatives de la vitesse dans le $x/R=0,14, 0,38$ et $1,27$ présentent les régions de recirculation. Dans ce cas, nous observons la formation de deux zones de recirculation. Le premier situé au centre du brûleur au niveau du jet de carburant, généré par le flux retardé du méthane. Et le second provoqué par le changement brutal dans la section du brûleur comparativement aux jets coaxiaux. Cependant, les valeurs élevées de la vitesse sont situées dans la zone de flamme présentée par le pic ($x/R=0,14, 0,38$ et $1,27$); Où il a disparu dans la dernière station ($x/R=4,67$). La divergence peut être due au fait que les conditions d'entrée de méthane et d'air entièrement développées ont été supposées dans les simulations. Mais, dans l'expérience, les dispositifs d'écoulement d'entrée étaient situés uniquement à courte distance en amont du brûleur. Ainsi, l'incertitude relative moyenne entre le calcul et l'expérience est donnée par 7%.

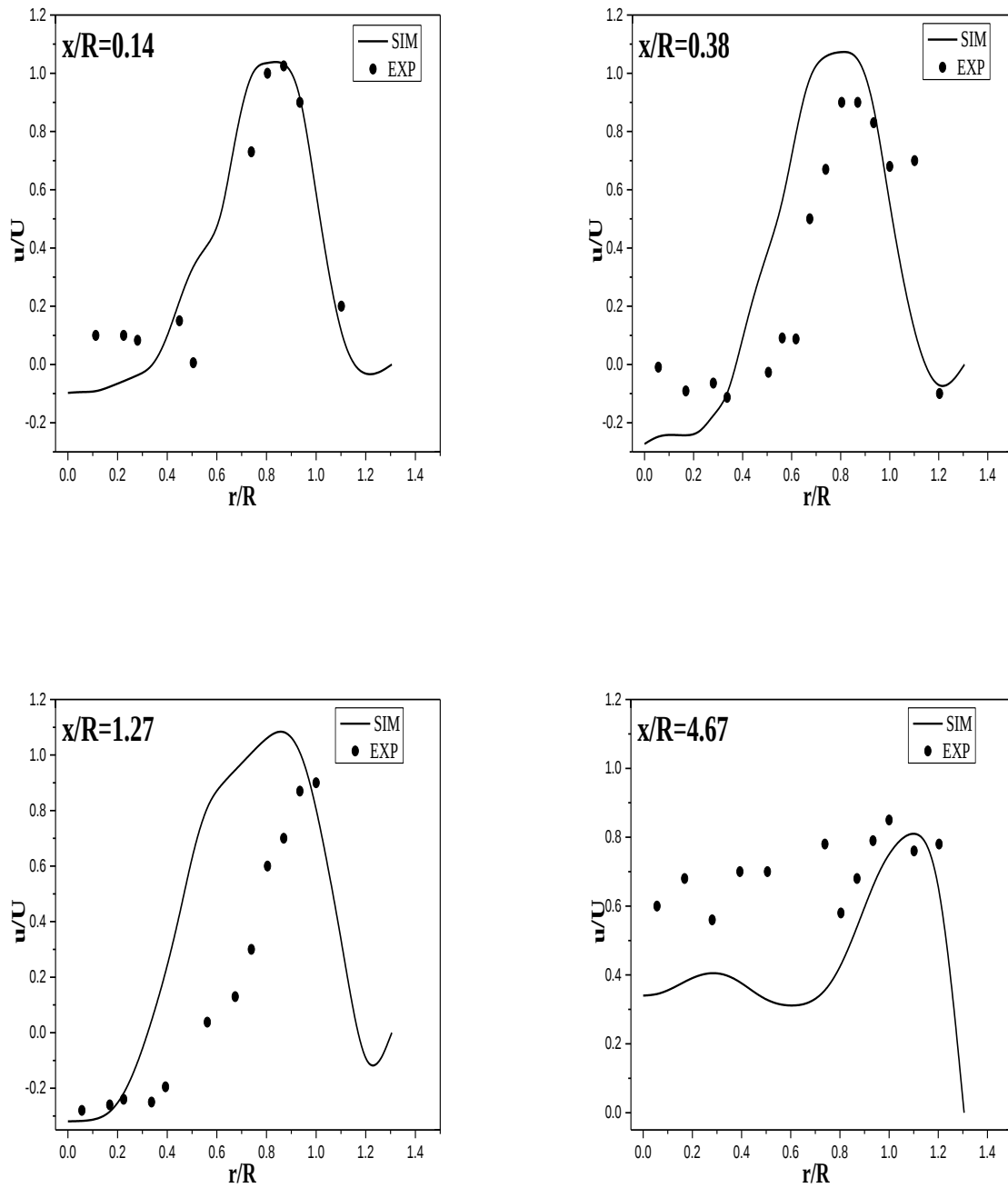


Figure.III.2: *Profils de vitesse axiale moyenne*

III.2.1.2 Température

Les comparaisons des profils radiaux prédits de la température moyenne avec les expériences dans différentes stations ($x/R=0,89, 1,57, 4,52$ et $5,20$) dans le brûleur sont présentées dans les figures (III.3). Les profils numériques et expérimentaux ont presque la même tendance. Alors

que les profils caractérisés par le pic qui présentait la zone de flamme, où il était assis sur les couches de cisaillement qui est la même zone où le carburant et l'air se rencontrent. La zone de cisaillement est créée pour améliorer le mélange des deux flux de jets coaxiaux pour alimenter la chambre de combustion par un mélange riche. Alors que les valeurs élevées de température sont situées autour de la zone de flamme et que la température commence à diminuer avec la distance radiale pour atteindre la température de la paroi. En outre, le sommet fondé sur les profils de température s'atténue en aval du brûleur. Le niveau général d'accord entre la simulation et l'expérience est satisfaisant. Par la présente, la comparaison montre une surestimation, en particulier dans la dernière station $x/R=5,20$. De ce fait, ce désaccord est dû aux régions à fortes fluctuations de température et à la difficulté d'assurer parfaitement la condition d'expérience des parois isothermes de refroidissement à 500K [91]. La moyenne d'incertitude relative entre la simulation et l'expérience est donnée de 10%.

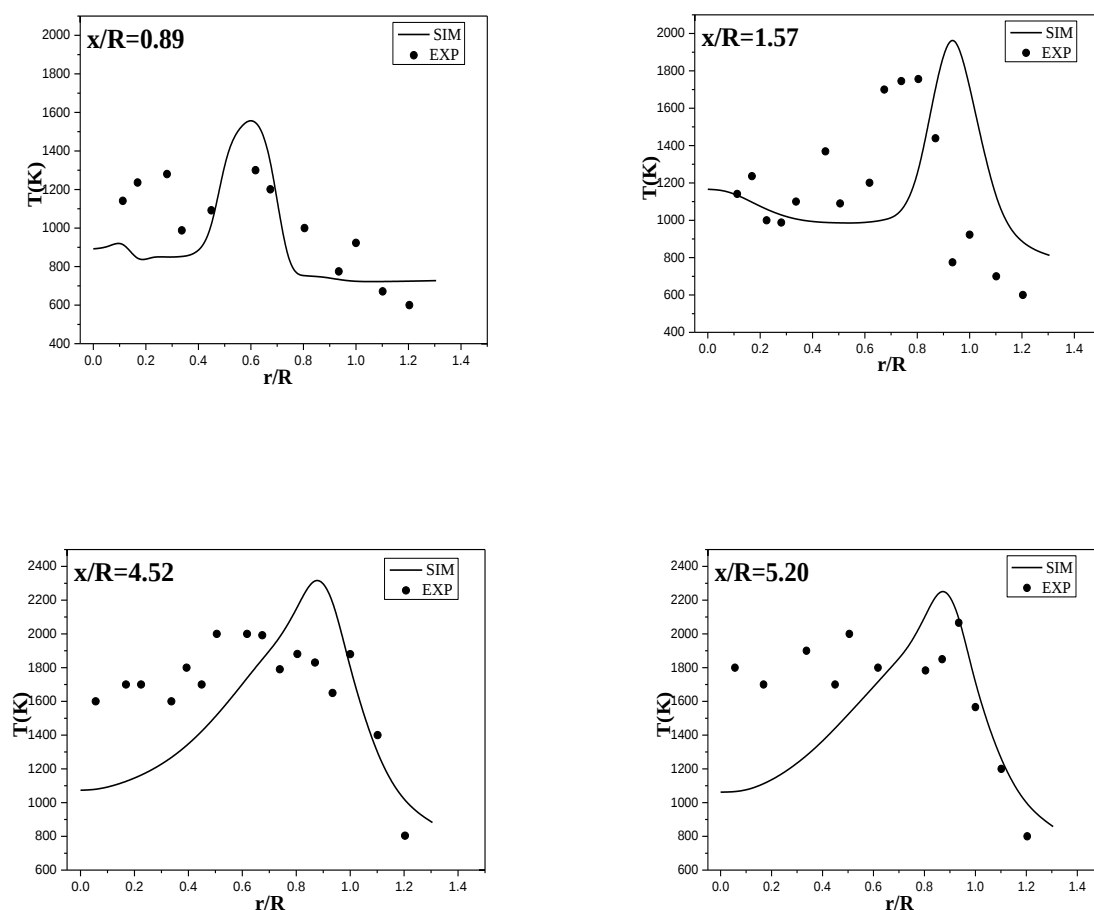


Figure.III.3: Profils de la température moyenne

III.2.1.3 Fraction massique de monoxyde de carbone

Les figures (III.4) illustrent la comparaison de la distribution radiale prédite et expérimentale de la fraction de masse de monoxyde de carbone pour différentes stations du brûleur. Le calcul prédit ainsi que les valeurs de la fraction de masse de CO comparativement aux données expérimentales. En effet, les valeurs de hauteur de la fraction de masse du CO situé au centre de la chambre de combustion, qui diminuent en s'éloignant le centre de brûleur. Les profils de la fraction de masse de CO ont la même tendance avec des profils de température qui expliquent les valeurs élevées de CO autour de la zone de flamme, la zone de réaction et la production de CO. Dans la première station, $x/R=0,21$, les valeurs de CO sont faibles par rapport aux trois autres stations. Cependant, dans les stations de repos ($x/R=3,16$, $3,84$ et $7,41$), le mélange de méthane et d'air est causé par l'effet de turbulence, qui permet leur mélange et leur combustion afin de produire du CO avec des valeurs élevées. Le désaccord entre le numérique et l'expérience est donné de 5%.

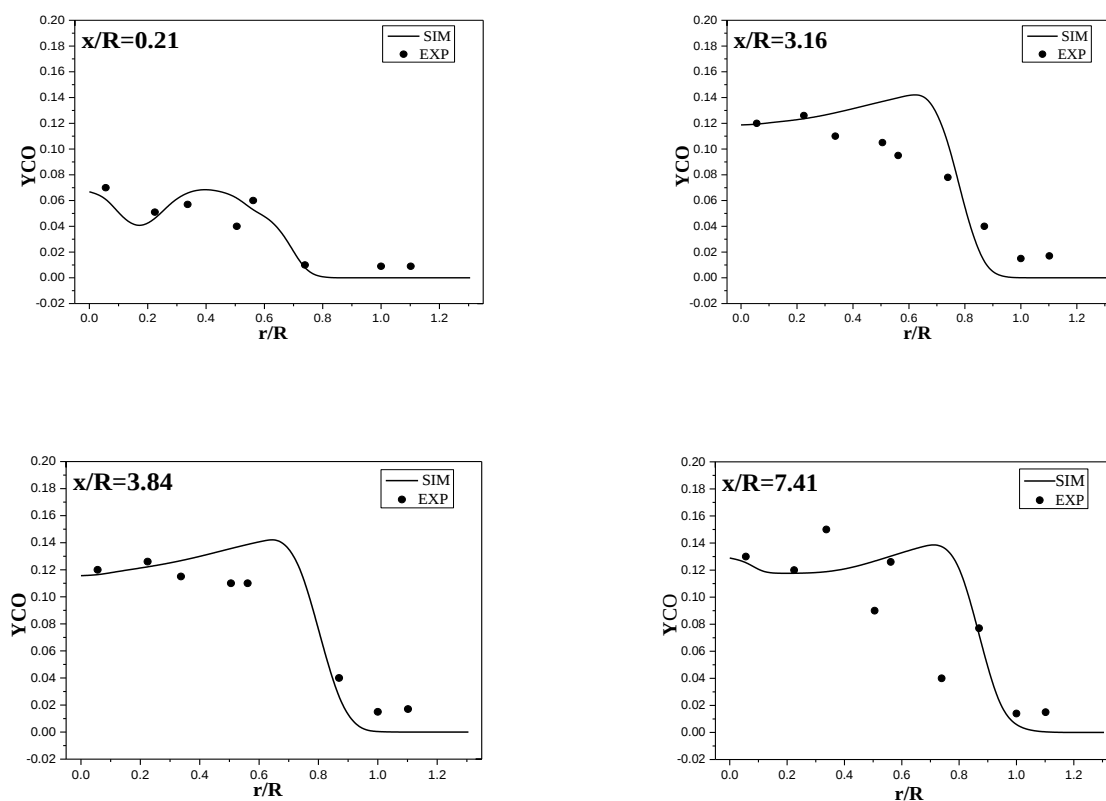


Figure.III.4: Profils de la fraction massique de monoxyde de carbone.

III.2.2 Comparaison des combustibles H_2 et CH_4

III.2.2.1 Vitesse axiale

Les figures (III.5) illustrent la comparaison entre la vitesse axiale moyenne du H_2 et du CH_4 dans différentes stations ($x/R=0,14, 0,38, 1,27$ et $4,67$) dans la chambre de combustion. Ces profils sont caractérisés par le pic dans les trois premières stations, où il se trouve dans la zone de la flamme, avec une légère diminution de la vitesse axiale, où il disparaît dans la dernière station. Les valeurs élevées dans toutes les stations présentées par le pic. Dans cette zone, les valeurs du taux de vitesse sont supérieures à 1. Ainsi, nous pouvons également voir des valeurs négatives dans les profils de vitesse de méthane dans le $x/R=0,14, 0,38$ et $1,27$ qui montrent les régions de recirculation au centre du brûleur et à proximité des parois. Ces zones disparaissent lorsque nous sortons à l'entrée de la chambre de combustion (voir la dernière station). Nous observons que la vitesse du hydrogène est supérieure à la vitesse du méthane puisque la masse de d'hydrogène inférieure à la masse de méthane.

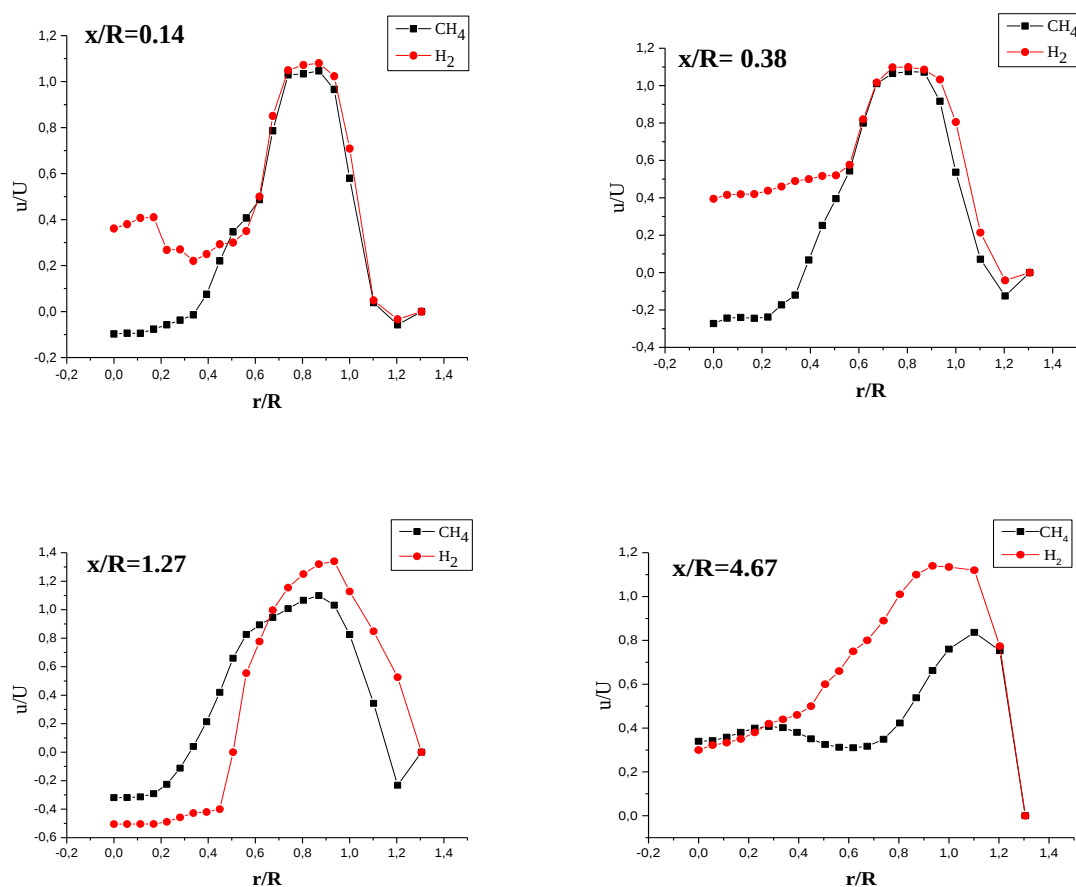


Figure.III.5: Profils des vitesses axiales considérées de l'hydrogène et le méthane.

III.2.2.2 Température

Les figures (III.6) représentent la distribution de la température moyenne d'hydrogène et du méthane dans la chambre de combustion. Dans la zone de flamme, les profils de la température présentent par le pic dans les stations (0.89, 1.57, 4.52 et 5.20), puis diminuent à égale à la température des parois (500K). Les valeurs élevées de la température sont situées dans la zone de la flamme pour le deux carburants H_2 et CH_4 , car cette zone est la même zone de réactions chimiques et ces réactions sont considérées comme des réactions exothermiques. Les valeurs de température diminuent lorsque nous nous éloignons de la zone de flamme. Les positions des pics dans toutes les stations déplacent au niveau du jet d'air pour le cas du H_2 , avec une légère augmentation des valeurs de température par rapport du CH_4 . La valeur de température de méthane dans le milieu de la chambre de combustion égale 1200K et diminue à la valeur de température de l'hydrogène égale 600K. La différence de température du H_2 et du CH_4 peut être interprétée par la différence de température adiabatique caractérisant chaque cheminée.

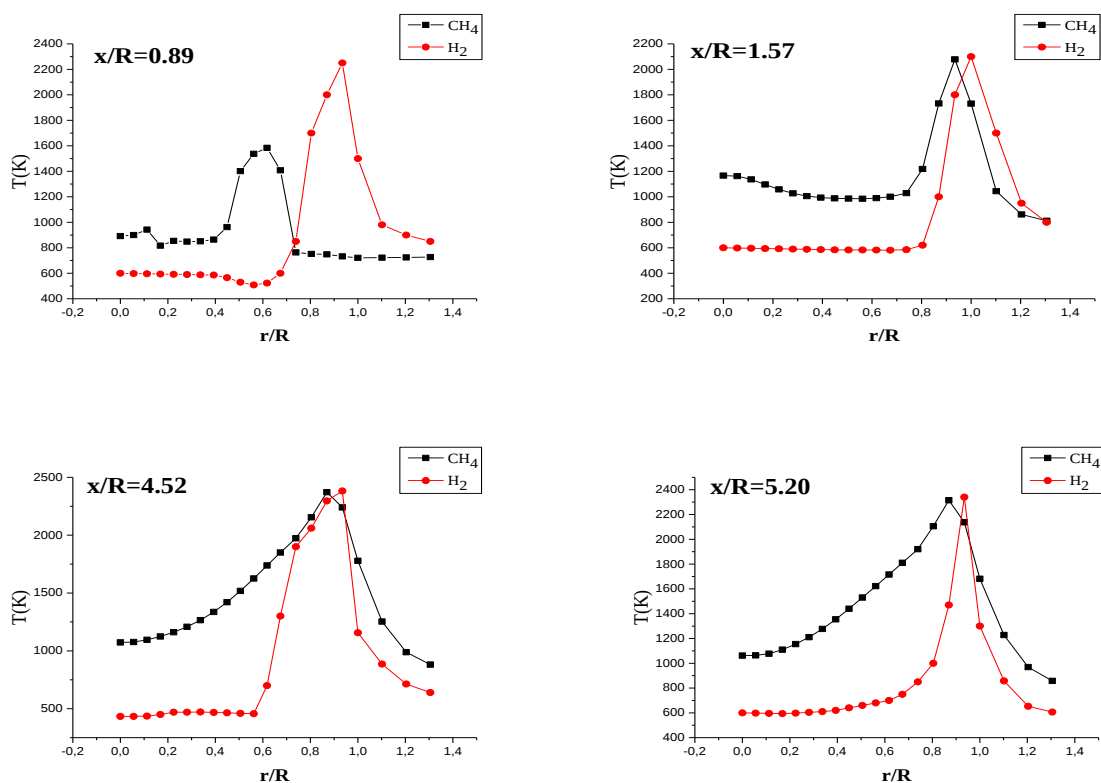


Figure.III.6: Profils des températures moyennes considérées de l'hydrogène et le méthane.

III.2.2.3 Fraction de masse de monoxyde de carbone

Les figures (III.7) montrent une comparaison entre la fraction massique du CO résultant de la combustion de CH_4 et de H_2 avec l'air. Les résultats illustrent clairement que la valeur de CO du carburant de hydrogène est une quantité beaucoup plus faible par rapport le carburant du méthane. À l'entrée de la chambre de combustion, la valeur du CO est considérable surtout dans la première station. Pour la deuxième station, $x/R=3.16$, le graphique est caractérisé par le $y_{\text{co}}=0,12$ pour CH_4 , mais $y_{\text{co}}\approx 0$ pour le H_2 . Dans le $x/R=3.84$ et $x/R=7.41$, la fraction massique du CO a la même tendance avec la station de prévisualisation. À la sortie du brûleur, les valeurs du CO produit par le CH_4 présentent la réduction d'environ 10% par rapport aux stations d'entrée. Cependant, le CO produit par la combustion de H_2 est égal à 0 dans toutes les stations de la chambre de combustion.

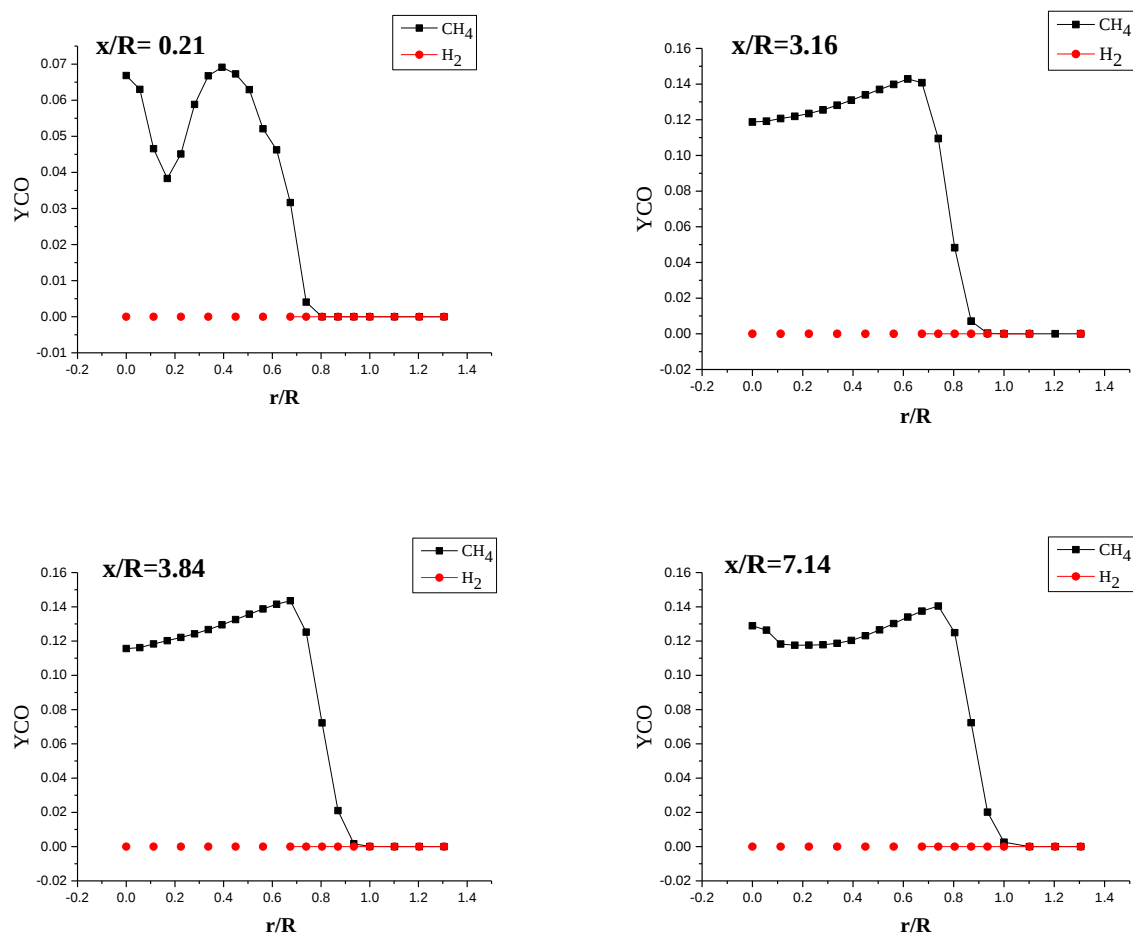


Figure.III.7: Profils des fractions massiques de monoxyde de carbone considéré de l'hydrogène et le méthane.

Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons exposé et expliqué les résultats obtenus par la simulation numérique en utilisant des outils CFD-FLUENT dans une combustion turbulente non prémélangée alimentée par des Méthane-Hydrogène/air. En outre, nous avons étudié numériquement avec le modèle LES-WALE couplé à l'approche Beta-PDF dans la chambre de combustion 3D. De plus, les résultats obtenus sont comparés aux résultats des références expérimentales. Dans l'ensemble, les résultats de la simulation sont en accord avec les données de référence expérimentales. Finalement, nous concluons avec les principaux résultats obtenus dans cette étude:

- L'émission de monoxyde de carbone est inexistante pour la combustion de l'hydrogène dans la chambre de combustion de toutes les stations, mais existe pour le méthane.
- Haute température de carburant de méthane dans différentes stations, par rapport au carburant à hydrogène.
- L'hydrogène est plus rapide que le méthane.
- Grâce à ces résultats, nous concluons que le carburant à l'hydrogène est meilleur que le méthane, qui est propre et qui ne nuise pas à l'environnement.

Conclusion générale

Cette étude est une simulation numérique de la combustion turbulente non prémélangée dans une chambre de combustion cylindrique fournie par (Méthane-Hydrogène)/Air. Nous avons validé le couplage des modèles (LES / PDF) et la prévision de la flamme de comportement de combustion de méthane-hydrogène et comparer les deux combustibles $\text{CH}_4\text{-H}_2$, considérées comme les différentes stations dans la chambre de combustion, en utilisant le FLUENT-CFD pour effectuer le calcul. Les résultats permettent de tirer les conclusions suivantes:

- ❖ Le modèle LES-WALE permet de calculer la vitesse directement dans la zone proche des parois.
- ❖ L'avantage de l'utilisation des PDF est dans l'évaluation de la moyenne des paramètres scalaires et sans le besoin de calculer les termes sources de production des espèces. En plus, ce modèle offre une réduction des équations du système, une fois la fraction de mélange et la variable d'avancement sont intégrées. Ce qui apparaît dans la minimisation du temps de calcul.
- ❖ Les résultats de calcul du modèle dynamique couplé LES-WALE et la fonction de densité de probabilité PDF donnent un accord satisfaisant avec les données expérimentales.
- ❖ La relation entre la température et le monoxyde de carbone est proportionnelle.
- ❖ La production de CO est bien prédite par le calcul actuel car le modèle de la fonction de densité de probabilité utilise plusieurs espèces pour aborder le mécanisme de réaction de la réalité.
- ❖ L'émission de monoxyde de carbone est inexistante pour la combustion de l'hydrogène dans la chambre de combustion de toutes les stations, mais existe pour le méthane.
- ❖ La vitesse du gaz d'hydrogène dans la flamme supérieur par rapport la vitesse de gaz de méthane.
- ❖ L'hydrogène est considéré comme un combustible propre comparativement au méthane.

Références

- [1] A.Mameri. *Etude numerique De la combustion turbulente du premelange pauvre methane/air enrichi a l'hydrogene*, Thèse de Doctorat, Université d'Orléans, France (2009).
- [2] M.Belacel, B.Mahmah, N.Salhi and G.Morsli, *La technologie d'un nouveau carburant: 'Mélange gaz naturel/hydrogène'*, Revue des Energies Renouvelables, SIENR'12, Ghardaïa, pp 41–47 (2012).
- [3] A. Rakib. *Valorisation du methane en hydrogene par reformage catalytique*. Thèse de Doctorat, Université du Littoral Côte d'Opale, France (2012).
- [4] S.M.Cannon, B.S.Brewster^b and L.D.Smoot^c, *PDF Modeling of lean premixed combustion using in situ tabulated chemistry*, Comb. & Flame. Vol 119 pp 223-252 (1999).
- [5] G.Yu C.K.Law and C.K.WU, *Laminar flame speeds of hydrogen addition*, Combustion & flames. Vol 63 pp 339-347 (1986).
- [6] P.Griebel, R.Schären, P.Siewert, R.Bombach, A.Inauen, and W.Kreutner, *Flow field and structure of turbulent high pressure premixed methane/air flames*, ASME GT 38398. Vol 2 pp 301-310 (2003).
- [7] G.S.Jackson, R.Sai, J.M.Plaia, C.M.Boggs and K.T.Kiger, *Influence of H₂ on the response of lean premixed CH₄ flames to high strained flows*, Combustion & Flame. Vol 132 pp 503-511 (2003).
- [8] K.Zhao, D.Cui, T.Xu, Q.Zhou, S.Hui and H.Hu, *Effects of hydrogen addition on methane combustion*. Fuel processing technology. Vol 89 pp 1142 -1147 (2008).
- [9] F.Tabet, B.Sarhb and I.Gokalp. *Hydrogen–hydrocarbon turbulent non-premixed flame structure*, International journal of hydrogen energy. vol.34 pp.5040–5047 (2009).
- [10] L.Ziani, A.Chaker, K.Chetehouna, A.Malek and B.Mahmah. *Numerical Simulations of Nonpremixed Turbulent Combustion of CH₄-H₂ Mixtures Using the PDF Approach*, International journal of hydrogen energy. Vol 38 pp 8597-8603 (2013).
- [11] S.Bougrine, S.Richard ,A.Nicolle and D.Veynante. *Numerical study of laminar flame properties of diluted methane-hydrogen-air flames at high pressure and temperature using*

detailed chemistry. International journal of hydrogen energy. Vol 36 pp 12035-12047 (2011).

[12] G.B.Chen , Y.H.Li, T.S.Cheng, H.W.Hsu and Y.C.Chao .*Effects of hydrogen peroxide on combustion enhancement of premixed methane/air flames*. International journal of hydrogen energy. Vol 36 pp 15414-15423 (2011).

[13] D.Hotza and J.C.Diniz da Costa, *Fuel cells development and hydrogen production from renewable resources in Brazil*. International Journal of Hydrogen Energy. Vol 33 pp 4915-4935 (2008).

[14] P.Stevens. F.Novel Cattin, A.Hammou, C.Lamy and M.Cassir, *Piles à combustible*. Techniques de L'ingénieur. Vol 5 n°D3340 pp 1- 28 (2000).

[15] R.Kothari, D.Buddhi and R.L.Sawhney, *Comparison of environmental and economic aspects of various hydrogen production methods*. Renewable and Sustainable Energy Reviews. Vol 12 pp 553-563 (2008).

[16] K.Aasberg-Petersen, I.Dybkjær, C.V.Ovesen, N.C.Schjødt, J.Sehested and S.G.Thomsen. *Natural gas to synthesis gas -Catalysts and catalytic processes*. Journal of Natural Gas Science and Engineering. Vol 3 pp 423-459 (2011).

[17] G.M.Côme, I.Vedrenne, J.Saint-Just and A.Ben Hadid. *Methane coupling into acetylene in a two stage burner*. Catalysis Today. Vol 6 pp 381-390 (1990).

[18] J.Poulleau. *Caractérisation des biogaz Bibliographie Mesures sur sites*. Institut National de l'Environnement Industriel et des Risques, INERIS, (2002).

[19] R.P.J.M.Raven and K.H.Gregersen. *Biogas plants in Denmark: successes and setbacks*. Renewable and Sustainable Energy Reviews. Vol 11 pp 116–132 (2007).

[20] J.V.Herle, Y.Membrez and O.Bucheli, *Biogas as a fuel source for SOFC co-generators*. Journal of Power Sources. Vol 127 pp 300–312 (2004).

[21] R.Gautam, S.Baral and S.Herat. *Biogas as a Sustainable Energy Source in Nepal: Present Status and Future Challenges*. Renewable and Sustainable Energy Reviews. Vol 13 pp 248–252 (2009).

- [22] H.Katuwal and A.K.Bohara. *Biogas: A promising renewable technology and its impact on rural households in Nepal*. Renewable and Sustainable Energy Reviews. Vol 13 pp 2668–2674 (2009).
- [23] P.Coзма, W.Wukovits, I.Mamaliga and M.Gavrilescu. *Modeling and simulation of high pressure water scrubbing technology applied for biogas upgrading*. Eurob server (2008).
- [24] S.Rasi, A.Veijanen and J.Rintala. *Trace compounds of biogas from different biogas production plants*. Energy. Vol 32 pp 1375-1380 (2007).
- [25] A.Wellinger and A.Petersson. *Biogas upgrading technologies–developments and innovations, Biogas production and utilisation*, IEA Bioenergy, Nova energy GmbH, (2005).
- [26] J.Xuan, M.K.H. Leung, D.Y.C.Leung and M.Ni. *A review of biomass-derived fuel processors for fuel cell systems*. Renewable and sustainable energy reviews.Vol 13 pp 1301-1313 (2009).
- [27] J.Xu, W.Zhou, Z.Li, J.Wang and J.Ma. *Biogas reforming for hydrogen production over a Ni–Co bimetallic catalyst: Effect of operating conditions*. International Journal of Hydrogen Energy. Vol 35 pp 13013-13020 (2010).
- [28] B.Meriem, *Etude du Procédé de production d'Hydrogène par Vaporeformage et par Vaporeformage Autotherme du Bio-Methanol*. Memoire de Magister, Université Ferhat Abbas-Sétif-1- (2014).
- [29] Y.Bo, Z.Wenqiang, X.Jingming and C.Jing. *Status and research of highly efficient hydrogen production through high temperature steam electrolysis at INET*. International Journal of Hydrogen Energy. Vol 35 pp 2829–2835 (2010).
- [30] R.Rivera-Tinoco, C.Mansilla, C.Bouallou and F.Werkoff. *On the Possibilities of Producing Hydrogen by High Temperature Electrolysis of Water Steam Supplied from Biomass or Waste Incineration Units*. International Journal of Green Energy. Vol 5 pp 388-404 (2008).
- [31] F. Basile, G. Fornasari, F. Trifiro and A. Vaccari. *Partial oxidation of methane: Effect of reaction parameters and catalyst composition on the thermal profile and heat distribution*. Catalysis Today. Vol 64 pp 21-30 (2001).

- [32] M. Levent, D.J. Gunn and M. Ali El-Bousiffi. *Production of hydrogen-rich gases from steam reforming of methane in an automatic catalytic microreactor*. International Journal of Hydrogen Energy. Vol 28 pp 945-959 (2003).
- [33] L.Chen, Q.Hong, J.Lin and F.M.Dautzenber. *Hydrogen production by coupled catalytic partial oxidation and steam methane reforming at elevated pressure and temperature*. Journal of Power Sources. Vol 164 pp 803-808 (2007).
- [34] A.Iulianelli, G.Manzolini, M.De Falco, S.Campanari, T.Longo, S.Liguori and A.Basile. *H₂ production by low pressure methane steam reforming in a Pd–Ag membrane reactor over a Ni-based catalyst: Experimental and modeling*. International Journal of Hydrogen Energy. Vol 35 pp 11514-11524 (2010).
- [35] B.Boumeddane. *Investigations numériques de l'auto inflammation des mélanges méthane/air en mode HCCI*, Laboratoire moteurs à combustion interne. Université Saad Dahleb, Algerie (2009).
- [36] <https://fr.wikipedia.org/wiki/M%C3%A9thane>, 10 mai 2017 à 13:44.
- [37] B.Nour-eddine, *Modeles chimiques pour la combustion supersonique de l'hydrogène et du mélange Méthane-Hydrogène dans l'air*, Laboratoire De Thermique. Centre de développement des énergies renouvelables, Alger (2007).
- [38] O. Mohammed, *Production de l'hydrogène à partir des energies renouvelables*. Memoire de magister. Université Abou Bekr Belkaid, Tlemcen (2009).
- [39] T. Poinso and D. Veynante. *Theoretical and Numerical Combustion*. R.T.E dwards,(2001).
- [40] D. Veynante and L. Vervisch. *Turbulent combustion modeling*. Prog. Energy Comb. Sci. Vol 28, pp 193 – 266 (2002).
- [41] N. Peters, *Turbulent combustion*. Cambridge University Press, (2001).
- [42] T. Poinso and D.Veynante. *Theoretical and Numerical Combustion*. R.T. Edwards, 2nd edition, (2005).
- [43] P,Moin and K,Mahesh. *Dns: A tool in turbulence research*. Ann. Rev. Fluid Mech. Vol 30,pp 539–578 (1998).

- [44] T.Poinsot, A.Trouvé and S.Candel. *Applications of direct numerical simulations of premixed turbulent combustion*. Prog. Energy Comb. Sci. Vol 21: pp 531-576 (1996).
- [45] W.T.Ashurst, N.Peters and M.D.Smooke. *Numerical simulation of turbulent flame structure with non-unity lewis number*. Combust. Sci. Tech. Vol 53, pp 339–375 (1987).
- [46] J.H.Chen, T.Echekki and W.Kollman. *The mechanism of two-dimensional pocket formation in lean premixed methane air flames with implications for turbulent combustion*. Combust. Flame Vol 116, 1/2, pp 15–48 (1999).
- [47] T.Echekki, and J.H.Chen. *Unsteady strain rate and curvature effects in turbulent premixed methane-air flames*. Combust. Flame Vol 106, pp 184–202 (1996).
- [48] C.J.Rutland and A.Trouvé. *Premixed flame simulations for non-unity Lewis numbers*. In Proc. of the Summer Program. Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ. pp 299–309 (1990).
- [49] M.Lesieur and O.Métais. *New trends in large-eddy simulations of turbulence*. Ann. Rev. Fluid Mech. Vol 28, pp 45–82 (1996).
- [50] P.Sagaut. *Introduction à la simulation des grandes échelles, mathématiques & applications* ed. Springer, (1998).
- [51] G.Boudier, T.Poinsot, D.Bissières, and C.Bérat. *Comparison of LES, RANS and experiments in an aeronautical gas turbine combustion chamber*. Proc. Combust. Inst. Vol 31, pp 3075–3082 (2007).
- [52] L.Selle, G.Lartigue, T.Poinsot, R.Koch, W.Krebs, B.Prade, K.-U.Schildmacher, P.Kaufmann and D.Veynante. *Compressible large-eddy simulation of turbulent combustion in complex geometry on unstructured meshes*. Combust. Flame vol 137,4, pp 489–505 (2004).
- [53] L.Selle, L.Benoit, T. Poinsot, F.Nicoud, and W.Krebs. *Joint use of compressible large-eddy simulation and helmoltz solvers for the analysis of rotating modes in an industrial swirled burner*. Combust. Flame Vol 145, 1-2, pp 194–205 (2006).
- [54] L. Selle, F. Nicoud and T. Poinsot. *The actual impedance of non-reflecting boundary conditions : implications for the computation of resonators*. AIAA Journal Vol 42,5, pp 958–964 (2004).

- [55] K. Truffin and T. Poinso. *Comparison and extension of methods for acoustic identification of burners*. Combust. Flame Vol 142, 4, pp 388–400 (2005).
- [56] M. Lesieur, O. Metais and P. Comte, *Large-Eddy Simulations of Turbulence*. Cambridge University Press, (2005).
- [57] L. Selle, *Simulation aux grandes échelles des interactions flamme/acoustique dans un écoulement vrille*, Thèse de doctorat. Université de Toulouse. France (2004).
- [58] G. Albouze, *Simulation aux grandes échelles des écoulements réactifs non-prémélangée*, Thèse de doctorat, Université de Toulouse, France (2009).
- [59] J.Cousteux, *Turbulence et couche limite*. CEPADUES- Toulouse, France, (1989).
- [60] L. Selle, G. Lartigue, T. Poinso, P. Kaufmann, W. Krebs and D. Veynante, *Large-eddy simulation of turbulent combustion for gas turbines with reduced chemistry*, Proceedings of the Summer Program (2002).
- [61] D.M. Razafindralandy. *Contribution à l'étude mathématique et numérique de la simulation des grandes échelles*. Thèse de doctorat. Université de La Rochelle. France (2005).
- [62] C.D.Pierce, *Progress-variable approach for large-eddy simulation of turbulent combustion*. Thèse de doctorat. Université de Stanford, USA (2001).
- [63] S.C.Ko and H.J.Sung, *Large-scale turbulent vortical structures inside a sudden expansion cylinder chamber*, Flow Turbulence and Combustion. Vol 68pp 269–287 (2002).
- [64] L.Duchamp and H.Pitsch, *Progress in large-eddy simulation of premixed and partially-premixed turbulent combustion*, Annual Research Briefs (2001).
- [65] J.Shinjo, S.Matsuyama, Y.Mizobuchi and S.Ogawa. *Study on flame dynamics with secondary fuel injection control by large eddy simulation*. Combustion and Flame. Vol 150pp 277–291 (2007).
- [66] C.D.Pierce and P.Moin, *Progress-variable approach for large-eddy simulation of non-premixed turbulent combustion*, Journal of Fluid Mechanics, Vol 504 pp73-97 (2004).
- [67] F.Bouras, *Étude de la combustion turbulente via des fonctions de densité de probabilité*, Doctorat de l'Université d'HL-Batna Algérie (2011).

- [68] L.X.Zhou, L.Y.Hua and F.Wanga. *Large-eddy simulation of turbulent combustion using different combustion models*. Fuel Vol 87 pp 3123–3131 (2008).
- [69] S.A.Ferraris and J.X.Wen, *Large eddy simulation of a lifted turbulent jet flame*. Combustion and Flame, Vol 150 (2007) pp 320–339 (2007).
- [70] R.Hilbert, F.Tap, H.El-Rabi and D.Thévenin, *Impact of detailed chemistry and transport models on turbulent combustion simulations*, Progress in Energy and Combustion Science, Vol 30 pp 61–117 (2004).
- [71] L.Wang, *Detailed chemistry, soot, and radiation calculations in turbulent reacting flows*. Thèse de doctorat. Université de Pennsylvania, USA (2004).
- [72] D.Pavé. *Contribution à l'étude de la structure des flammes turbulentes de prémélanges pauvres de méthane/air*. Thèse de doctorat. Université de ORLEANS. France (2002).
- [73] P.D.Nguyen and P. Bruel. *Turbulent reacting flow in a dump combustor : experimental determination of the influence of an inlet equivalence ratio difference on the contribution of the coherent and stochastic motions to the velocity field dynamics*. AIAA - 41st Aerospace Sciences Meeting and Exhibit, Reno, USA.06 - 09 Janvier (2003).
- [74] C.Matignon. *Etude de la détonation de deux mélanges stoechiométriques ($\text{CH}_4/\text{H}_2/\text{O}_2/\text{N}_2$ et $\text{CH}_4/\text{C}_2\text{H}_6/\text{O}_2/\text{N}_2$) Influence de la proportion relative des deux combustibles et de la température initiale élevée*. Thèse de doctorat. Université de POITIERS. France (2000).
- [75] H.Pitsch and S.Fedotov. *Investigation of scalar dissipation rate fluctuations in Non-premixed turbulent combustion using a stochastic approach*. UK (2000).
- [76] D.D.Rankin. *LEAN Combustion- Technology and control*. Elsevier (2008).
- [77] P.E.Desjardin, and S.H.Frankel, *Two-Dimensional Large Eddy Simulation of Soot Formation in the Near-Field of a Strongly Radiating Non-premixed Acetylene–Air Turbulent Jet Flame*, Combustion and Flame, Vol 119, pp 121–132, (1999).
- [78] Klimenko, A.Y.Matching. *conditional moments in PDF modelling of Non-premixed combustion*. Combustion and Flame. Vol 143 pp 369–385 (2005).
- [79] J.Janicka and A.Sadiki. *Large eddy simulation of turbulent combustion systems*. Proceedings of the Combustion Institute. Vol 30 pp 537–547 (2005).

- [80] R.R.Cao and S.B.Pope, *The influence of chemical mechanisms on PDF calculations of non-premixed piloted jet flames*. Combustion and Flame. Vol 143 pp 450–470 (2005).
- [81] S.James, J.Zhu and M.S.Anand. *Large eddy simulations of turbulent flames using the filtered density function model*, Proceedings of the Combustion Institute Vol 31 pp 1737–1745 (2007).
- [82] P.Wang and X.S.Bai. *Large eddy simulation of turbulent premixed flames using level-set G-equation*. Proceedings of the Combustion Institute. Vol 30 pp 583-591 (2005).
- [83] G.M.Goldin, and S.Menon. *Scalar PDF Construction Model for Turbulent Non-Premixed Combustion*. Combustion Science and Technology. Vol 125 pp 47-72 (1997).
- [84] H.Xue, J.C.Ho and Y.M.Cheng, *Comparison of different combustion models in enclosure fire simulation*. Singapore, (2000).
- [85] C.M.Cha. *Transported PDF modeling of turbulent Non-premixed combustion*. Annual Research Briefs (2001).
- [86] C.Stone and S.Menon. *LES of Partially-Premixed Unsteady Combustion*. 41st AIAA Aerospace Sciences Meeting, Reno, Nevada, USA. January 6 – 9 (2003).
- [87] F.Bouras, M.H.Attia et F.Khalidi. *Improvements of the Combustion Characteristics by the Hydrogen Enrichment*, CEIT 2015 Conference Publications, Algeria (2015).
- [88] E.Hu, Z.Huang J.He, and H.Miao, *Experimental and numerical study on lean premixed methane–hydrogen–air flames at elevated pressures and temperatures*, International journal of hydrogen energy, Vol 34 pp 6951-6960 (2009).
- [89] F.Bouras, A.Soudani, and M, Si Ameur , *Beta-pdf approach for large-eddy simulation of non-premixed turbulent combustion*, International Review of Mechanical Engineering, Vol 4, pp 358-363 (2010).
- [90] F.Bouras, A.Soudani, and M, Si Ameur, *Large Eddy Simulation for Lean Premixed Combustion*, The Canadian journal of chemical engineering, pp 231–237 (2013).
- [91] F.Bouras, F.Khalidi, *Computational modeling of thermodynamic irreversibilities in turbulent non-premixed combustion*, Heat and Mass Transfer Vol 51 pp 751-900 (2015).

Titre du mémoire : SIMULATION NUMÉRIQUE DE LA COMBUSTION NON PRÉMÉLANGÉE MÉTHANE-HYDROGÈNE DANS L'AIR: APPLICATION DANS UNE CHAMBRE DE COMBUSTION CYLINDRIQUE.

Master : Energétique et énergie renouvelable

Auteur : AYA Bilal et MESSALEM Chaouki

Mots-clés: Combustion Turbulente non Prémélangée, Les Modèles LES et PDF, Hydrogène, Méthane, Simulation Numérique CFD.

Résumé

Dans cette mémoire, est présenté les résultats numériques à l'étude d'une flamme turbulente de (méthane ou hydrogène)/air générée par un brûleur cylindrique. Les simulations numériques sont réalisées à l'aide du code de calcul CFD "FLUENT" comme solveur et "Gambit" pour le maillage. La méthode des volumes finis a été utilisée pour résoudre les équations de Navier-Stokes régissant l'écoulement. Le couplage des modèles LES/PDF est utilisé pour modéliser l'interaction turbulence/chimie dans les équations de transport du système. Les résultats des calculs sont exprimés et analysés en termes de vitesse, de température et la fraction massique de monoxyde de carbone. Les résultats sont comparés et validés avec des données expérimentales. En outre, les mêmes paramètres considérés précédemment sont utilisés dans l'étude de comportement de la combustion des carburants CH_4/H_2 . L'hydrogène est considéré comme un combustible propre sans émission du monoxyde de carbone dans les produits de la combustion, comparativement au méthane. En plus, La vitesse du gaz d'hydrogène dans la flamme supérieur par rapport la vitesse de gaz de méthane.

Report title: NUMERICAL SIMULATION OF NON-PREMIXED COMBUSTION METHANE-HYDROGEN IN THE AIR: APPLICATION IN A CYLINDRICAL COMBUSTION CHAMBER.

Key words: LES and PDF Models, Non-premixed combustion, Hydrogen-Methane, Numerical simulation CFD.

Abstract:

In this memory, is presented the numerical results to the study of a turbulent flame of (methane or hydrogen) /air generated by a cylindrical burner. The numerical simulations are carried out using the computation code CFD "FLUENT" as solver and "Gambit" for the mesh. The finite volume method was used to solve the Navier-Stokes equations governing the flow. The coupling of the LES / PDF models is used to model the turbulence / chemistry interaction in the transport equations of the system. The results of the calculations are expressed and analysed in terms of speed, temperature, mass fraction of the carbon monoxide. The results are compared and validated with experimental data. In addition, the same parameters considered above are used in the study of the combustion behaviour of CH_4/H_2 fuels. Hydrogen is considered clean fuel with no carbon monoxide emissions in combustion products, compared to methane. In addition, the velocity of the hydrogen gas in the upper flame with respect to the methane gas velocity.

عنوان المذكرة: محاكاة عددية لدراسة الانتشار المضطرب للهب داخل غرفة احتراق اسطوانية تتغذى بـ (الميثان أو الهيدروجين) / الهواء

كلمات مفتاحية: نموذجي LES و PDF، الاحتراق غير الممزوج، ميثان-هيدروجين، محاكاة عددية CFD.

ملخص:

في هذه المذكرة، قمنا بتقديم النتائج العددية لدراسة الانتشار المضطرب للهب داخل غرفة احتراق اسطوانية تتغذى بـ (الميثان أو الهيدروجين) / الهواء. قمنا بدراسة عددية باستخدام برنامج FLUENT-CFD و "Gambit" من أجل رسم الشبكة. كما استخدمنا طريقة الحجوم المحددة لحل معادلات نافير-ستوكس لجريان الوقود. يتم استخدام نموذجي LES / PDF لرفع مشكلة التفاعل اضطراب / كيمياء الموجودة في معادلات النقل للنظام. حيث تم اختيار المقادير التالية: حقل السرعة و درجة الحرارة، الكسر الكتلي لأول أكسيد الكربون، بغرض مقارنتهم مع المعطيات التجريبية. وبالإضافة إلى ذلك، نفس الوسائط المعتبرة سابقا قد تم استخدامها في دراسة سلوك احتراق CH_4/H_2 . ويعتبر الهيدروجين وقود نظيف من دون انبعاث غاز أول أكسيد الكربون في نواتج الاحتراق بالمقارنة مع غاز الميثان. وبالإضافة إلى ذلك سرعة غاز الهيدروجين في التفاعل عالية مقارنة بسرعة غاز الميثان.