

N° D'ordre : 08/2010-M/PHY

République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique
Université des Sciences et de la Technologie Houari Boumediene
Faculté de Physique



MEMOIRE

Présenté pour l'obtention du diplôme de

MAGISTER

EN : PHYSIQUE

Spécialité : Energétique et mécanique des fluides

Par :

HAMMOUD Abderrahim

Sujet :

**ETUDE NUMERIQUE D'UNE FLAMME
LAMINAIRE PREMELANGEE EN ZONE
D'ARRET**

Soutenu publiquement, le 26-01-2010, devant le jury composé de :

Mr. M.BOUHADEF	Professeur	USTHB	Président
Mr. F.SOUIDI	Professeur	USTHB	Directeur de mémoire
Mr. A. AFIR	Professeur	USTHB	Examineur
Mm. A.MATAOUI	Professeur	USTHB	Examinatrice
Mm C. RABIA	Professeur	USTHB	Examinatrice

SOMMAIRE

Résumé	i
Dédicace	ii
Remerciements	iii
Liste des tableaux et des figures	iv
Nomenclature	v
Introduction	2
I. HISTORIQUE ET ETUDE BIBLIOGRAPHIQUE	8
1. Historique	8
2. Etude Bibliographique	12
II. FORMULATION MATHEMATIQUE	19
1. Introduction	19
2. Hypothèses simplificatrices	20
3. Les équations gouvernantes du système	20
4. Principe de similitude	21
5. La forme adimensionnelle des équations du système	21
6. Le mécanisme de réaction et le terme source de masse Ω_i	23
7. Les propriétés de transport thermodynamique, et les taux de réactions	26
8. Méthode de résolution	29
8.1. Résolution numérique du système d'équations différentielles par la méthode des différences finies	29
8.1.1 Discrétisation de l'équation différentielle	30
8.2. Prise en compte des conditions aux limites	32
8.2.1. Conditions aux limites de type Dirichlet	32
8.2.2. Conditions aux limites de type Neumann	32
8.2.3. Conditions aux limites mixtes	32
8.3. Construction de la matrice coefficients L	33
9. Conditions du calcul	33

III. RESULTATS ET DISCUSSION	36
1. L'effet de la température d'entrée du mélange	36
1.1. Profils de vitesses et de températures	36
1.2. Profils de fractions massiques des éléments	38
2. L'effet du temps cinématique	41
3. L'effet du nombre de Biot	46
4. L'effet de fraction massique du mélange d'entrée	49
CONCLUSION ET PERSPECTIVES	52
ANNEXE	55
1. Annexe A	55
2. Annexe B	59
BIBLIOGRAPHIE	61

RESUME

Un système combustible pré-mélangé CO/O₂/H₂O en écoulement laminaire à symétrie axiale tombe sur une plaque plane. Il est étudié à travers la résolution numérique des équations de couche limite qui le gouvernent et qui découlent des lois classiques de conservation de masse, d'impulsion, d'énergie, et de matière. La combustion du mélange est analysée à travers une cinétique chimique détaillée reposant sur une trentaine de réactions chimiques faisant intervenir neuf éléments qui sont : CO, O, CO₂, O₂, H₂O, H, H₂, HO₂ et OH.

Les résultats portent sur l'oxydation du monoxyde de carbone dans l'air humide et incluent les profils de vitesse, de température, de concentrations des éléments chimiques pour différentes valeurs des paramètres régissant le problème. Les principales conclusions auxquelles nous sommes parvenus sont :

- La température d'entrée du mélange affecte le point d'allumage. Le mélange s'enflamme d'autant plus rapidement que la température d'entrée est élevée.
- La caractéristique de temps dynamique de l'écoulement à un rôle crucial dans l'allumage et l'extinction de la flamme.
- Il a été également observé que le nombre de Biot a une grande influence sur le comportement de la flamme dans la région d'arrêt.
- Les fractions massiques du mélange à l'entrée jouent un rôle important sur le comportement de l'écoulement du mélange dans cette configuration.

This work is dedicated to all my friends and family ... those who have come and gone those who have always been there, and those whom I've yet to meet.

ACKNOWLEDGEMENTS

The work presented here is the culmination of countless research hours, abstract ideas, small successes, and equally-important failures. In the end, none of it would have been possible without the support and dedication of everyone involved. To all of you, I am greatly indebted.

I can't find words to thank my research advisor, Mr. Souidi ferhat for providing everything I needed to carry out this work. I am especially grateful for his good advice, and because he cares about my education and always pushes me to a better understand. I would also like to thank him for the opportunity I was given to work on a challenging multidisciplinary project, which prepared me very well for my next step in research. I appreciate the freedom that I was given during the course of the research, it allowed me to explore and learn more than I otherwise might have.

I would like to thank the members of my advisory committee, Pr M. BOUHADAF, Pr A. MATAOUI, Pr C.RABIA and Pr A.AFIR for accepting to review my work and expressing a genuine interest in my work.

I would like to thank my entire colleague, for making my time in the theoretical and applied fluid Mechanics Laboratory more enjoyable. I extend sincere gratitude and best wishes to all of my friends and colleagues in the faculty of physics. Special thanks for Chahra, mina, Rédha, and especially Fouzia for helping me to translate this document for all of you I'm greatly indebted. I would like to thank also my best friends Abdou, Redouane, Nardjess, Assia, Naima.

Two people I cannot thank enough are the most important person in my life my parents. Their enduring support and unremitting confidence in my many endeavors are the primary reason that I've made it this far. For years they attempted to instill in me that success in life is not what you make for yourself, but what you make of yourself. Thank you dad for working so hard so that you could give me everything I ever wanted. Thank you mom for all your love especially all of your prayers.

Last, but certainly not least, I want to thank all my family especially my two sweet angels Hani and Fouad.

Liste des tables et des figures

Liste des tables :

Tableau 1. Constants de taux de réactions.

Liste des figures:

Figure. 2: profils de vitesse et de température du jet de flamme tombant sur la surface plan.

Figure. 3: les profils de concentration de (CO et O₂) à Te = 300 K et 600 K.

Figure. 4: profils de concentration de H₂O à Te = 300 K et 600 K.

Figure. 5: les profils des concentrations de (OH, H, H₂, and HO₂) à Te =300 K et 600 K.

Figure. 6: les profils de concentration de CO₂ et O à Te = 300 K et 600 K.

Figure. 7: profils de vitesse et de température pour différents temps cinématiques de l'écoulement.

Figure. 8: profils de H₂O et OH pour différents temps cinématiques et sous les mêmes conditions de calcul.

Figure. 9: les profils de CO et O₂ pour différents temps cinématiques et sous les mêmes conditions de calcul.

Figure. 10: les profils de CO₂ et O pour différents temps cinématique et sous les mêmes conditions de calcul.

Figure. 11: profils de température pour différents nombres Biot.

Figure. 12: les profils de CO, O₂, CO₂ et O pour différents nombres de Biot.

Figure. 13: profil des concentrations de H₂O et OH pour différent nombre de Biot.

Figure.14 : Profils de vitesse et de température de mélange (CO : 47.5%, O₂ :37% et H₂O :3.5%) pour deux nombre de Biot différents et un temps cinématique de 1/5000 sec.

Nomenclature

NOMENCLAUTURE

a^{-1}	Le temps caractéristique de l'écoulement du jet ou temps cinématique
B	Le facteur de Fréquence de taux de réaction
C	La fonction de la fraction massique donnée par l'équation 5l
C_p	Chaleur spécifique de l'air
c	Constante
D	diffusivité
$D_{l,s}$	Un groupe adimensionnel donné par l'équation 5j
d	L'épaisseur du jet
E	L'énergie d'activation de la réaction s
F	Une fonction de la température adimensionnelle définie par l'équation 5k
f	La fonction du courant réduite
h	Coefficient de transfert de chaleur convective
h_0	L'enthalpie de formation de l'élément l
K	Coefficient du taux de réaction de la réaction s
k	Conductivité thermique
m	Nombre des éléments chimiques
N	Nombre de réactions chimiques
p	La pression
R	Constante universelle des gaz parfaits pour l'air
S	La variable espace de la transformation de similarité
T	Température
U_e	La composante de vitesse de jet dans la direction x
u	La vitesse adimensionnelle de jet dans la direction x
V_e	La composante de la vitesse de jet dans la direction y
v	La vitesse adimensionnelle de jet dans la direction y
W	La masse molaire de l'élément l
x	La coordonnée dans la direction radiale
Y	La coordonnée normale à la surface solide de la plaque
Y_l	Fraction massique de l'élément l

Symboles Grec

α_s	Exposant de Température
β	Un paramètre donné par l'équation 2f
δ	La température adimensionnelle du fluide externe
η	La coordonnée de similitude adimensionnelle normale
θ	La température adimensionnelle
μ	La viscosité
ρ	La densité
ν, ν'	Les coefficients stœchiométriques
Ω	Le taux de formation massique adimensionnel
Ψ	La fonction de courant
ω_l	Le taux de production massique de l'élément l

Indices et exposants

b	Réaction inverse
e	Epaisseur de la couche limite
f	Réaction directe
l	Elément chimique
n	Exposant de température dans l'expression de taux de réaction
s	Réaction
w	Paroi
0	Valeur de référence
*	Itération précédente (pas de temps précédent)

Nombres adimensionnels

Bi	Le nombre de Biot
Le	Le nombre de Lewis
Pr	Le nombre de Prandtl, $[\mu C_p/k]$
Re	Le nombre de Reynolds
Sc	Le nombre de Schmidt, $[\mu \rho/D]$

Introduction

Introduction

Le but de notre travail est d'apporter une contribution à l'analyse et à la compréhension de la combustion des flammes pré-mélangées au niveau d'une zone d'arrêt par simulation numérique. Cette configuration est rencontrée dans plusieurs domaines et a fait l'objet de plusieurs études. En effet, l'étude des flammes laminaires permet de valider les mécanismes chimiques, de dégager les réactions prépondérantes de la combustion, de connaître la structure fine du front de flamme et de connaître pour une pression et une température de gaz frais données, les fractions massiques de toutes les espèces chimiques en jeu.

La combustion est aujourd'hui l'un des principaux moyens de conversion de l'énergie. Elle est utilisée dans de nombreux systèmes, aussi bien pour produire de la chaleur (chaudières ou fours domestiques et industriels) ou de l'électricité (centrales thermiques), que pour le transport (moteurs automobiles et aéronautiques, moteurs fusées . . .) ou encore la destruction de déchets (incinérateurs). La combustion peut être définie comme étant une (ou des) réaction (s) irréversible (s) fortement exothermique (s) entre un combustible et un comburant (ou oxydant), selon le schéma global qui suit :



Cette réaction induit un fort dégagement de chaleur dans une zone très mince (les épaisseurs de flamme sont de l'ordre de 0.1 à 1 mm) conduisant à des gradients thermiques très élevés (le rapport des températures entre réactifs et produits de combustion est couramment de 6 à 10) et à de larges variations de la masse volumique. Le taux de conversion est fortement non linéaire (loi d'Arrhenius). Les combustibles les plus divers (gazeux, liquides ou solides) peuvent être utilisés : bois, charbon, hydrocarbures méthane, butane, propane, essence, gasoil, kérosène, hydrogène, et le comburant est généralement l'oxygène de l'air, plus exceptionnellement de l'oxygène pur. Différents mécanismes de couplage interviennent en combustion. Le schéma cinétique de la réaction chimique détermine le taux de consommation du combustible, la formation de produits de combustion et la formation d'espèces polluantes. Il intervient aussi bien dans les processus d'allumage que dans ceux de stabilisation ou

d'extinction des flammes. Les transferts de masse (par diffusion moléculaire ou transport convectif des différentes espèces chimiques) sont aussi des éléments importants des processus de combustion. Le dégagement d'énergie dû à la réaction chimique induit des échanges thermiques intenses par conduction, convection ou rayonnement, tant au sein de l'écoulement qu'avec son environnement. Cette énergie thermique est ensuite soit utilisée directement, soit convertie en énergie mécanique dans des turbines à gaz ou les moteurs à piston, bien évidemment, la combustion requiert la description de l'écoulement (mécanique des fluides). Dans certains systèmes, d'autres aspects sont à considérer. Deux (combustibles ou comburants liquides) ou trois (combustibles solides, particules) phases peuvent interagir. Des phénomènes tels que la formation de sprays, la vaporisation, la combustion de gouttes, etc. doivent alors être pris en compte. La formation de suie génère des particules de carbone qui seront ensuite transportées par l'écoulement.

La combustion, intervenant généralement en milieu gazeux, quatre situations génériques, sont identifiables, selon que l'écoulement soit laminaire ou turbulent et que les réactifs soient prémélangés ou non. Dans les flammes prémélangées, les réactifs, combustible et comburant, sont mélangés avant la zone de réaction. Au contraire, dans les flammes non-prémélangées ou de diffusion, les réactifs sont introduits séparément, de part et d'autre de la flamme et sont alors essentiellement entraînés l'un vers l'autre, par diffusion moléculaire ou par convection.

Les flammes de stagnation jouent un rôle important dans le développement, la validation et l'optimisation des bancs d'essai pour les modèles de transport et des modèles de cinétiques chimiques, car elles peuvent être simulées à l'aide d'un modèle hydrodynamique unidimensionnel. Comme les techniques numériques et expérimentales avancent, une meilleure capacité à faire des comparaisons détaillées entre l'expérience et les modèles conduit à l'élaboration de modèles de plus en plus précis.

La combustion pré-mélangée est à priori plus efficace, puisque les réactifs sont déjà en contact avant la combustion. En fait, les gaz prémélangés ne réagissent pas spontanément et ne peuvent le faire que si leur température est au-dessus d'un certain seuil ; aussi, la propagation de la flamme est le résultat de la combinaison de deux phénomènes ; les gaz chauds derrière la flamme chauffent par conduction thermique moléculaire les gaz frais en amont et ces derniers, après à un certain niveau de température, réagissent et dégagent de la chaleur qui sert à chauffer les gaz en aval. Cet échauffement par conduction se fait sur une

épaisseur faible. Dans l'épaisseur de la flamme, la température monte pendant que la concentration des réactifs décroît ; cependant les réactions chimiques ne se produisent que dans une zone qu'on appelle « zone de réaction » d'une épaisseur encore plus fine. Dans la zone précédant la zone de réaction, ce sont de simples processus de diffusion qui se produisent : diffusion de la chaleur comme cité ci-dessus, mais aussi diffusion des gaz brûlés et de certaines espèces radicalaires très réactifs qui sont produits dans la zone de réaction et contribuent tout autant que la température, sinon plus dans certains cas, à la croissance du taux de conversion. Une telle flamme cependant est susceptible de se propager dans le mélange (combustible / oxydant) jusqu'à l'endroit où s'effectue le mélange. Ceci entraîne des problèmes de sécurité. En revanche, si la flamme de diffusion requiert l'apport des réactifs à la zone de réaction par diffusion moléculaire, elle ne peut en aucun cas remonter l'écoulement et est donc plus sûre. Sa réalisation pratique est aussi plus simple puisqu'elle ne nécessite pas un mélange des réactifs dans des proportions bien définies ; c'est-à-dire dans les limites d'inflammabilité du combustible.

Dans cette étude on s'intéresse à l'un des polluants les plus importants dans les phénomènes de combustion qui est le monoxyde de carbone. Le monoxyde de carbone (CO) est un gaz couramment produit par la combustion incomplète des carburants contenant des atomes de carbone. Nombreux sont ceux qui utilisent ces combustibles (charbon, essence, kérosène, gaz naturel, pétrole, propane et bois) ; par conséquent, le CO est omniprésent dans l'atmosphère. Néanmoins, sans instruments sophistiqués, nul n'est capable de le détecter, car ce gaz est irritant, inodore, incolore, et insipide. En outre, ce gaz est un danger potentiel pour la santé, parce qu'une exposition au CO peut endommager les organes du corps humain, en particulier le cerveau et le cœur. Une fois dans les poumons, les molécules de CO passent facilement dans la circulation sanguine et entrent en concurrence avec l'oxygène de l'hémoglobine (Hb) dans les hématies. Environ 95% de l'absorption du CO se lie facilement à l'hémoglobine pour former la carboxyhémoglobine (HbCO), parce que l'affinité de l'Hb pour le CO est plus de 200 fois plus élevée qu'elle ne l'est pour l'oxygène. Ainsi, le pourcentage de Hb totale dans le sang sous forme de HbCO constitue un biomarqueur d'exposition au CO. L'oxydation catalytique du monoxyde de carbone en dioxyde de carbone à température et pression ambiantes, est un processus important pour la protection des voies respiratoires. Le processus est en particulier largement adopté par les industries minières et a aussi trouvé des applications dans la plongée sous-marine, l'exploration spatiale, et les lasers à dioxyde de carbone (Burr, M, L [78]).

Ce travail se divise en trois principaux chapitres :

Le premier est consacré à l'étude bibliographique de la combustion en général. Les domaines d'application des flammes pré-mélangées dans la configuration jet-paroi et des mécanismes réactionnels. On parlera aussi de l'intérêt de la modélisation de la combustion et des difficultés dues à la complexité de ce phénomène.

Le deuxième est axé sur la modélisation et sur le traitement numérique de la flamme laminaire prémélangée ou point d'arrêt. On y trouvera une description des équations de bilan qui gouvernent l'écoulement d'un jet axisymétrique d'un mélange combustible tombant sur une paroi solide. Les équations du modèle sont des équations différentielles aux dérivées partielles non linéaires et couplées entre elles. Il y'aura aussi la transformation de similitude utilisée pour transformer le système d'équations aux dérivées partielles en un système d'équations différentielles ordinaires faciles à résoudre numériquement. Les propriétés de transport et les variables thermodynamiques, les notions de réactions chimiques, de mécanismes cinétiques, et les conditions aux limites, sont apportées dans ce chapitre. L'utilisation de l'écoulement potentiel d'un jet axisymétrique va nous permettre d'introduire un schéma cinétique plus détaillé de la combustion. Dans ce contexte, le combustible contient du monoxyde de carbone, de l'oxygène, et de la vapeur d'eau. Et le mécanisme réactionnel contient 09 espèces chimiques et 30 réactions élémentaires.

La deuxième partie de ce chapitre est consacrée à la discrétisation des équations du modèle par la méthode des différences finies et la méthode de résolution.

Le comportement de l'écoulement et du mélange combustible sous divers paramètres est abordé dans le troisième chapitre. On s'intéressera dans ce chapitre à présenter les profils des vitesse, de température et les distributions des fractions massiques des différentes espèces chimiques présentes dans la flamme. L'étude est centrée sur :

- l'influence de la température d'entrée du jet.
- L'effet du temps cinématique de l'écoulement.
- l'effet du nombre de Biot.
- l'influence des fractions massiques des différentes espèces présentes dans le mélange.

L'auto-inflammation et l'extinction du mélange seront discutées en détail.

Nous terminerons notre travail par un troisième chapitre consacré à la conclusion générale des résultats obtenus et des perspectives que nous envisageons pour nos futurs travaux de recherche.

Chapitre I

Historique et Etude
Bibliographique

Chapitre I

Historique et Etude bibliographique

1. Historique

La naissance, la croissance, l'affaiblissement et même la mort de beaucoup de civilisations peuvent être décrits en termes de leur compréhension et application culturelles spécifiques des principes de la combustion. Dans les cultures primitives et antiques, le contrôle du feu a souvent fourni à certains groupes une puissance de domination. Cette croyance mystique au sujet de la nature du feu, ou plus précisément au sujet du processus de combustion, a été changée pour toujours quand Empédocle (490-430 Avant Jésus Christ) a postulé sa croyance célèbre : « le feu est l'un des quatre éléments de base dans l'univers ; la terre, l'eau, et l'air sont les trois autres ». Cette idée a été approuvée et maintenue par tous jusqu'à la Renaissance et l'âge de lumière, quand des hommes tels que Carnot (1796-1832) et Antoine Lavoisier (1785) ont commencé leurs études. Carnot s'est mis à étudier la nature principale de la matière, de l'énergie, et la combustion. Dans sa publication « *Reflections on the Motive Power of Fire* », Carnot a postulé son célèbre cycle thermo-dynamique, qui convertirait une fraction d'énergie à partir d'une source, tel que le feu en travail. Cette publication a fourni une base théorique pour une échelle de température absolue, elle a contribué à la formulation de la thermodynamique classique, et a favorisé le développement des moteurs thermiques pratiques qui ont aidé à former la Révolution Industrielle. Entre 1775-1777, Antoine Lavoisier, un des initiateurs de la révolution chimique et inventeur de la loi de conservation de masse, était le premier à postuler que la clé de la combustion est l'oxygène. Il a formulé une nouvelle définition de la combustion, comme étant le processus de réaction chimique avec l'oxygène. Basé sur des expériences précises et quantitatives, il a mené les fondements pour sa nouvelle théorie, qui a gagné une large acceptation sur une période relativement courte.

Un énorme progrès a été réalisé par de nombreux individus et organismes pour porter

les connaissances et l'application de la science de combustion à de nouvelles limites. La chronologie des contributions les plus remarquables à la combustion dans les premiers stades de son développement est comme suit :

En 1815, Sir Humphry Davy a développé la lampe de sécurité du mineur. En 1826, Michael Faraday a donné une série de conférences et a écrit «The Chemical History of Candle ». En 1855, Robert Bunsen a développé son brûleur à gaz prémélangé et a mesuré les températures et la vitesse de flamme. François-Ernest Mallard et Emile Le Châtelier ont étudié la propagation des flammes et ont proposé la première théorie de la structure de flamme en 1883. En même temps, la première évidence de la détonation a été découverte en 1879-1881 par Marcellin Berthelot et Paul Vieille ; celle-ci a été immédiatement confirmée en 1881 par Mallard et Le Chatelier. En 1899-1905, David Chapman et Emile Jouguet ont développé la théorie de déflagration et détonation et on calculé la vitesse de détonation. En 1900, Paul Vieille fournit l'explication physique du phénomène de détonation, comme une onde de choc suivie d'une zone de réaction avec un fort dégagement de chaleur. En 1928, Nikolay Semenov a publié sa théorie de réactions en chaîne et d'allumage thermique, un prix Nobel lui a été attribué en 1956 pour son travail (ainsi que Ciril Normand Hinshelwood). La théorie de réactions en chaîne a lancé le développement de la cinétique chimique du gaz et des mécanismes de réaction. Les Travaux fondamentaux sur les explosions et les limites de l'explosion dues à des réactions en chaîne ont conduit à un grand progrès dans la théorie de la cinétique des réactions des gaz. Comprenant le rôle des radicaux libres, la nature des réactions élémentaires, et l'élucidation des mécanismes de réactions chimiques, ainsi la modélisation de la cinétique chimique sont devenus possibles.

En 1940, Yakov Zel'dovich a analysé l'instabilité de diffusion thermique d'une flamme à deux dimensions; et en 1944 il a publié son livre « Theory of Gas Combustion and Detonation ». L'influence de la turbulence sur la propagation de la flamme a été étudiée par Gerhard Damköhler en 1940 et son travail a été prolongé par Kirill Shchelkin en 1943, sur la base de considérations géométriques simples. Le développement de la science de la combustion a été considérablement influencé par Theodore Von Kármán (le fondateur de l'institut Américain des sciences aéronautiques (1933) du laboratoire de jet de propulsion (1944), et le co-fondateur de l'Institut de la combustion (1954)). en 1950, il organisa une équipe internationale pour compiler et élargir la connaissance multidisciplinaire sur la science de combustion. Depuis, le terme «aéro-thermo-chemistry» est devenu synonyme de

combustion. Cependant, une nouvelle ère dans le développement de la science de combustion commença avec la fondation de l'institut de combustion « Combustion Institute » en 1954, sur l'initiative de Bernard Lewis. L'influence de l'institut a été encore renforcée en 1957 avec la création de son journal « combustion and flame ». Le rôle de l'institut dans l'activité de la recherche a pour objectif: l'organisation de la communauté de combustion et la coopération internationale. La mission de l'institut de combustion est de favoriser la recherche dans le domaine de la science de combustion.

Ceci est fait par la présentation des résultats de recherches au colloque international sur la combustion systématiquement organisé, et par les publications. L'institut joue un rôle important en favorisant les domaines scientifiques spécialisés qui constituent la large arène de la combustion. Dès son commencement l'institut a également aidé à favoriser des activités de recherche internationales. Depuis 1967, un colloque international sur la dynamique des explosions et des systèmes réactifs (ICDERS) a été organisé en plus du colloque de combustion. ICDERS a été lancé par un groupe de scientifiques visionnaires de combustion (Numa Manson, Antoni K. Oppenheim, et rem Soloukhin). Ils ont considéré que les sujets de ces colloques sont importants pour le futur de la technologie de combustion et le control et pour la protection de l'environnement. La combustion est en grande partie (mais pas seule) un domaine scientifique axé sur les applications, créant certains outils de technologie. En ses débuts de développement, la sûreté était d'importance primaire, ainsi que la connaissance liée aux limites d'inflammabilité et des explosions. Durant les années 50, la recherche sur la combustion a été stimulée par aéropropulsion et puis par propulsion de fusée (par exemple, le travail sur les ions dans les flammes a été relié à l'absorption du rayonnement de micro-onde par le plasma faible).

Un plus grand nombre de projets de recherche a été consacré aux incendies déclarés dans les villes et les forêts au début des années 70. La crise énergétique des années 70 a encouragé la recherche sur l'épargne d'énergie et sur l'efficacité de combustion. Pendant les années 80 et les années 90, l'intérêt pour la combustion supersonique s'est développé et des études ont été entreprises sur le rôle de la combustion dans les changements climatiques. Tous ces aspects technologiques sont encore présents dans la recherche de combustion. Les nouveaux axes, tels que le développement de la génération de micropuissance, de combustion catalytique, de combustion sans flamme, de combustion de SHS, ou la synthèse des nanoparticules émergent également.

Le progrès en science de combustion est amélioré par les développements importants dans les outils scientifiques et des nouvelles méthodes d'analyses dont :

- l'introduction des équations rigoureuses de conservation pour les écoulements qui réagissent chimiquement.
- le développements des techniques informatiques permettant de résoudre les écoulement des fluides compliqués dans un environnement de combustion qui est affecté par la diffusion, et qui implique une chimie compliquée (un grand nombre de réactions élémentaires, qui ne sont pas individuellement « complexe » mais tout à fait simples, c'est à dire, la plupart d'entre elles impliquent deux éléments réactifs, parfois trois, et la formation ou la rupture de juste un seul lien).
- l'application des diagnostics de laser pour explorer les processus de réaction élémentaires et la structure des flammes.
- le développement d'énergie d'activation asymptotique pour l'analyse mathématique des phénomènes de combustion.

Durant le 28ème colloque international sur la combustion en 2000, Ivryne Glasman a démontré l'importance de la recherche dans le secteur de la science de combustion dans la société moderne. Dans son message il a fait appel à la communauté de combustion pour contribuer à la solution de vraies issues et d'être plus créatifs dans la résolution des problèmes économiques, sociaux, et écologiques.

Cet appel ne peut trouver de réponse que si on comprend profondément les processus fondamentaux qui se produisent pendant la combustion, et que cette dernière est traitée comme un phénomène qui exige une science multidisciplinaire.

2. Bibliographie

D'énormes progrès ont été faits par la communauté scientifique dans la simulation de problèmes complexes en mécanique des fluides, pour pousser la connaissance et l'application de la science de combustion à de nouvelles limites, afin de parvenir à une combustion sûre, propre et efficace en même temps. La simulation de problèmes de combustion réelle fait face, cependant, à plusieurs difficultés. En mécanique des fluides, les équations générales de conservation (masse, mouvement, énergie) et l'équation d'état suffisent pour décrire le phénomène. Dans la combustion, la chimie est l'aspect le plus difficile dans le calcul des écoulements réactifs, laminaires ou turbulents. Elle est en même temps, la partie la plus difficile parce que généralement elle introduit un grand nombre d'équations différentielles non linéaires. L'inclusion de la chimie nécessite une équation de conservation pour chaque élément chimique présent dans la flamme. Ces taux de réaction dans les termes sources sont eux-mêmes des fonctions de la composition locale, de la température, et dans certains cas, la pression. Chaque réaction chimique doit être modélisée de façon à tenir compte de ces dépendances. Un mécanisme cinétique chimique est la compilation de ces réactions individuelles, chacune avec l'expression de la constante de taux de réaction qui modélise la chimie de combustion. L'inclusion de la chimie conduit à des problèmes, compliqués, et numériquement difficiles à traiter. Un équilibre doit être fait entre, l'introduction de la chimie détaillée et l'utilisation des écoulements complexes. On peut soit utiliser la chimie détaillée avec des écoulements simples, comme les calculs des flammes laminaires unidimensionnelles, ou alors avec des écoulements complexes mais avec une chimie très simple.

La modélisation de la cinétique chimique est devenue un outil important pour l'interprétation et la compréhension des phénomènes observés en combustion. Par conséquent, de gros efforts ont été faits dans le but de développer les mécanismes cinétiques pour la combustion des carburants. Les simples descriptions de la chimie, déduites des mécanismes réactionnels détaillés, sont appelées : mécanismes cinétiques chimiques réduits. Il existe plusieurs travaux de recherche qui portent sur l'analyse asymptotique et la modélisation en chimie de combustion tels que (Dixon-Lewis [1], Gardiner [2], Kee et al [3], Peters et Rogg [4], Seshadri [5], Miller [6], Patnaik et al [7], Fristrom [8], Leung et Lindstedt [9], Zuo et Bulck [10], Yang et Pope [11], Bozzelli et Dean [12], Dupont et Williams [13], Westbrook et Dryer [14], Oran et Boris [15], et Wamatz [16]). Les premières études quantitatives des flammes qui comprenaient les théories thermiques du dix-neuvième siècle ont été développées

indépendamment par Mallard et Le Chatelier en France, Haber en Allemagne, et Mikelson en Russie (Evans [17]). La période qui a suivi a été dominée par un débat entre ceux qui croyaient que la combustion était contrôlée par conduction thermique et ceux qui ont cru qu'elle l'était par diffusion. L'école russe de Frank-Kamenetzki [18], Semenov [19], et Zeldovich [20] ont souligné que la contribution de transport pour des espèces de même poids moléculaire, et de même diamètre était de valeurs égales mais opposées, et pourrait être annulé. Cette étude a été suivie par la théorie cinétique à multi composants développée par Hirschfelder et *al.*, [21]. En outre, Spalding [22] a développé une technique non stationnaire appelée « The marching method », qui a été bien adaptée à la simulation numérique. Spalding et Stephenson [23] l'ont appliquée à la flamme de « brome hydrogène ». Elle a été suivie par un modèle de synthèse complet de la flamme de méthane par Smoot et *al.*, [24]. Vers la fin des années 60, Dixon-Lewis a commencé ses études fondamentales sur les systèmes de combustion à hydrogène, et les a prolongées aux flammes de monoxyde de carbone et de méthane.

Un mécanisme cinétique chimique peut être considéré comme adéquat seulement s'il peut décrire toutes les réponses chimiques pertinentes, en tenant compte des variations de divers paramètres. Un problème persistant de recherche sur la combustion est dû aux incertitudes que contiennent les listes des coefficients du taux de réaction constituant les modèles cinétiques. La non-linéarité des termes source chimique et les incertitudes associées aux réactions chimiques conduisent à une forte sensibilité sur les résultats numériques. Ceux-ci peuvent être propagés par le problème et entraîner une incertitude importante dans les résultats globaux (Turanyi et *al.*, 2002 [25]).

Les incertitudes sur les taux de réactions chimiques proviennent du fait que la mesure expérimentale directe de la plupart des taux de réaction soit difficile. En outre, les estimations théoriques des taux cinétiques contiennent des incertitudes liées aux hypothèses de la modélisation (Wagner, 2002) [26]. Outre les taux de cinétique chimique, d'autres paramètres du modèle, comme les propriétés thermodynamiques et les coefficients de transport, contiennent à leur tour des incertitudes (Law et *al.*, 2003 [27], Frenklach et *al.*, 2003 [28], Simmie 2003 [29]). Par exemple, les coefficients de transport (Paul & Warnatz 1998 [30]; Yang et *al.*, 2001 [31]). Aussi l'enthalpie de formation de OH (Herbon et *al.*, 2002 [32]) a-t-elle subi une révision récente. Certains auteurs ont montré que, (Simmie 2003 [29], Hughes et *al.*, 2001 [33]) des mécanismes de réaction divers ont été développés qui utilisent des

expressions de taux de réaction très différentes, mais donnent des résultats similaires. La conclusion troublante est que la chimie de l'oxydation de combustibles simples tels que le CO, CH₄, C₂H₆ n'est pas encore bien connue au niveau élémentaire.

Une étude approfondie de la performance d'un modèle de chimie de combustion doit inclure les variations importantes et indépendantes dans la pression du système, la température caractéristique, et dans les concentrations du mélange réactif (Law *et al.*, 2003). En outre, les propriétés de la flamme laminaire en fonction de la stœchiométrie et de la pression, ainsi que des propriétés du mélange combustible devraient être étudiées (Frenklach *et al.*, 2003). Dans ce document, les auteurs préconisent que «des efforts concertés expérimentaux et de modélisation doivent être mis en œuvre pour développer des mécanismes, détaillés et complets qui sont capables de décrire les divers phénomènes de combustion et de flamme." Ainsi, il est essentiel à l'avancement de nos connaissances sur la combustion d'hydrocarbures d'accroître les bases de données expérimentales disponibles sur lesquelles ces modèles peuvent être validés ou optimisés. Il devrait également être noté que les données expérimentales ne vont pas augmenter le nombre de degrés de liberté, ou les contraintes du système requis pour améliorer les performances de modèle (Franklach *et al.*, 1992 [34]).

Le coût de calcul important, associé à l'implémentation des modèles chimiques réalistes et à l'étude de la chimie dans les systèmes de réaction complexes, est contrôlé par le choix des conditions d'écoulement et de géométries simples (Warnatz 1992 [35]). Un écoulement simple est celui qui peut être décrit par une équation hydrodynamique réduite, qui permet ainsi l'inclusion de la chimie détaillée et le transport multi-composant dans les simulations. Pour réduire le coût de calcul, les flammes laminaires pré-mélangées ont été utilisées pour simuler le problème de combustion turbulente (Peters, 1986 [36]; Williams, 2000 [37], Law & Sung 2000 [38]). Ces flammes laminaires s'appuient sur la modélisation, la simulation, et l'expérience pour déterminer la réponse de la flamme à l'effet de la turbulence. L'exemple d'une telle géométrie de flamme simplifiée est la flamme laminaire prémélangée.

L'utilisation des flammes laminaires et la structure de la flamme pour déterminer les modèles de la cinétique chimique et les modèles de transport a une longue histoire, avec des progrès considérables dans le domaine en raison de ses recherches expérimentales (Fristrom & Westenberg 1965 [39]). Une géométrie d'écoulement qui a reçu une attention considérable dans la communauté de combustion est l'utilisation des écoulements au point d'arrêt d'une

plaque plane pour étudier la flamme pré-mélangée. Pour étudier les phénomènes chimiques pertinents, ces flammes doivent être capables de subir une analyse unidimensionnelle, même à travers les flammes expérimentales qui peuvent être géométriquement complexes. En outre, la flamme doit pouvoir être soumise à des diagnostics expérimentaux, afin que l'information chimique puisse être extraite (Miller *et al.*, 1990 [40]).

L'étude des flammes étendues peut également fournir des données pour les modèles des flammelettes laminaires, qui peuvent ensuite être appliquées aux écoulements compliqués de la combustion turbulente. Les flammes au point d'arrêt sont importantes dans de nombreuses applications techniques, tels que le dépôt chimique en phase vapeur (CVD), la modification des films de polymère mince, et la modification des surfaces métalliques pour créer des carbides (Kee *et al.*, 2003 [41]). Des travaux expérimentaux sur les flammes de stagnation ont utilisé la configuration de l'écoulement jet-paroi (Law *et al.*, 1981 [42], Egolfopoulos *et al.*, 1997 [43]; Vagelopoulos & Egolfopoulos 1998 [44]; Dong *et al.*, 2002 [45]), ou l'écoulement de deux jets opposés (Ishizuka *et al.* 1982 [46]; Sato 1982 [47]; Chao *et al.*, 1997 [48]). La configuration de l'écoulement jet-paroi conduit à des flammes non adiabatiques en raison de la perte de chaleur au niveau de la paroi solide, tandis que la configuration jets-opposés permet l'étude des flammes essentiellement adiabatiques en raison de la symétrie de la configuration. Les parois de stagnation froides vont introduire des pertes de chaleur à l'écoulement, et pour un degré de refroidissement suffisamment grand, et un taux de contrainte élevé, l'extinction de la flamme sera induite (Libby *et al.*, 1983 [49]). Libby et ses collaborateurs notent également que la diminution de la densité près de la paroi solide, résultant du dégagement de chaleur de la flamme, va créer donc une forme d'isolation qui réduit les gradients de température et la perte de chaleur. En effet, la perte de chaleur peut avoir tendance à rendre la flamme plane plus résistante à des instabilités cellulaires. Dans les études de flammes à jets opposés, les difficultés surviennent dans la détermination de l'emplacement du point de stagnation, ces difficultés seront extrêmes dans le cas où il y a des fluctuations ou une variation de temps dans l'impulsion de jet. Par conséquent, le point de stagnation va se déplacer dans l'espace au cours d'une expérience. En outre, le couplage des propriétés acoustiques des deux jets pourrait conduire à des oscillations et des instabilités dans les flammes. Les jets de flammes impactant sont plus stables que ceux dont la configuration de jets opposés (Egolfopoulos *et al.* 1997). Les jets de flammes impactant ont été largement étudiés en raison de leur importance dans une large gamme d'applications. Les jets axisymétriques tombant perpendiculairement sur une surface solide se rencontrent dans des

contextes variés, allant des applications à grande échelle des jets turbulents pleinement développés impactant sur le sol, comme au décollage vertical et atterrissage des avions (Bradbury [50], Rubel [51], [52]), à l'utilisation à petite échelle des jets laminaires afin de déterminer la résistance au cisaillement des tissus vasculaires dans l'étude de l'athérogenèse (Deshpande et Vaishnav [53]).

Des expériences antérieures ont été utilisées pour simuler le flux de chaleur extrêmement élevé rencontré par les véhicules de l'espace qui pénètrent dans l'atmosphère. Ces niveaux de chaleur sont causés par l'impact des vitesses d'écoulement hypersoniques qui ionise les gaz atmosphériques percutés (WH Giedt et *al.*) [54]. Des travaux ultérieures ont étudié ces flux de chaleur en utilisant la combustion de haute intensité, avec de l'oxygène pur au lieu de l'air, pour augmenter le chauffage des métaux et le taux de fusion (R. Conolly et RM Davies [55]). Les jets de flamme impactant de haute intensité ont été utilisés ces dernières années pour produire les couches de diamant synthétiques par Chemical Vapor Deposition (MA Cappelli, et P.H. Paul [56]) (Houtman et *al.*, [57], Goodwin [58]). Les flammes supersoniques de forte intensité ont été utilisées dans un processus connu sous le nom de spallation thermique. Dans ce processus, le jet impactant perce la roche causant sa fragmentation, en raison des fortes contraintes thermiques dues au flux de chaleur élevé sur une surface froide. R.M. Rauenzahn [59]. Cette méthode pourrait être plus rapide et plus économique que le forage mécanique traditionnel de la roche, et ce en fonction du type de la roche. Les flammes à haute vitesse impactant sur des éléments structurels ont été utilisées afin de simuler des incendies à grande échelle causées par la rupture de la tuyauterie dans l'industrie des procédés chimiques (JE, Hustad, M., Jacobsen [60]). Les jets d'impact de flamme de faible intensité ont été utilisés dans la recherche de sûreté pour quantifier le taux d'échauffement provoqué par les feux impactant sur les murs et les plafonds H.-Z. You [61]. Eibeck et *al.*, 1993 [62] ont étudié l'effet des impulsions de flammes impactant sur le transfert de chaleur vers une cible. Les Jets Impactants sont également utilisés dans l'étude de la flamme laminaire (Semith et *al.*, [63], Mendez-Lopez [64], Bergthorson et *al.*, [65]). Ils sont exploités en laminaire ainsi que dans des configurations de turbulence. Le rendement de transfert de chaleur est plus élevé dans les jets turbulents que dans le cas des jets laminaires (Schlichting [66]). Un cas particulier des jets est le jet de petite flamme, qui est utilisé dans l'industrie du verre et de l'acier, où la chaleur doit être appliquée localement à des fins de découpe et de fonte. Les écoulements des jets impactant ont été décrits analytiquement ou simulés numériquement en utilisant différentes formulations et techniques. Schlichting [66]

présente un modèle à symétrie axiale unidimensionnel pour un jet impactant de diamètre infini sur une surface plane. Ce modèle a été utilisé à l'origine avec les conditions d'un écoulement potentiel de couche limite (écoulement externe linéaire). Le modèle unidimensionnel a été étendu pour permettre la précision à la fois de la vitesse et du gradient de vitesse à quelque distance de la plaque d'arrêt, et de fournir un état plus réaliste et plus souple pour les conditions limites pour l'écoulement d'un jet impactant de faible diamètre de sortie (Kee et *al.*, [67], Dixon-Lewis [68]). Des calculs bidimensionnels stationnaires axisymétriques de l'écoulement de jet impactant visqueux (Deshpande et Vaishnav [69]) et non visqueux (Schach [70], Rubel, Phares et *al.*, [71]), ont également été étudiés. Li et collaborateurs [72] ont montré qu'il existait deux solutions différentes pour le champ de flux dans certaines gammes de paramètres géométriques et d'écoulement. Le transfert de chaleur à partir d'un jet inerte vers une plaque a été largement étudié dans le passé. Sibulkin [73] établit une relation semi-analytique pour un transfert de chaleur laminaire d'un écoulement impactant sur un corps en révolution. Cela a été la base pour de nombreux autres résultats expérimentaux et théoriques. Egolfopoulos et collaborateurs [74] ont étudié les effets d'un mur à températures variables sur la propagation et l'extinction des flammes laminaires pré-mélangées. Ils ont montré que la recombinaison des radicaux et l'extinction au niveau de la paroi ne dépendaient pas de la température de la paroi quand celle-ci est au-dessous de 1000 K environ. Ils ont aussi montré que l'extinction dépendait largement de la perte de chaleur à la plaque, mais que le temps caractéristique d'extinction dépendait peu de la température des parois. Des résultats similaires ont été obtenus par Law et *al.*, [75]. Le modèle unidimensionnel de stagnation des flux permet également la simulation du taux d'extinction (Giovangili & Smooke [76]). Les résultats sont comparés avec les mesures expérimentales. Davis et collaborateurs [77] ont montré que le temps caractéristique d'extinction simulé est sensible à des conditions limites en amont.

Chapitre II

Formulation Mathématique

Chapitre II

Formulation Mathématique

1. Introduction

Le modèle est un système à symétrie axiale dans lequel le jet laminaire d'un mélange combustible tombe perpendiculairement sur une plaque plane horizontale, formant la configuration classique d'un écoulement à zone d'arrêt. Le système est mathématiquement décrit par un ensemble couplé d'équations aux dérivées partielles basées sur le principe de la conservation de l'énergie, de la masse et de la quantité du mouvement. Le profil de vitesse à l'intérieur du jet loin de la plaque est connu à partir de la théorie des jets libres. La température est égale à la température ambiante hors couche limite. La chaleur de la flamme est transmise à la plaque par conduction puis au milieu ambiant par convection. Cela se traduit par une condition thermique du type mixte faisant intervenir le nombre de Biot. Notre but est de prédire la distribution des profils de vitesse et de la température de l'écoulement, ainsi que le profil de répartition des différentes espèces chimiques. On s'intéressera en particulier à l'auto inflammation (l'allumage) et à l'extinction de la flamme sous divers paramètres. La Figure.1 illustre le système considéré.

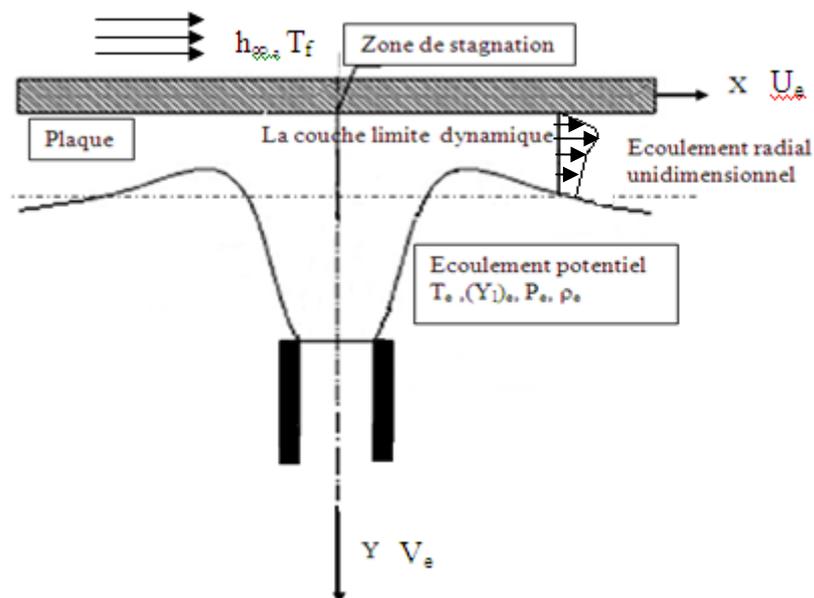


Figure.1 : Écoulement à symétrie axiale en zone d'arrêt

Afin de parvenir à un problème mathématiquement soluble, nous limiterons notre étude aux situations dans lesquelles les changements de l'état du mélange se produisent près de la surface plane. Ceci permet d'employer les équations bien connues de la couche limite où nous imposerons les conditions limites de l'écoulement potentiel suivantes:

$$U_e = aX, \quad V_e = -2aY$$

La zone d'intérêt est celle située dans la périphérie relativement éloignée du centre où l'écoulement est unidirectionnel.

U_e et V_e sont les vitesses de l'écoulement potentiel loin de la région d'arrêt dans la direction (x) et la direction (y) respectivement, et 'a' est le gradient de vitesse qui caractérise le temps cinématique.

2. Hypothèses simplificatrices

On considère les hypothèses suivantes:

- Le mélange combustible est considéré comme un gaz parfait.
- Le coefficient de chaleur spécifique C_p de tous les constituants est le même et égal à celui de l'air
- Le nombre de Prandtl ≈ 1 .
- Le nombre de Schmith = 1.
- Le nombre de Lewis = 1.
- La variation du coefficient de diffusion thermique et de viscosité dynamique avec la température est donnée par les relations suivantes $\mu = cT$ et $k = k_0 T$, où 'c' est une constante ainsi que k_0 .
- La dissipation visqueuse est négligée.

3. Les équations gouvernantes du système

Dans le cadre des hypothèses précédentes, les équations régissant le phénomène physique étudié découlent respectivement du principe de conservation de masse, d'impulsion, d'énergie et de matière. Le détail des calculs est donné dans l'annexe A.

4. Principe de similitude

Afin de convertir le système des équations différentielles aux dérivées partielles originelles qui gouvernent le système en un ensemble réduit d'équations différentielles ordinaires, nous introduisons une nouvelle transformation de similitude souple à manipuler et basée sur celle utilisée par Lees [80]. Il est possible, en effet, de faire des hypothèses intéressantes concernant la distribution de vitesse si l'on admet que les profils $u(x,y)$, à l'instar des profils sur une plaque plane (Blasius) sont très probablement similaires, vu que le problème dans sa globalité ne présente aucune dimension linéaire caractéristique (x et y tendant vers l'infini).

Introduisons les nouvelles coordonnées similaires suivantes dans le système :

$$\begin{aligned} S &= \alpha x^4 \\ \eta &= \beta \int_0^Y (\rho / \rho_e) dY \end{aligned} \quad (2f)$$

et la fonction de courant: $\psi = \sqrt{s} f(\eta)$

Ces coordonnées de transformation sont la forme modifiée de celles d'abord présentées par Lees en combinant les transformations de Levy et Mangler avec la transformation de Howarth-Dorodnitsyn.

Un calcul direct montre que β doit être égal à $\left(\frac{2\alpha\rho_e}{\mu_e}\right)^{1/2}$ dont la dimension est L^{-1} , et le paramètre " α " une constante quelconque, afin de transformer les équations gouvernantes de Navier-Stokes en des équations différentielles ordinaires (Annexe A).

5. La forme adimensionnelle des équations du système

Nous introduisons les variables adimensionnelles suivantes :

$$x = \frac{X}{L}, \quad y = \frac{Y}{H}, \quad \bar{\rho} = \frac{\rho}{\rho_e}, \quad u = \frac{U}{U_e}, \quad v = \frac{V}{V_e}, \quad \bar{\mu} = \frac{\mu}{\mu_e}, \quad h_l = \frac{h_l^0}{C_p T_e}, \quad \Omega_l = \frac{\omega_l}{a\rho}, \quad \theta = \frac{T}{T_e}$$

Et la fonction de courant ψ , pour l'écoulement compressible :

$$\bar{\rho} x^2 u = \frac{\partial \psi}{\partial x}, \quad -2\bar{\rho} v y x = -\frac{\partial \psi}{\partial x} \quad (2g)$$

L'équation de continuité (1a) est automatiquement satisfaite (voir l'annexe A).

Les équations de la couche limite adimensionnelles transformées, de la quantité de mouvement, de l'énergie, et de conservation des espèces pour l'écoulement au point d'arrêt deviennent alors:

- Conservation de la quantité de mouvement :

$$\frac{du}{d\eta^2} + f(\eta)\frac{du}{d\eta} - u^2 + \theta = 0, \quad u = \frac{U}{U_e} = \frac{1}{2}\frac{df}{d\eta} \quad (3a)$$

- Conservation de l'énergie :

$$\frac{1}{Pr}\frac{d\theta}{d\eta^2} + f(\eta)\frac{d\theta}{d\eta} - \sum_{l=1}^k h_l \Omega_l = 0 \quad (3b)$$

- Conservation des éléments chimiques $l=1 < l < 9$:

$$\frac{1}{Sc}\frac{dY_l}{d\eta^2} + f(\eta)\frac{dY_l}{d\eta} + \Omega_l = 0 \quad (3c)$$

Où: $Pr = \frac{\mu c_p}{k}$ et $Sc = \frac{\mu \rho}{D}$ sont les nombres de Prandtl et de Schmidt respectivement.

Dans ces équations, le terme $\Omega_l = \left(\frac{\omega_l}{a\rho}\right)$ est le taux adimensionnel de formation de masse du la l^{eme} élément appelé terme source de masse et $h_l = \frac{h_l^0}{c_p T_e}$ est l'enthalpie de formation adimensionnelle du l^{eme} élément chimique. A son tour, le terme $\sum_{l=1}^k h_l \Omega_l$ est appelé terme source de chaleur.

Les conditions limites (2a, 2b, ..., 2e) deviennent alors:

$$\left(\frac{df}{d\eta}\right)_{\eta=0} = u(0) = 0, \quad f(0) = 0, \quad \frac{1}{2}\left(\frac{df}{d\eta}\right)_{\eta \rightarrow \infty} = u(\infty) = 1 \quad (4f)$$

$$\left(\frac{d\theta}{d\eta}\right)_{\eta=0} = Bi(\theta_w - \delta), \quad \theta(\eta \rightarrow \infty) = 1 \quad (4g)$$

$$\left(\frac{dY_l}{d\eta}\right)_{\eta=0} = 0, \quad Y_l(\eta \rightarrow \infty) = (Y_l)_e \quad (4h)$$

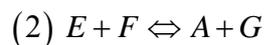
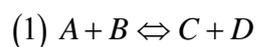
On note que quant $Bi \rightarrow 0$, $\frac{d\theta}{d\eta}(0) = 0$ la surface solide est adiabatique, et quant $Bi \rightarrow \infty$, $\theta_w \rightarrow \delta$, le fluide externe est caractérisé par une résistance thermique de convection nulle ; par conséquent la plaque épouse la température de fluide externe T_f , la condition limite au niveau de la paroi devient de type Dirichlet (température imposé au niveau de la plaque solide).

Dans La condition limite (4h), $\left(\frac{dY_l}{d\eta}\right)_{\eta=0} = 0$ signifie que la paroi solide est inerte (pas d'absorption ni de génération des espèces à la surface).

6. Le mécanisme de réaction et le terme source de masse Ω_l :

Chaque terme source chimique représente le taux de changement de la concentration de l'espèce. Contrairement aux termes présents dans l'équation de l'énergie, les différents termes sources chimiques ne sont pas calculés d'une manière directe et indépendante. Ils composent collectivement un ensemble d'équations ordinaires qui doit être résolu simultanément.

Les différentes équations ordinaires n'ont pas une forme générale car elles dépendent de l'ensemble spécifique de réactions considérées pour l'étude. Par exemple, l'élément A peut être représenté dans deux étapes de réactions réversibles comme:



Quatre contributions concourent à l'établissement terme source Ω_A : 2 productions et 2 consommations. Dans la première étape (1) de la réaction, A est consommé par B pendant la réaction directe, mais elle est également formée pendant la réaction inverse par C et D. On remarque le même phénomène dans la deuxième étape de la réaction (2).

Par convention, les taux de consommation et de formation sont opposés dans le signe. Mais leurs valeurs ne sont pas nécessairement égales. Chaque réaction dans le sens direct et dans le sens inverse a un taux de réaction chimique associé qui peut être décrit par l'expression d'Arrhenius.

Le processus chimique de l'oxydation est complexe, vu le nombre de variable qui entrent en jeu et les conditions qui sont très variées. Citons comme exemple la taille du système réactif, le nombre d'éléments et le nombre de réactions qui dépendent de la nature du carburant et de l'oxydant. Ces nombres sont particulièrement élevés lorsqu'il s'agit d'hydrocarbures.

Le modèle doit reproduire d'une manière adéquate le comportement de ce système réactif complexe. Ce modèle est basé sur un mécanisme de réaction dans lequel les réactions de produits chimiques sont représentées par les étapes élémentaires dont la forme générale est:



Où les indices 'l' et 's' sont réservés pour l'espèce 'l' dans la réaction 's' respectivement, $\nu_{l,s}$ sont les coefficients stœchiométriques.

Si N/2 est le nombre des réactions chimiques impliquées, 's' doit prendre les valeurs de 1 jusqu'à N pour comptabiliser les réactions inverses.

Soit (M_L) le nombre de moles de l'espèce L par unité de volume. Il est défini par la relation suivante :

$$M_L = \frac{\rho_l}{W_l} \quad (5b)$$

Où W_l est la masse molaire de l'espèce l.

Le taux de formation molaire de l'espèce 'l' par unité de volume du à la réaction 's' est:

$$\frac{d(M_l)}{dt} = (\nu'_{l,s} - \nu_{l,s}) \cdot K_s \prod_{l=1}^m (M_l)^{\nu_{l,s}} \quad (5c)$$

où:

$K_s = B_s T^{\alpha_s} \exp\left(-\frac{E_s^*}{RT}\right)$: est la loi d'Arrhenius de la réaction 's'.

$B_s T^{\alpha_s}$: est le facteur pré-exponentiel.

E_s^* : L'énergie d'activation, et R la constante des gaz parfaits pour l'air.

La détermination du terme source chimique pour l'espèce l n'est rien d'autre que l'application de ces taux aux concentrations respectives de l'espèce l.

Le taux de formation massique par unité de volume est :

$$\omega_{l,s} = \frac{d(M_l)}{dt} \cdot W_l \quad (5d)$$

La combinaison de l'équation (5b) avec $Y_l = \frac{\rho_l}{\rho}$ nous donne : $(M_l) = \rho \frac{Y_l}{W_l}$ d'où:

$$\prod_{l=1}^m (M_l)^{\nu_{l,s}} = \rho^{\sum_{l=1}^m \nu_{l,s}} \frac{\prod_{l=1}^m (Y_l)^{\nu_{l,s}}}{\prod_{l=1}^m (W_l)^{\nu_{l,s}}} \quad (5e)$$

En introduisant la température adimensionnelle $\theta = \frac{T}{T_e}$, l'énergie d'activation adimensionnelle devient $E_s = \frac{E_s^*}{RT_e}$. Si l'on considère la combinaison des équations (5c, 5d, 5e) avec l'expression donnée pour K_s , on obtient:

$$\omega_{l,s} = W_l (\nu'_{l,s} - \nu_{l,s}) \frac{B_s T_e^{\alpha_s}}{\prod_{l=1}^m (W_l)^{\nu_{l,s}}} \rho^{\sum_{l=1}^m \nu_{l,s}} \theta^{\alpha_s} \exp\left(-\frac{E_s}{\theta}\right) \prod_{l=1}^m (Y_l)^{\nu_{l,s}} \quad (5f)$$

Le taux de formation massique adimensionnel: $\Omega_{l,s} = \frac{\omega_{l,s}}{a\rho}$ devient alors:

$$\Omega_{l,s} = W_l (\nu'_{l,s} - \nu_{l,s}) \frac{B_s T_e^{\alpha_s} \rho^{\sum_{l=1}^m \nu_{l,s} - 1}}{a \prod_{l=1}^m (W_l)^{\nu_{l,s}}} \theta^{\alpha_s} \exp\left(-\frac{E_s}{\theta}\right) \prod_{l=1}^m (Y_l)^{\nu_{l,s}} \quad (5g)$$

En utilisant l'équation d'état $p = \rho RT$ on trouve :

$$\rho^{\sum_{L=1}^m \nu_{L,s} - 1} = \left(\frac{p}{RT_e}\right)^{\sum_{L=1}^m \nu_{L,s} - 1} \cdot \theta^{1 + \alpha_s - \sum_{L=1}^m \nu_{L,s}} \exp\left(-\frac{E_s}{\theta}\right) \cdot \prod_{L=1}^m (Y_L)^{\nu_{L,s}} \quad (5h)$$

La combinaison de l'équation (5h) avec l'équation (5g) nous donne:

$$\Omega_{l,s} = \left[W_l (v'_{l,s} - v_{l,s}) \frac{B_s T_e^{\alpha_s + 1 - \sum_{l,s}^m v_{l,s}}}{a \prod_{l=1}^m (W_l)^{v_{l,s}}} \left(\frac{P}{R} \right)^{\sum_{l,s}^m v_{l,s} - 1} \right] \cdot \left[\theta^{1 + \alpha_s - \sum_{l,s}^m v_{l,s}} \exp\left(-\frac{E_s}{\theta}\right) \right] \cdot \left[\prod_{l=1}^m (Y_l)^{v_{l,s}} \right] \quad (5i)$$

On remarque que l'expression précédente est le produit de 3 termes:

- Un premier terme adimensionnel

$$D_{l,s} = \frac{1/a}{1/B_s} \cdot W_l \frac{(v'_{l,s} - v_{l,s})}{\prod_{l=1}^m (W_l)^{v_{l,s}}} T_e^{\alpha_s + 1 - \sum_{l,s}^m v_{l,s}} \left(\frac{P}{R} \right)^{\sum_{l,s}^m v_{l,s} - 1} \quad (5j)$$

$1/a$ est le temps cinématique de l'écoulement

$1/B_s$ le temps chimique de la réaction s

Indépendant de η et proportionnel au rapport du temps caractéristique cinématique et du temps caractéristique chimique de la réaction s . Ce terme joue un rôle très important dans le terme source vu qu'il représente un rapport des temps sur deux échelles complètement différentes.

- Un deuxième terme dépendant uniquement à la température adimensionnelle θ .

$$F_s(\theta) = \Omega_{l,s} = \theta^{1 + \alpha_s - \sum_{l,s}^m v_{l,s}} \exp\left(-\frac{E_s}{\theta}\right) \quad (5k)$$

- Un troisième terme dépendant uniquement de la fraction massique Y_l .

$$C_s(Y_l) = \prod_{l=1}^m (Y_l)^{v_{l,s}} \quad (5l)$$

Nous devons maintenant sommer sur toutes les réactions chimiques impliquées afin d'obtenir la masse de production totale de l'élément l .

$$\Omega_l = \sum_{s=1}^N D_{l,s} \cdot F_s(\theta) \cdot C_s(Y_l) \quad (5m)$$

7. Les propriétés de transport thermodynamique, et les taux de réactions

L'étude de la flamme prémélangée nécessite une compréhension profonde de la nature de tous les phénomènes physiques et chimiques qui apparaissent au cours du processus de combustion. Ce dernier ne peut être considéré comme adéquat que s'il peut décrire toutes les

réponses chimiques pertinentes en tenant compte des diverses gammes de variations paramétriques et celles du système susceptibles de survenir.

Dans ce document, le modèle chimique de réaction est composé de 9 constituant chimiques : CO, O₂, CO₂, O, H₂O, OH, H, H₂ et HO₂, et 30 réactions élémentaires homogènes. Le modèle est fondé sur une recherche avisée dans une littérature récente des cinétiques chimiques. Il est capable de prédire la température de la flamme, la vitesse de l'écoulement du fluide, et les profils de concentration des espèces.

Le mécanisme cinétique détaillé avec les constantes de taux de réaction élémentaire est représenté dans le tableau 1. Les propriétés thermochimiques pour les éléments ont été obtenues à partir des tables thermochimiques JANAF [20].

Tableau 1. Constants de taux de réactions $K_s = B_s T^{\alpha_s} \exp(-E_s / R.T)$

N°	Reactions	B _{fs} (cm ³ /mol.sec)*	α _{fs}	E _{fs} /R	B _{bs} (cm ³ /mol.sec)*	α _{bs}	E _{bs} /R
R1	CO+O ₂ = CO ₂ +O	2.53. 10 ¹²	0	24000	2.11. 10 ¹³	0	26890
R2	O+H ₂ O = 2OH	5.90. 10 ¹³	0	9120	6.02. 10 ¹²	0	550
R3	O+H ₂ = OH+H	1.80. 10 ¹⁰	1	4480	7.95. 10 ⁰⁹	0	3440
R4	CO+OH = CO ₂ +H	1.69. 10 ⁰⁷	1.3	-330	1.75. 10 ⁰⁹	1.3	10530
R5	H+O ₂ = OH+O	1.44. 10 ¹⁴	0	8250	1.16. 10 ¹³	0	280
R6	H+H ₂ O=OH+H ₂	4.97. 10 ⁰⁹	1.3	9355	1.44. 10 ⁰⁹	1.3	1825
R7	O+HO ₂ =OH+O ₂	4.81. 10 ¹³	0	500	6.41. 10 ¹³	0	78660
R8	H+HO ₂ =2OH	2.40. 10 ¹⁴	0	950	2.58. 10 ¹³	0	21100
R9	OH+HO ₂ =H ₂ O+O ₂	3. 10 ¹³	0	0	3.94. 10 ¹³	0	36730
R10	OH+H+M=H ₂ O+M	3.62. 10 ²²	-1	0	6.74. 10 ²³	-2	60180
R11	O+H+M=OH+M	3.62. 10 ¹⁸	-1	0	6.90. 10 ¹⁸	-1	51610
R12	H+O ₂ +M=HO ₂ +M	7.25. 10 ¹⁵	0	-500	1.02. 10 ¹⁶	0	22590
R13	CO+O+M=CO ₂ +M	2.53. 10 ¹⁵	0	2200	7.10. 10 ¹⁶	0	64670
R14	O+O+M=O ₂ +M	1.08. 10 ¹⁴	0	-900	7.5. 10 ¹⁵	0	58680
R15	H+H+M=H ₂ +M	1.08. 10 ¹⁸	-1	0	4.75. 10 ¹⁸	-1	52650

(*) Pour les réactions tri moléculaires: cm⁶/mol².sec.

Pour plus de clarté ré-écrivons le système d'équations similaires à résoudre avec leurs conditions limites appropriées.

1- L'équation de conservation de la quantité de mouvement

$$\frac{du}{d\eta^2} + f(\eta) \frac{du}{d\eta} - u^2 + \theta = 0, u = \frac{1}{2} \frac{df}{d\eta} \quad (4a')$$

2- L'équation de conservation de l'énergie

$$\frac{1}{Pr} \frac{d\theta}{d\eta^2} + f(\eta) \frac{d\theta}{d\eta} - \sum_{L=1}^m \frac{h_L^0}{c_p T_e} \left(\sum_{s=1}^N D_{L,s} \cdot F_s(\theta) \cdot C_s(Y_L) \right) = 0 \quad (4b')$$

3- L'équation de conservation des espèces

$$\frac{1}{Sc} \frac{dY_L}{d\eta^2} + f(\eta) \frac{dY_L}{d\eta} + \sum_{s=1}^N D_{L,s} \cdot F_s(\theta) \cdot C_s(Y_L) = 0 \quad (4c')$$

Les conditions limites deviennent dans ce cas:

$$\left(\frac{df}{d\eta} \right)_{\eta=0} = u(0) = 0, f(0) = 0, \frac{1}{2} \left(\frac{df}{d\eta} \right)_{\eta \rightarrow \infty} = u(\infty) = 1 \quad (4f')$$

$$\left(\frac{d\theta}{d\eta} \right)_{\eta=0} = Bi(\theta_w - \delta), \theta(\eta \rightarrow \infty) = 1 \quad (4g')$$

$$\left(\frac{dY_L}{d\eta} \right)_{\eta=0} = 0, Y_L(\eta \rightarrow \infty) = (Y_L)_e \quad (4h')$$

Cet ensemble d'équations aux dérivées partielles non linéaires couplées est très difficile à résoudre analytiquement. Une méthode numérique itérative est développée pour traiter ce problème. Pour cela tous les termes non linéaires dans le système des équations sont linéarisés en utilisant le développement en série de Taylor autour de l'itération précédente. Après linéarisation le système des équations différentielles de conservation d'impulsion, d'énergie, et des espèces peuvent se mettre sous la forme générale suivante :

$$\xi \Phi'' + f^*(\eta) \Phi' + A_\Phi \Phi + S_\Phi = 0$$

Avec :

ξ	Φ	A_Φ	S_Φ
1	U	$-2u^*$	$(u^*)^2 + \theta^*$
1/Pr	Θ	$-\sum_{L=1}^m \frac{h_L^0}{c_p T_e} \left(\sum_{s=1}^N D_{L,s} \cdot F_s'(\theta^*) \cdot C_s(Y_L) \right)$	$-\sum_{L=1}^m \frac{h_L^0}{c_p T_e} \left(\sum_{s=1}^N D_{L,s} \cdot (F_s(\theta^*) - \theta^* F_s'(\theta^*)) \cdot C_s(Y_L) \right)$
1/Sc	Y_L	$\sum_{s=1}^N D_{L,s} \cdot F_s(\theta) \cdot C_s'(Y_L^*)$	$\sum_{s=1}^N D_{L,s} \cdot F_s(\theta) \cdot (C_s(Y_L^*) - Y_L^* C_s'(Y_L^*))$

8. Méthode de résolution

L'analyse de tout phénomène physique a pour but de déterminer les valeurs des différents variables qui le caractérisent, en fonction des paramètres établis. Dans ce travail, une résolution numérique est utilisée pour résoudre les équations du problème, la méthode est celle des différences finies, largement utilisée en mécanique des fluides. La méthode est totalement implicite, c'est-à-dire que toutes les variables sont liées entre elles et ne peuvent être obtenues que par la résolution d'un système d'équations algébriques linéaires. Qui, sous forme matricielle, donne : $[A] \{x\} = \{b\}$.

En analyse numérique, une méthode itérative permet de résoudre un problème (une équation ou un système d'équations) en utilisant un profil initial, puis en l'affinant par une succession d'approximations pour s'approcher progressivement de la solution exacte. Les méthodes itératives sont généralement utilisées pour les problèmes contenant un grand nombre de variables où les méthodes directes seraient trop coûteuses ou inapplicables. Celles-ci méthodes sont aussi adaptées aux matrices d'un ordre élevé contenant de nombreux éléments nuls (matrice creuse). C'est le cas des méthodes utilisées pour résoudre les systèmes d'équations linéaires : Méthode de Gauss-Seidel, Méthode d'élimination de Gauss-Jordan,

Dans ce travail, un code spécial a été développé pour résoudre numériquement les équations gouvernantes. Il est basé d'une part sur la méthode itérative d'élimination de Gauss-Jordan et sur un schéma implicite aux différences finies d'autre part. Le terme instationnaire $\frac{\partial}{\partial t}$ est introduit dans chacune des équations. Et la solution stationnaire est recherchée, ou on ne s'intéresse pas aux états transitoires.

8.1 Résolution numérique du système d'équations différentielle par la méthode des différences finis :

Résoudre numériquement une équation différentielle consiste à approcher, le plus précisément possible, la valeur de la solution en un certain nombre de points (les points nodaux). On construit ainsi un système (linéaire) liant, via l'approximation numérique des dérivées concernées, les valeurs nodales (les valeurs de la solution numérique aux points de collocation) entre-elles. L'idée maîtresse sur laquelle repose cette approche est que, la solution

approchée (celle obtenue aux points nodaux) tend vers la solution exacte du problème différentiel traité, l'approchant d'autant mieux que le nombre de valeurs nodales est grand.

Ayant choisi un ensemble de $m+1$ points nodaux η_i (répartis sur l'intervalle $[\eta_0 = 0; \eta_m = \eta_{\max}]$), on construit le système linéaire liant les valeurs nodales $\Phi_i = \Phi(\eta_i)$; on obtient un système matriciel de la forme $\mathbf{L} \cdot \Phi = \mathbf{S}_\Phi$, où Φ est le vecteur contenant les valeurs nodales Φ_i , \mathbf{S}_Φ le vecteur source dont les éléments sont les $S(\eta_i)$ et la matrice \mathbf{L} , la matrice des coefficients.

Les éléments de la matrice \mathbf{L} sont donnés par:

$$L_{ij} = \xi d_{ij}^{(2)} + f^*(\eta_i) d_{ij}^{(1)} + A_\Phi d_{ij}^{(0)}$$

Où $d^{(2)}$, $d^{(1)}$ et $d^{(0)}$ sont les matrices de dérivation seconde, première et d'ordre zéro (la matrice identité). Tout va donc reposer sur l'écriture des matrices $d^{(2)}$ et $d^{(1)}$, c'est à dire des hypothèses du degré d'approximation pris en compte. En ce qui concerne la méthode dite des différences finies, on fait le choix d'utiliser des approximations locales à chaque point nodal. La valeur de la dérivée au point nodal est évaluée, en fonction des valeurs nodales voisines. En pratique, on utilise des schémas de trois points, qui correspondent à des approximations d'ordre 2. Les matrices de dérivation correspondantes sont données dans ce qui suit. Sachant en plus, que les schémas décentrés sont généralement moins précis que leurs homologues centrés (c'est à dire, où la dérivée est évaluée grâce aux valeurs nodales de points encadrant au mieux le point nodal considéré), ce n'est qu'au voisinage des bornes du domaine où, faute de mieux, on a recours aux schémas décentrés.

8.1.1 Discrétisation de l'équation différentielle

Dans le champ, sur trois points (espacés d'un pas h), les matrices de dérivation liant trois valeurs nodales consécutives $\{\eta_{i-1}, \eta_i, \eta_{i+1}\}$ et leurs dérivées nodales (première et seconde) sont:

$$D_2^{(1)} = \frac{1}{2h} \begin{bmatrix} -1 & 0 & 1 \end{bmatrix}, D_2^{(2)} = \frac{1}{h^2} \begin{bmatrix} 1 & -2 & 1 \end{bmatrix}$$

Ces schémas de base vont servir à construire les matrices de dérivation globales $\mathbf{d}_2^{(1)}$ et $\mathbf{d}_2^{(2)}$. Sachant qu'une meilleure approximation est généralement obtenue via la méthode de

8.2 Prise en compte des conditions aux limites

Le système linéaire $\mathbf{L}\cdot\Phi = \mathbf{S}_\Phi$ ne rend compte que de l'équation différentielle étudiée. Or, celle-ci est assortie de conditions aux limites qu'il faut également retranscrire. Du point de vue du système linéaire, cela signifie que l'on dispose de deux contraintes complémentaires (sur les valeurs nodales η_0 et η_m) à satisfaire. Ces contraintes, satisfont l'équation différentielle. On va donc insérer les équations relatives à η_0 et η_m qui traduisant la discrétisation des conditions aux limites du problème dans la première et la dernière ligne respectivement. Suivant la forme des conditions aux limites du problème à traiter, on distingue les types suivants:

8.2.1 Conditions aux limites de type Dirichlet

Les valeurs aux limites sont des données du problème: $\Phi(\eta_0) = C_0$ et $\Phi(\eta_m) = C_m$ qui implique directement que les valeurs nodales $\Phi_0 = C_0$ et $\Phi_m = C_m$ sont connues. On peut donc aisément réécrire le système $\mathbf{L}\cdot\Phi = \mathbf{S}_\Phi$ sous une forme plus réduite ne portant sur les valeurs nodales intérieures $\Phi_i, i = 1, \dots, m-1$.

8.2.2 Conditions aux limites de type Neumann

Les valeurs des dérivées (premières) aux limites sont des données du problème: $\Phi'(\eta_0) = \Phi'_0$ et $\Phi'(\eta_m) = \Phi'_m$. A partir des matrices de dérivation (des schémas employés), on dispose des relations entre $\Phi'_0 = \Phi'_0$ en fonction de $\Phi_0, \Phi_1, \Phi_2, \dots$ et $\Phi'_m = \Phi'_m$ en fonction de $\Phi_m, \Phi_{m-1}, \dots$, qui sont à insérer dans les première et dernière lignes de la matrice \mathbf{L} .

8.2.3 Conditions aux limites mixtes

Les valeurs aux limites et leurs dérivées sont données par une relation linéaire entre elles, du type $c_A \Phi_A + k_A \Phi'_A = q_A$; c_A, k_A et q_A étant des constantes connues. A l'aide de la matrice de dérivation (du schéma employé), cette relation se discrétise aisément et conduit à une relation entre $\Phi_0 = \Phi_A$ et les valeurs nodales voisines Φ_1, Φ_2, \dots qu'il suffit d'insérer dans (la première ligne de) \mathbf{L} . Ce type de condition aux limites exprimées à l'autre borne du domaine η_m , se traite évidemment de la même manière et conduit similairement à l'insérée dans la dernière ligne de \mathbf{L} .

d'arrêt, le temps qui caractérise l'écoulement est généralement définie comme le gradient de vitesse radiale $a = U_e / d$ où d est le diamètre du jet et U_e , la vitesse du jet. Dans la présente étude, les concentrations massiques pour le CO , O_2 et H_2O sont 27,5%, 27% et 3,5% respectivement, et la température d'entrée prend les valeurs suivantes 300K, 400K, et 600K. La chaleur produite par les réactions chimiques est évacuée au niveau du fluide externe. Une deuxième partie de ce travail est centrée sur l'effet du temps cinématique d'écoulement sur l'allumage et l'extinction du mélange, la vitesse du jet d'écoulement, et sur les profils des concentrations des éléments chimique. La troisième partie de ce travail se concentre sur l'effet de nombre de Biot qui prend les valeurs suivantes : élevé ($\gg 1$), pour caractériser le bon transfert de chaleur convectif au niveau de la paroi, à très petite ($\ll 1$) pour caractériser une plaque adiabatique. Dans le but de montrer l'effet des concentrations massiques du mélange sur l'allumage de la flamme sous des conditions critiques de temps cinématique d'écoulement, des valeurs de concentration plus élevées sont considérées en dernière étape.

Chapitre III

Résultats et Discussion

Chapitre III

Résultats et Discussion

1. L'effet de la température d'entrée (T_e)

1.1. Profils de vitesse et de température

Dans cette section, nous présentons les résultats de la simulation numérique. La Figure 2 montre les profils de vitesse et de températures adimensionnelles dans la région d'arrêt pour différentes valeurs de la température d'entrée du mélange de combustible. Les analyses ont été effectuées avec les températures d'entrée suivantes 300K, 400K et 600K, à la pression atmosphérique 1 atm, et pour un temps cinématique d'écoulement de 1/3500 sec. Comme le montre cette figure, on observe certaines différences entre les profils à hautes température d'entrée de mélange (600K) et ceux à basses températures (300K et 400K).

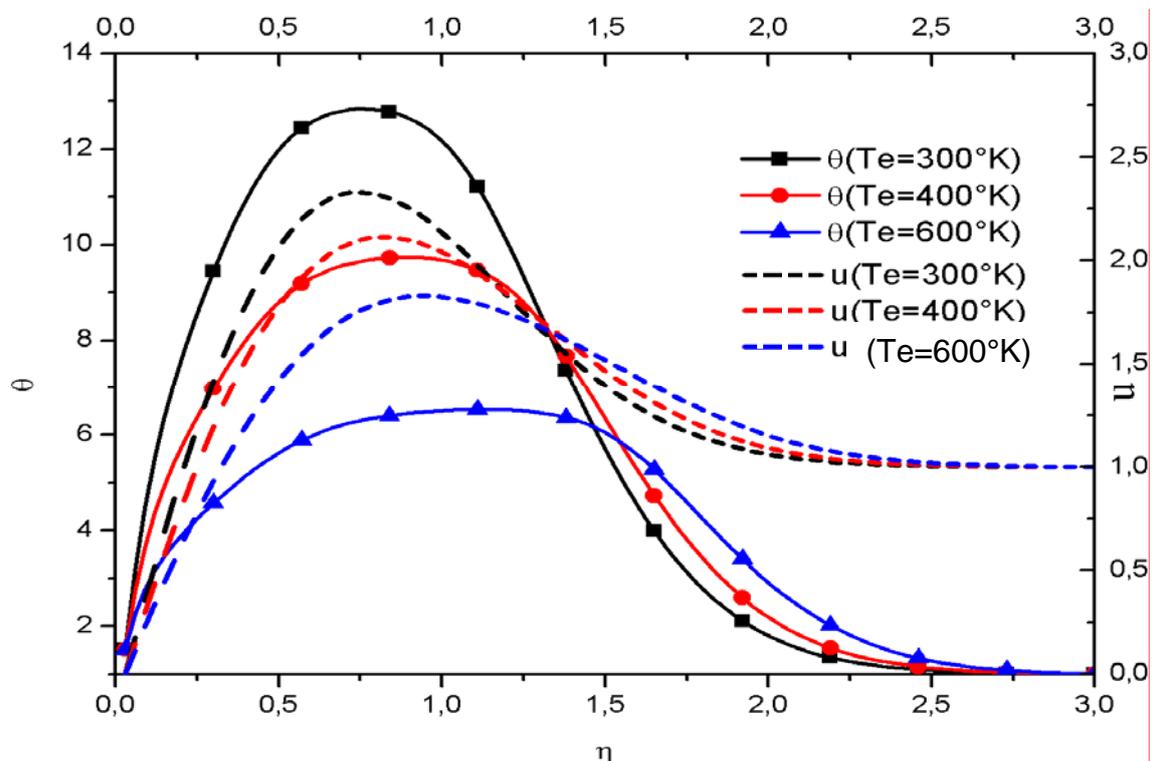


Figure. 2: Profils de vitesse et de température du jet de flamme tombant sur la surface plane.

Cela est dû à l'allumage du mélange qui peut être défini comme un passage du taux de réaction du mélange relativement lent au rythme relativement rapide, caractérisé par une température de combustion très élevée.

La flamme avec une température d'entrée supérieure survient plus tôt. La raison de cette différence est que la température d'entrée du mélange est l'un des multiples facteurs importants qui peuvent influencer le taux de réaction chimique de mélange combustible. Habituellement, une augmentation de la température est accompagnée d'une augmentation dans le taux de réaction chimique.

La combustion développée est, tel qu'il est bien connu, le mode cinétique des processus chimiques dans lequel l'accélération propre au taux de réaction chimique augmente progressivement. La température est une mesure de l'énergie cinétique du système. A de hautes températures, le nombre de collisions moléculaires par unité de temps est plus élevé, et entraîne un taux de réaction du mélange plus grand. L'allumage et la combustion peuvent être provoqués par deux facteurs fondamentalement différents :

- L'accélération progressive de réchauffement propre du mélange causée par l'augmentation de la température, ce facteur, appelé thermique, se produit lorsque la chaleur libérée par les réactions exothermiques est supérieure à celle consommée par des réactions endothermiques.
- La concurrence entre la production et la consommation des intermédiaires actifs dans leur réaction en chaîne. Cela signifie que l'allumage ne se produit que si le taux de production des intermédiaires actifs (en particulier les radicaux OH, O, H) est plus élevé que leur taux de consommation par recombinaison. Ce facteur est purement chimique.

Notant que ces deux facteurs sont indépendants l'un de l'autre.

Une fois que l'oxydation du monoxyde de carbone est abordée, la température du mélange combustible s'élève graduellement (le mélange s'auto-réchauffe) et atteint le point d'allumage. C'est le cas des trois températures d'entrée considérées. La différence est que le point d'allumage est d'abord atteint pour les hautes températures d'entrée puis pour les plus faibles. Le pic de température a lieu au voisinage de la surface solide et désigne l'emplacement de la flamme. La température diminue en amont de l'écoulement en raison du faible taux de réaction du mélange. La vitesse du jet dépend alors de la température à travers

la viscosité. Cette dépendance est clairement visible dans la région de la flamme, où la vitesse adimensionnelle est affectée par le niveau élevé de génération de chaleur. La vitesse de jet augmente avec l'augmentation de la température du mélange gazeux et atteint son maximum au niveau du pic de température, puis diminue près de la paroi froide dû à la perte de chaleur transmise au fluide externe.

1.2. Profils des concentrations

L'objectif est de déterminer comment le pré-réchauffement du mélange peut affecter les profils de distribution des concentrations massiques. Les résultats sont discutés sous les mêmes conditions de calcul citées ci-dessus. Les figures suivantes montrent la variation des concentrations des différents éléments présents dans le jet. La figure 3 montre que l'augmentation de la température conduit à une diminution des concentrations de CO et de O₂, cette diminution est plus significative dans le cas où $T_e = 600\text{K}$. Ceci pourrait être expliqué comme suit: les réactions chimiques sont amorcées juste après la sortie du jet. Les principaux éléments chimiques présents dans le mélange, dans ce cas sont le CO, O₂ et H₂O. Et les réactions chimiques élémentaires dominantes sont $\text{CO} + \text{O}_2 = \text{CO}_2 + \text{O}$ (R1), $\text{OH} + \text{HO}_2 = \text{H}_2\text{O} + \text{O}_2$ (R9), et $\text{OH} + \text{H} + \text{M} = \text{H}_2\text{O} + \text{M}$ (R10). Ces réactions génèrent les radicaux O, OH, HO₂ et les radicaux H. Il est bien connu que la réaction chimique de CO avec O₂ est très lente et peut être significative uniquement à haute température (Hammoud et *al.*, [81],[82]), le taux de cette réaction devient important dans la région de la flamme où la température atteint son maximum. La présence des radicaux O, OH, HO₂, et H conduit à l'oxydation du CO à travers la réaction clé $\text{CO} + \text{OH} = \text{CO}_2 + \text{H}$ (R4).

Comme il a été mentionné par Davis [22], la réaction (R4) est une étape critique. La constante du taux de cette réaction mérite une attention particulière. En effet, le rôle crucial de cette réaction dans la combustion des hydrocarbures est principalement dû à la chaleur significative produite durant la conversion du CO en CO₂. Cette dernière peut avoir lieu juste après, avec la génération de O à travers la réaction de recombinaison $\text{CO} + \text{O} + \text{M} = \text{CO}_2 + \text{M}$ (R14). Les Figures (3 et 4) montrent que les taux de réactions chimiques du mélange de monoxyde de carbone, de l'oxygène et de la vapeur d'eau pour $T_e = 600\text{K}$ est plus large que ceux pour $T_e = 300\text{K}$.

Ces résultats nous laissent conclure que l'augmentation de la température dans la zone de pré-réchauffement, conduit à la dissociation des molécules de H₂O de façon plus significative

et fournit plus de radicaux OH à travers (R9) et (R10). Ceci est clairement visible dans la figure 5. Il est important de noter que les molécules de H_2O semblent être la source de génération des radicaux OH à la première étape des réactions chimiques. Cette augmentation des radicaux OH améliore, d'une façon remarquable, la conversion du monoxyde de carbone en dioxyde de carbone.

Les profils de concentration des éléments CO_2 et O sont représentés dans la figure 6, où on peut observer que la production du CO_2 est 4 fois plus élevée pour $Te = 600K$ comparée à $Te = 300K$. Les résultats obtenus dans cette section montrent que nous pouvons améliorer le taux de réaction chimique du mélange $CO-O_2-H_2O$ sous les mêmes conditions de concentrations des éléments chimiques et du temps cinématique de l'écoulement par l'augmentation de la température d'entrée du mélange

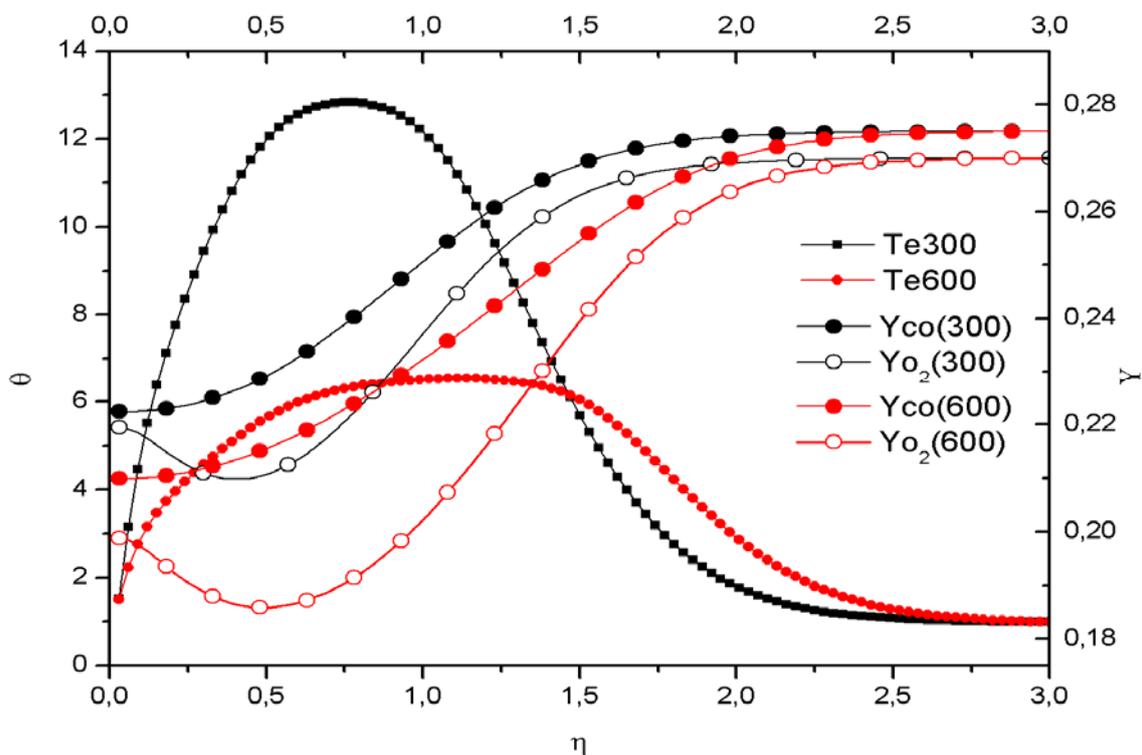


Figure. 3: Profils des concentrations de (CO et O_2) à $Te = 300K$ et $600K$

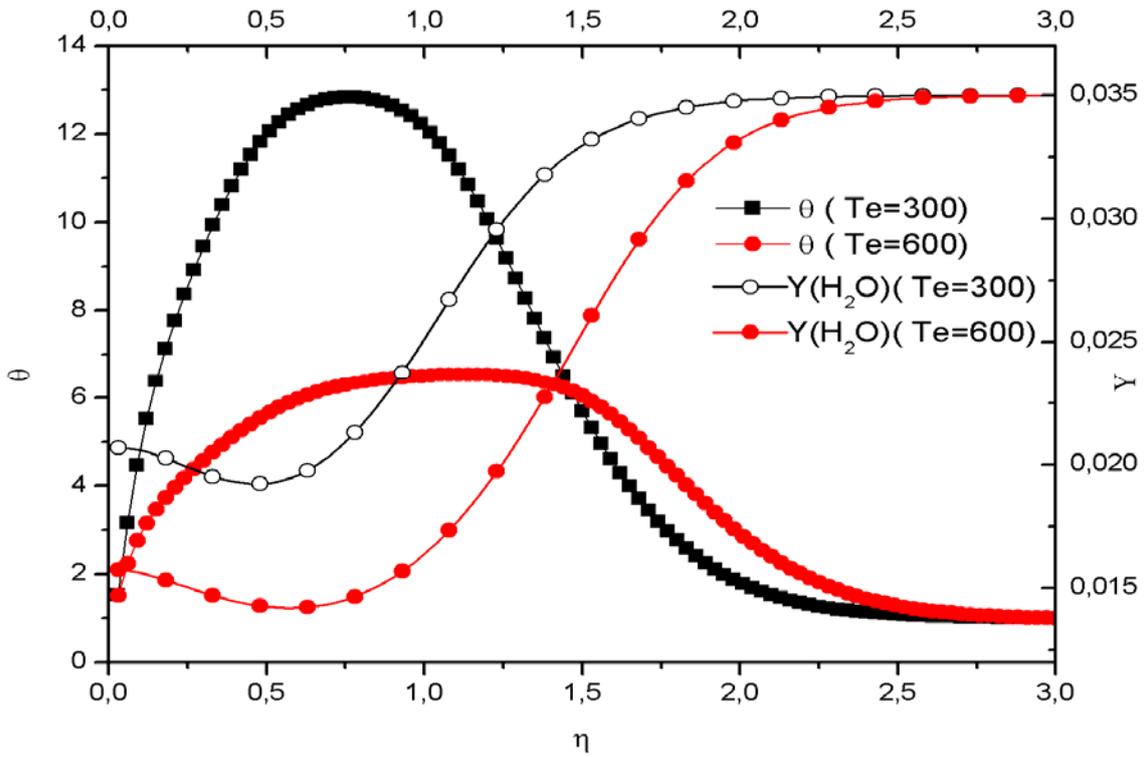


Figure. 4: Profils des concentrations de H_2O à $Te = 300K$ et $600K$

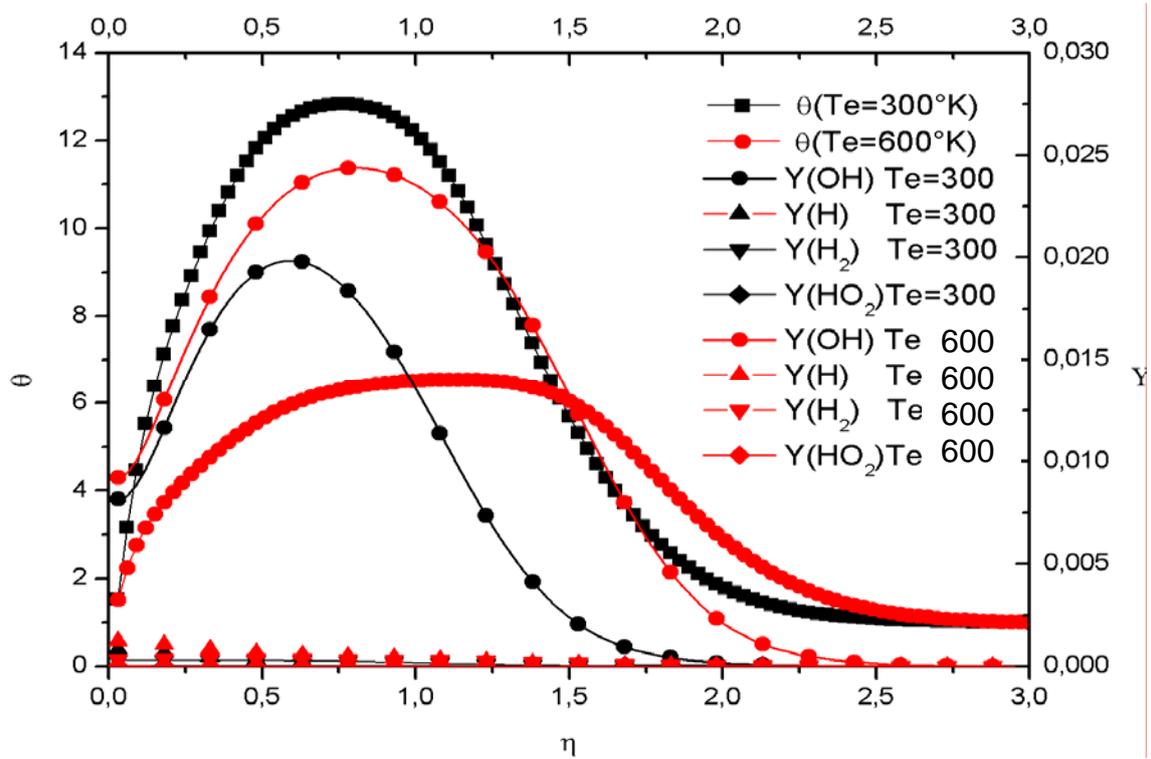


Figure. 5: Profils des concentrations de (OH, H, H_2 , and HO_2) à $Te = 300K$ et $600K$

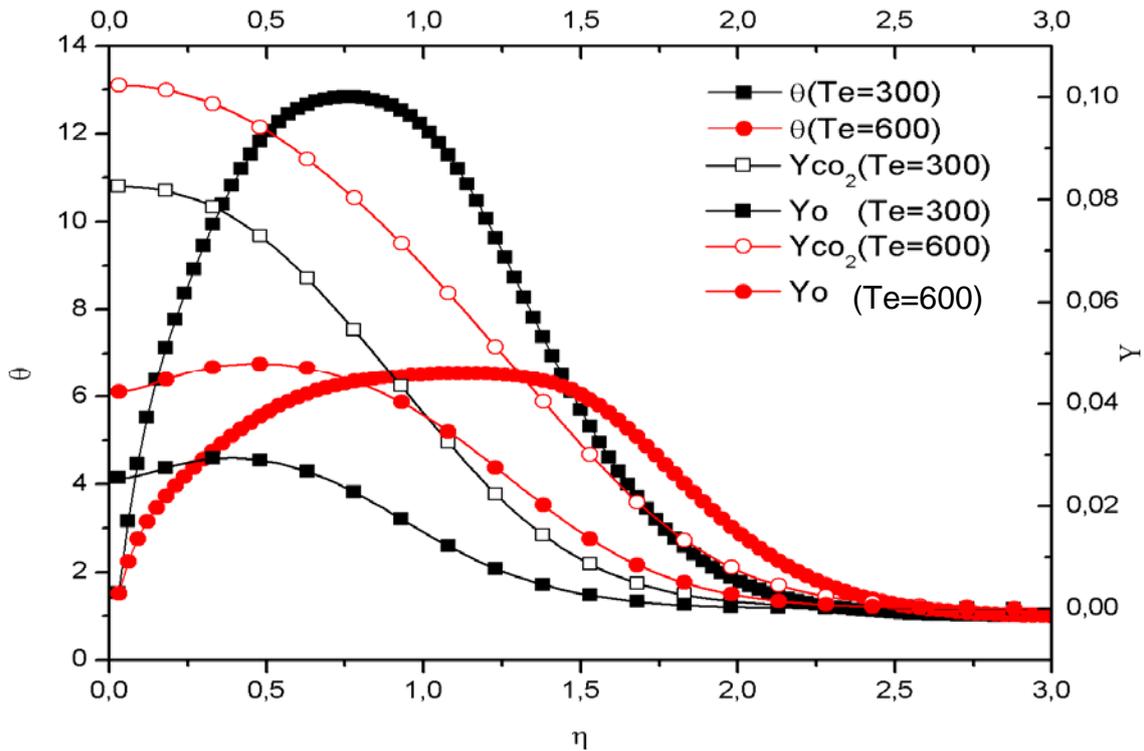


Figure. 6: Profils des concentrations de CO_2 et O à $T_e = 300\text{K}$ et 600K

2. L'effet du temps cinématique de l'écoulement ' $1/a$ ' :

Notre objectif est d'examiner l'effet du temps caractéristique de l'écoulement sur le comportement du mélange $\text{CO-O}_2\text{-H}_2\text{O}$, et de comprendre comment il affecte l'allumage et l'extinction de la flamme. L'effet du temps cinématique de l'écoulement sur le délai d'allumage de mélange est discuté pour la même température d'entrée du mélange et les mêmes concentrations des éléments chimiques. Le temps cinématique de l'écoulement est un paramètre important dans l'extinction de la flamme d'impact, ainsi nous nous intéresserons davantage à ce paramètre comme étant un paramètre représentatif des propriétés de l'écoulement

Le temps caractéristique de l'écoulement peut être contrôlé en faisant varier la vitesse du jet. Au niveau le plus fondamental, l'inflammation du mélange se produit lorsque les taux de production de chaleur au sein de l'écoulement et/ou les réactions chimiques en chaîne de branchement sont rapides par rapport à la perte due aux différents mécanismes [79] ; dont, pour les conditions d'allumage considérées du mélange, le transport par diffusion de l'énergie thermique, et des produits chimiques, de la zone de réaction vers la région voisine des gaz

moins réactifs. Comme l'illustre la figure (7), l'allumage du mélange existe pour les temps caractéristiques de l'écoulement $1/3500$ sec et $1/4000$ sec avec une certaine différence dans les profils de température et dans les délais du temps d'allumage.

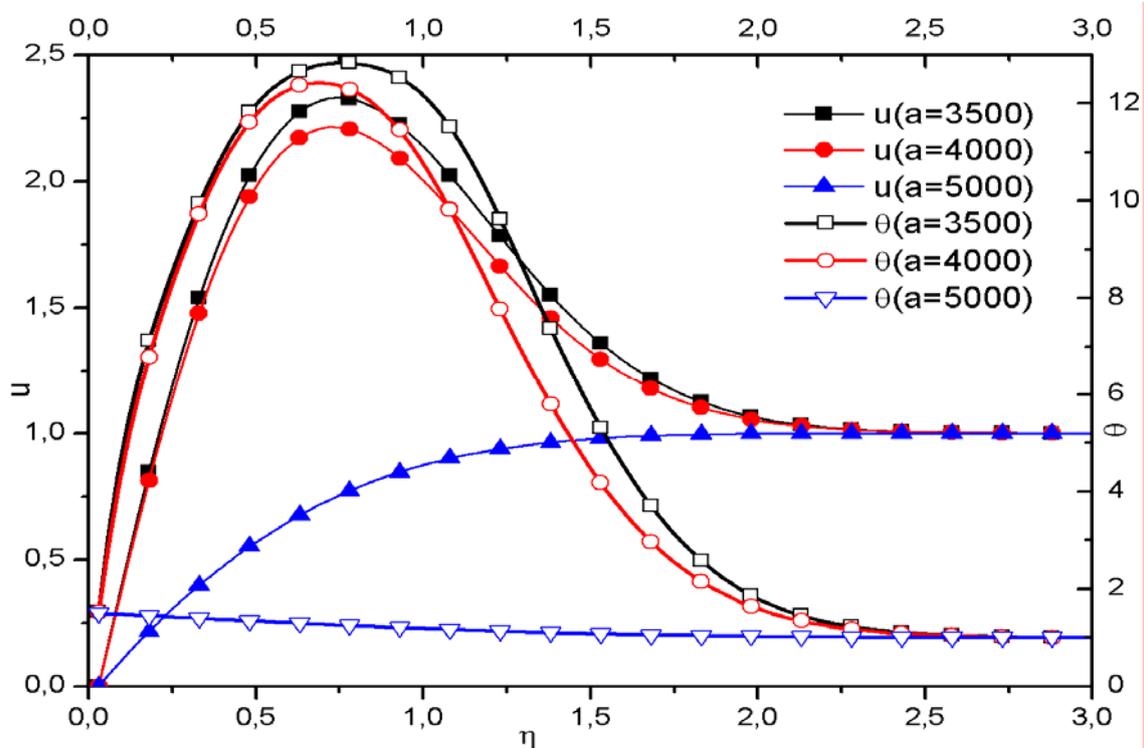


Figure. 7: Profils des vitesses et des températures pour différents temps caractéristique de l'écoulement

La température de la flamme est maximale pour un temps caractéristique de l'écoulement élevé ($1/a$). En augmentant ce paramètre, le point d'allumage se déplace en aval. Ceci conduit à une mince couche limite thermique et ainsi à une perte de chaleur importante au niveau de la paroi solide, la température du mélange dans cette région se rapproche de la température de fluide externe. La Figure 7 montre qu'un temps d'écoulement plus faible brise la flamme et la fait disparaître. Ce qui confirme les résultats trouvés par Libby et ces collaborateurs [49]. Qui ont montré dans leur étude que la flamme peut s'éteindre pour un bon refroidissement de la plaque solide et un temps caractéristique d'écoulement très élevé. Dans ce cas, c'est-à-dire pour des temps cinématiques élevés, le profil de vitesse n'est pas affecté et prend la forme du profil de vitesse bien connu d'un écoulement en zone d'arrêt. L'écoulement de jet se comporte comme un écoulement de jet froid (aucune génération de chaleur le long de l'écoulement du jet) autrement dit un jet sans flamme.

On peut conclure que sous des conditions similaires de températures de préchauffage et de concentrations des éléments, le temps caractéristique de l'écoulement a un rôle important dans les délais de temps d'auto-inflammation, et sur le taux de réaction du mélange.

Comme il a déjà été démontré, pour des valeurs élevés du temps cinématique, (faibles gradients de vitesse du jet) les molécules du carburant et ceux de l'oxydant ont assez de temps pour entrer en collision, conduisant à la production de quantités importantes de radicaux comme le OH et O. La Figure 8 montre que la dissociation du H₂O, pour produire les radicaux OH, est plus importante à des temps cinématiques élevés. Elle diminue à de plus faibles niveaux.

Les radicaux OH jouent un rôle crucial dans la conversion du monoxyde de carbone en dioxyde de carbone grâce à la réaction $\text{CO} + \text{OH} = \text{CO}_2 + \text{H}$. Cette réaction est caractérisée par une génération de chaleur importante qui permet à la température du mélange d'atteindre l'étape d'auto-inflammation. L'action d'auto-inflammation du mélange n'est pas seulement thermique mais aussi chimique. Ceci est dû au fait que le jet du mélange peut fournir des quantités importantes de radicaux. Une situation appelée "radical induced ignition", est observée lorsque l'auto-inflammation d'un mélange à froid (300 K) se produit avec la production d'une quantité importante de radicaux au voisinage de la sortie du jet. Si leurs concentrations sont telles qu'elles ne se désintègrent pas en raison de réactions de recombinaison plus rapide, ils peuvent déclencher la génération d'une quantité plus élevée des radicaux. C'est le cas des temps cinématiques élevés d'écoulement, et le système finira par s'auto enflammer.

La présence de tels radicaux, juste après la sortie du jet rend cette région chaude et sensible à initier la combustion et à augmenter la température locale ; donc, la combustion du mélange peut toujours commencer. Au contraire, si le temps cinématique de l'écoulement est trop élevé par rapport à une valeur critique donnée, l'allumage de la flamme pré-mélangée échoué. Le délai de temps d'auto inflammation est mieux défini en examinant l'évolution d'une quantité qui augmente sa valeur inerte de façon significative dans la flamme. C'est le cas du radical OH, qui est rigoureusement lié à l'émission par chimiluminescence OH* utilisée dans les expériences. Cela signifie que les radicaux OH indiquent l'endroit où les radicaux de réaction sont décomposés et recomposés (Kolhnur & al., 2002). Le niveau élevé de concentration des radicaux OH est un bon indicateur de la position de la zone de réaction principale. Il peut être utilisé comme un traceur pour le front de flamme. En comparant les

figures 8 et 9, la dépendance du pic OH est la même que la dépendance du pic de température de mélange. C'est pourquoi les courbes des radicaux OH et le profil de température ont la même allure.

Les Figures 9 et 10 présentent les profils de CO, O₂, CO₂ et O pour différents temps cinématiques d'écoulement. On voit clairement que la diminution du temps cinématique va largement affecter la conversion du monoxyde de carbone en dioxyde de carbone. Celle-ci est plus importante à des niveaux élevés du temps cinématique, mais négligeable à de faibles niveaux de ce dernier, où la flamme est éteinte.

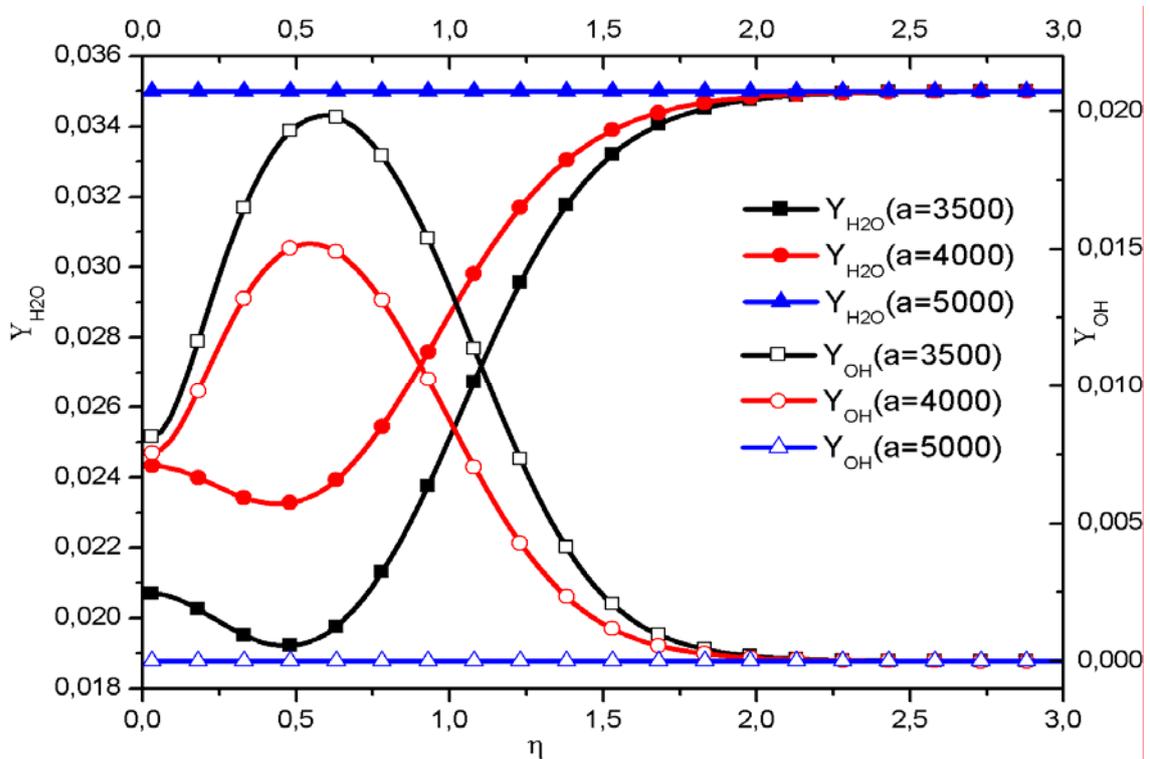


Figure. 8: Profils de H₂O et OH pour différents temps cinématiques et sous les mêmes conditions de calcul

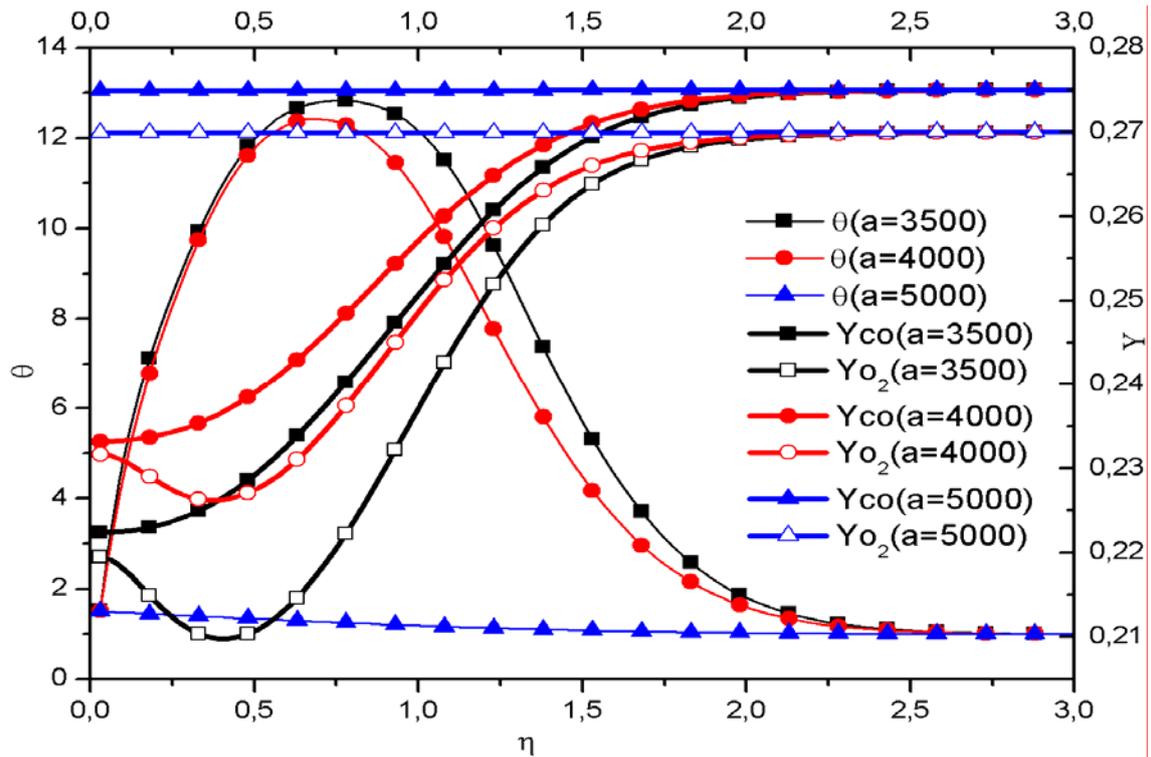


Figure. 9: Profils de CO et O₂ pour différents temps cinématiques et sous les mêmes conditions de calcul

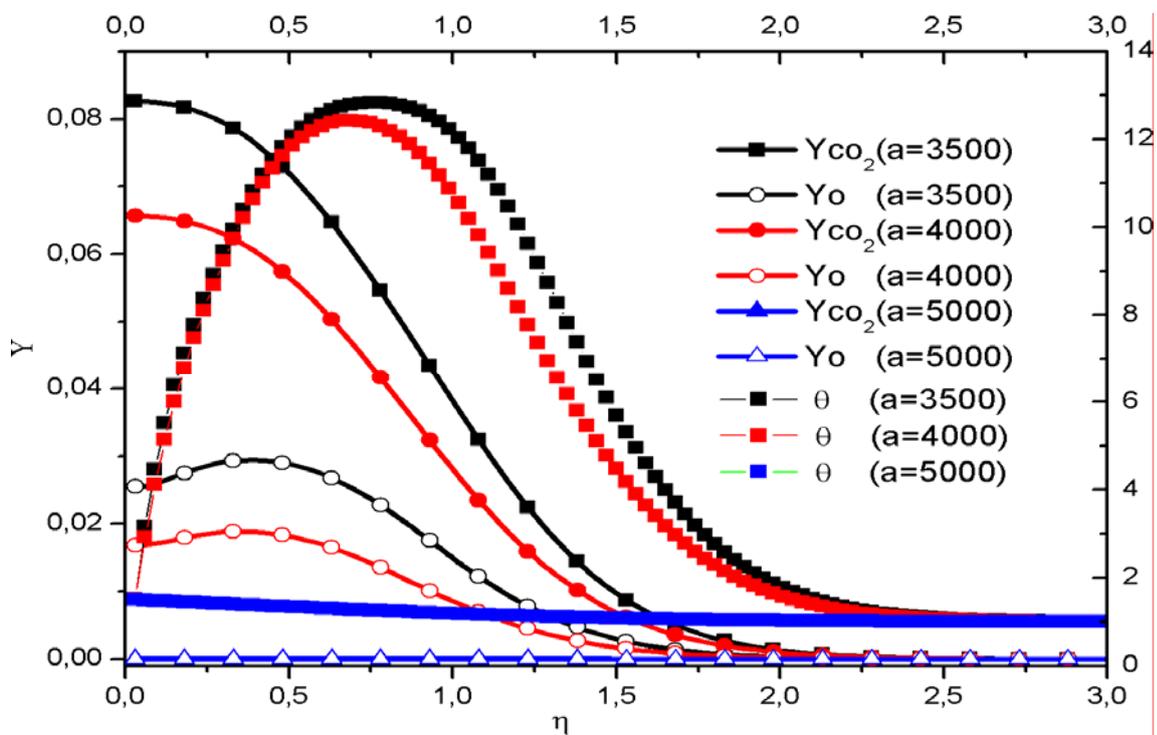


Figure. 10: Profils de CO₂ et O pour différents temps cinématiques et sous les mêmes conditions de calcul

3. L'effet du nombre de Biot:

Dans le but de comprendre l'effet du nombre Biot sur le transfert de chaleur et le comportement de la flamme près de la paroi, différents cas sont traités. En allant d'une faible valeur du nombre Biot (paroi adiabatique) à une valeur plus élevée, afin de caractériser une grande perte de chaleur au fluide externe au niveau de la surface solide par convection. Comme il est clairement visible dans la figure 11, l'effet de la perte de chaleur à la paroi, n'apparaît qu'au niveau de la région de stagnation. Le gradient de température est nul dans le cas où la paroi serait adiabatique, et la chaleur générée par la combustion du mélange est accumulée près de la surface solide.

Le feedback de la chaleur, le long de l'écoulement dans la direction opposée de jet, améliore le taux de conversion dans la région d'arrêt, et le pic de la température maximale apparaît dans cette région dénotant une flamme adiabatique. Le gradient de température devient alors plus important en augmente le nombre Biot au niveau de la paroi. Cela se traduit par une forte perte de chaleur par convection au niveau de la surface solide, et la température de mélange va se rapprocher de plus en plus de la température de fluide externe. Le pic de température, qui caractérise la position de la flamme, se déplace de la région d'arrêt vers la direction opposée du jet.

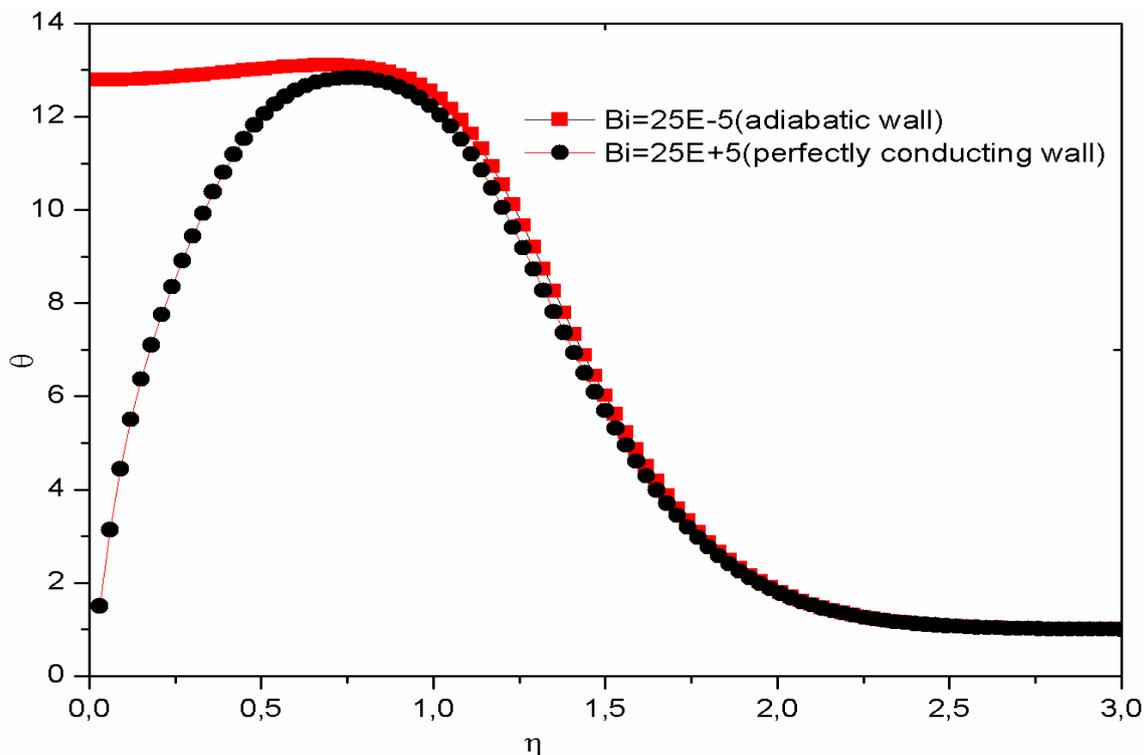


Figure. 11: Profils de température pour différents nombres Biot

Pour des nombres de Biot très élevés, la surface atteint la température de fluide externe. Les profils de température suivent la même allure, en amont, et ils ne sont pas affectés par le nombre Biot au niveau de la paroi solide. Dans la région d'arrêt un écart dans les profils de températures est observé. On peut donc conclure que le nombre de Biot n'affecte que la région d'arrêt.

Les effets du nombre de Biot sur les profils de concentration massique des éléments chimiques sont représentés dans les figures (12, 13 et 14). Dans le cas des faibles nombres de Biot (une surface adiabatique), l'excès d'énergie libérée par la flamme est entièrement stocké dans le mélange de gaz près de la paroi. Néanmoins, pour les nombres de Biot élevés (grande perte de chaleur par convection au niveau de la paroi solide). Cet excès d'énergie va être cédé au fluide externe. Il est clairement établi dans la figure 12 que lorsque la chaleur est emmagasinée près de la paroi, pour le cas de la surface adiabatique, la conversion du monoxyde de carbone est plus importante. Le pic de température au niveau de la région d'arrêt améliore le taux conversion des réactions produisant les radicaux OH et O et conduit à une plus forte conversion du monoxyde de carbone à travers les deux réactions dominantes (R4) et (R13).

Pour les nombres de Biot élevés, la conversion du monoxyde de carbone décroît en raison de la perte de chaleur vers l'extérieur. Cela influe sur les concentrations des radicaux OH et O dans la région d'arrêt à travers les réactions de recombinaison (R2), (R5) et (R14), et entraîne une augmentation des concentrations de O_2 et H_2O . Les profils de CO_2 dans la figure 12 montrent que la concentration du dioxyde de carbone est légèrement plus importante dans le cas où le nombre de Biot est élevé.

A l'équilibre chimique, la fraction massique totale de dioxyde de carbone présent dans le mélange est une balance entre le dioxyde de carbone produit à partir des réactions directes (R1), (R4) et (R13), et sa consommation par les mêmes réactions inverses. La réaction inverse (R1) ne peut avoir lieu qu'aux hautes températures. Nous pensons que la perte de chaleur par convection au niveau de la surface solide et l'augmentation de la quantité de l'oxygène O par recombinaison dans la région d'arrêt, sont les deux facteurs responsables qui peuvent affecter le taux de conversion du dioxyde de carbone en monoxyde de carbone à travers la réaction inverse (R1). Au lieu de cela, la conversion du monoxyde de carbone en dioxyde de carbone continue de fournir plus de dioxyde de carbone CO_2 , notamment à travers la réaction (R4).

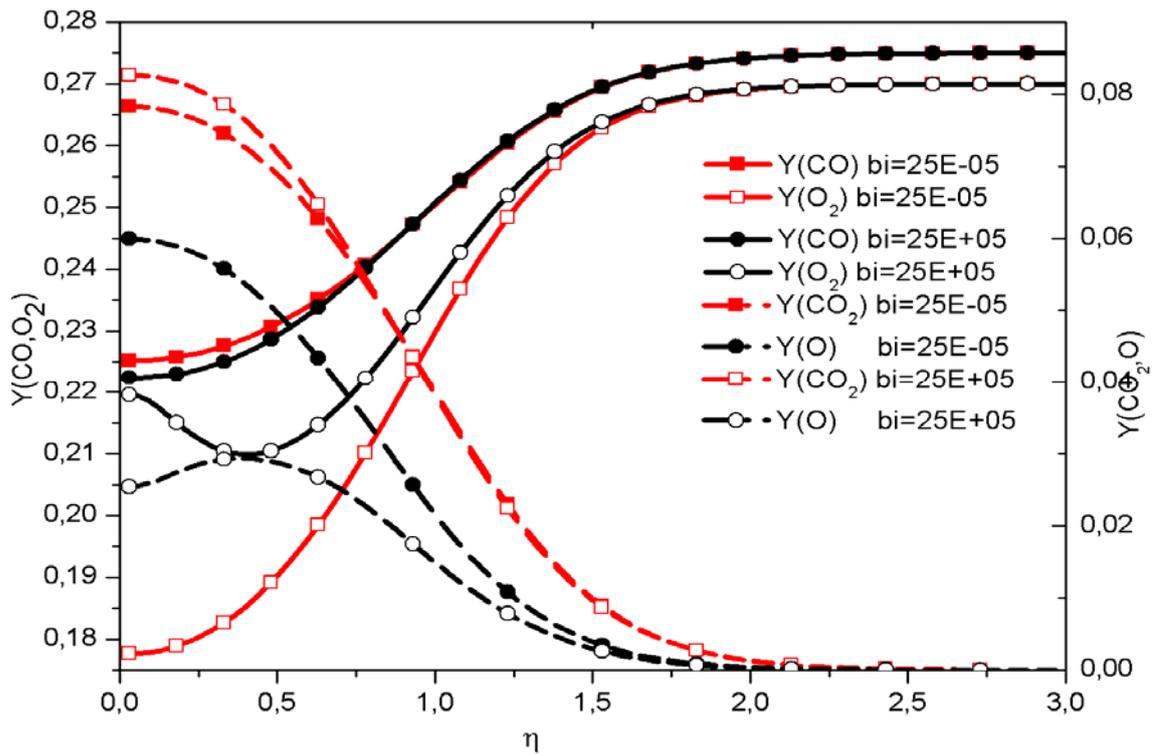


Figure. 12: Profils de CO, O₂, CO₂ et O pour différents nombres de Biot.

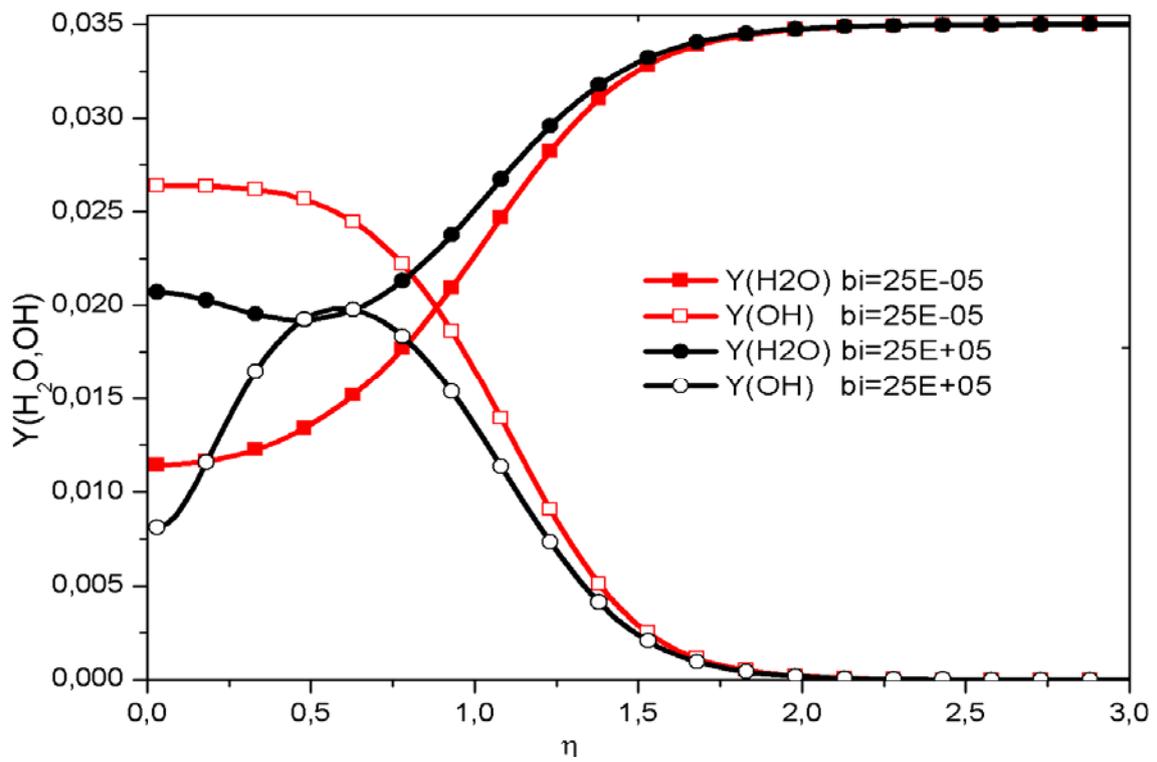


Figure. 13: Profils des concentrations de H₂O et OH pour différents nombres de Biot.

4. L'effet des concentrations d'entrée

Dans cette section nous nous intéressons à l'effet des concentrations d'entrée sur le comportement du mélange à de très faibles temps cinématiques d'écoulement, c'est-à-dire pour les hautes vitesses de jet. Comme nous l'avons déjà démontré, la flamme du mélange s'éteint pour les faibles temps cinématiques de l'écoulement ($1/a=5000$ sec). Pour cela on va prendre en considération un mélange riche en combustible et en oxydant, en gardant la même concentration de la vapeur d'eau. Les concentrations sont de 47,5% pour le monoxyde de carbone, 37% pour l'oxygène et 3,5% pour la vapeur d'eau. La pression est de 1 atm et la température de mélange est de 300K. La figure.14 montre que le mélange s'auto enflamme que la paroi soit adiabatique ou non.

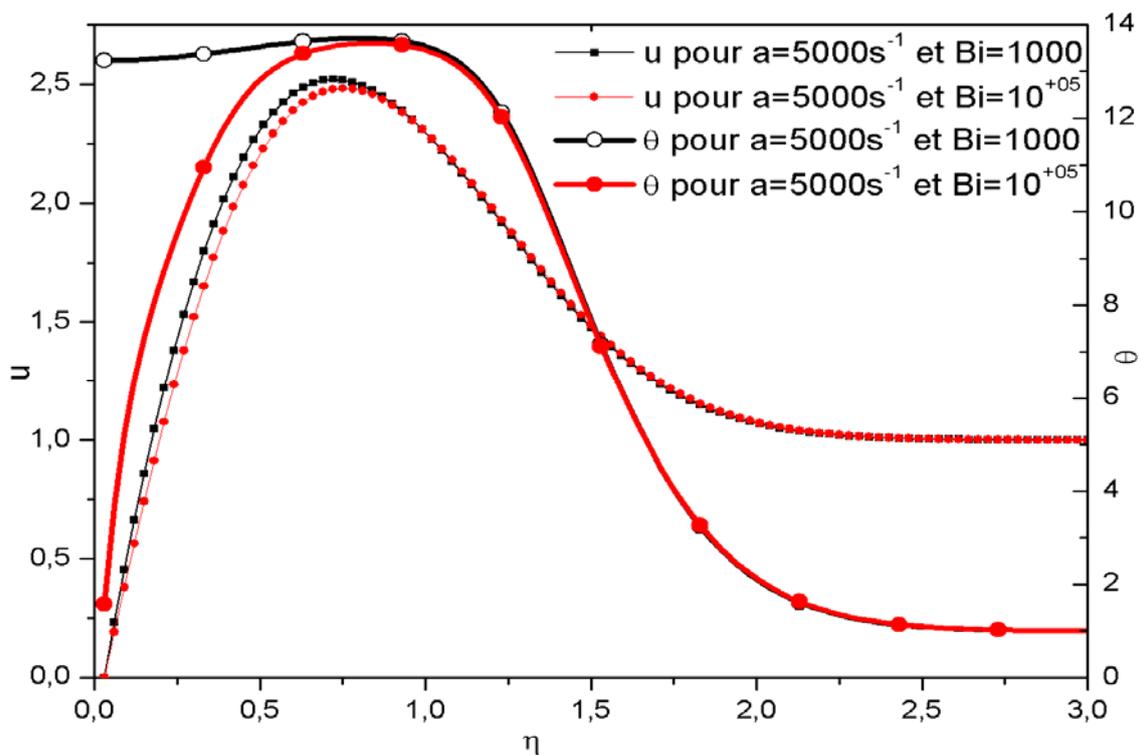


Figure.14 : Profils de vitesses et de températures de mélange (CO : 47.5%, O₂ :37% et H₂O :3.5%) pour deux nombres de Biot différents et un temps cinématique de 1/5000 sec.

Cela peut être expliqué à travers la théorie des collisions basée sur la théorie cinétique des gaz, un des fondements théoriques dans la cinétique chimique. Les réactions élémentaires de model cinétique chimique obéissent à la loi d'Arrhenius, dans laquelle la vitesse de réaction est proportionnelle au nombre de collisions efficaces par unités de temps, à travers le facteur pré-exponentiel qui correspond à la fréquence de collision. Ainsi, le fait d'augmenter les

concentrations du monoxyde de carbone et de l'oxygène, on augmentera la fréquence de collision moléculaire entre ces deux dernières molécules, par conséquent le taux de conversion du mélange va augmenter malgré la baisse de température du mélange (300K) et la flamme va se déclencher, contrairement au cas où le mélange est pauvre en monoxyde de carbone et en oxygène (CO : 27,5% et O₂:27%) pour le même temps cinématique d'écoulement ($1/a=5000$ sec), ceci, malgré que la température de mélange soit deux fois plus grande.

Conclusion et Perspectives

Conclusion et Perspectives

L'écoulement d'un jet plan laminaire à symétrie axiale d'un mélange (CO/O₂/H₂O) dans la zone de stagnation a été étudié via un modèle chimique réduit qui admet 9 éléments chimiques et trente réactions élémentaires en équilibre. Le problème dans cette configuration a été résolu par la méthode des différences finies. L'objectif de ce travail était de prévoir les profils de vitesse, de température, et des différents éléments chimiques le long du jet d'une part, d'autre part de comprendre l'effet de différents paramètres physiques et chimiques sur l'allumage et l'extinction de la flamme comme la température d'entrée du mélange, le temps cinématique de l'écoulement et le nombre Biot, ainsi que les concentrations massiques de différents éléments du mélange.

Cette étude nous a permis de conclure que, l'augmentation de la température d'entrée du mélange conduit à une amélioration du taux de réaction du mélange à la sortie du jet, et que l'allumage se produit antérieurement pour une haute température d'entrée par rapport aux faibles températures. Le temps caractéristique de l'écoulement a une importance cruciale dans l'allumage et l'extinction de la flamme. Ainsi, l'allumage ne se produit qu'à des niveaux élevés du temps cinématique de l'écoulement. Il est important de noter que l'effet de la température sur le taux de conversion est plus important que celui de la concentration.

Le nombre de Biot a une large influence sur le comportement du mélange en région d'arrêt. Pour un nombre de Biot très élevé, la perte de chaleur réduit le taux de réaction dans le mélange, et la surface atteint une température d'équilibre. Pour une surface adiabatique, la chaleur générée par la combustion du mélange est accumulée près de la paroi, le feedback de cette dernière en amont de l'écoulement améliore le taux de réaction et par conséquent le pic de température survient au niveau de la région d'arrêt. Les molécules de H₂O représentent une source de radicaux OH qui jouent un rôle important dans la combustion du monoxyde de carbone.

La présente étude nous a permis de conclure que l'allumage et l'extinction du mélange de monoxyde de carbone, d'oxygène et de vapeur d'eau dépend essentiellement de la température d'entrée, du temps cinématique de l'écoulement, du nombre de Biot et aussi des concentrations massiques. Une combinaison adéquate de tous ces paramètres va nous permettre de contrôler le comportement de ce mélange.

De futures études ayant pour objectif d'étendre le modèle en tenant compte d'autres conditions ; on peut par exemple élargir le mécanisme réactionnel présent, et l'améliorer par une étude réalisée sur un plus grand nombre d'éléments chimiques. Ceci permettrait de mieux comprendre le processus de combustion. Nous envisageons d'adapter la même configuration sur une surface catalytique et aussi d'appliquer ce modèle afin d'étudier la flamme prémélangée turbulente tombant sur une surface solide. Ces études doivent être confortées par un travail expérimental.

Annexes

Annexe A

I- Les équations gouvernantes du système

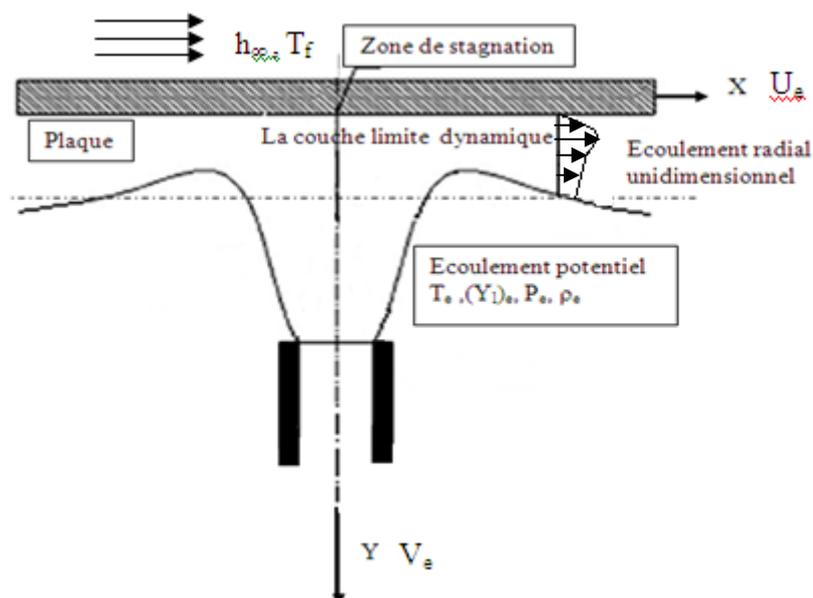


Figure.1 : Ecoulement en symétrie axiale en zone d'arrêt

Dans la région située près de la plaque et relativement éloignée du centre, l'écoulement est unidimensionnel et peut être approché par les équations de la couche limite. Les gradients dans la direction radiale sont négligeables par rapport aux gradients dans la direction axiale, les équations de Navier-Stokes en symétrie axiale deviennent comme suit :

$$\frac{1}{X} \frac{\partial}{\partial X} \left(X \frac{\partial}{\partial X} \right) \ll \frac{\partial^2}{\partial Y^2} \Rightarrow \begin{cases} \frac{\partial}{\partial X} (\rho XU) + \frac{\partial}{\partial Y} (\rho XV) = 0 \\ \rho \left(U \frac{\partial U}{\partial X} + V \frac{\partial V}{\partial Y} \right) = -\frac{\partial P}{\partial X} + \mu \frac{\partial^2 U}{\partial Y^2} \\ \frac{\partial P}{\partial Y} = 0 \\ \frac{\partial P}{\partial X} = -\rho_e U_e \frac{\partial U_e}{\partial X} \\ \rho C_p \left(U \frac{\partial T}{\partial X} + V \frac{\partial T}{\partial Y} \right) = k \frac{\partial^2 T}{\partial Y^2} - \sum_{l=1}^k h_l^0 \omega_l \\ \rho U \frac{\partial Y_l}{\partial X} + \rho V \frac{\partial Y_l}{\partial Y} = \frac{\partial}{\partial Y} \left(\rho D \frac{\partial Y_l}{\partial Y} \right) + \omega_l \end{cases}$$

Les équations constitutives sont: $\mu = C_\mu T$, $k = C_k T$; les termes $\sum_{l=1}^k h_l^0 \omega_l$ et ω_l sont

respectivement le terme de source chaleur et de masse.

Les propriétés du mélange (densité, pression et température) sont reliées par la loi des gaz parfaits :

$$P = \rho RT$$

Ici T représente la température du gaz et R la constant des gaz parfaits pour l'air

1.2. Les conditions aux limites :

- Les conditions aux limites pour l'équation de conservation de la quantité de mouvement sont :

$$\text{à : } Y = 0 \quad u = 0, v = 0$$

$$\text{Lorsque : } Y \rightarrow \infty \quad u = Ue = aX$$

Le coefficient 'a' représente une caractéristique de temps de l'écoulement convective ($1/a$). Sa valeur dépend de la géométrie de l'écoulement. Pour un jet axisymétrique placé à une distance appropriée de la surface (entre 1 et 3 diamètres), $a = V_j/d$. où d et V_j représentent respectivement l'épaisseur et la vitesse du jet. Pour un corps de révolution dans un écoulement uniforme, $a = U_i/Ra$. où U_i représente la vitesse de l'écoulement amont (en dehors de la région de stagnation) et Ra est le rayon de courbure du corps.

- Les conditions aux limites pour l'équation de conservation des éléments sont:

$$\text{à : } Y = 0, \frac{\partial Y_l}{\partial y} = 0$$

cette conditions est dérivées de l'hypothèse que la paroi solide est imperméable à toutes les espèces (aucune absorption ni génération des espèces sur la surface). Dans l'écoulement en dehors de la couche limite, les fractions de masse des espèces ont des valeurs connues, par conséquent :

$$\text{à : } Y \rightarrow \infty \quad Y_l = (Y_l)_e$$

- Pour l'équation de l'énergie, les conditions limites sont:

$$\text{à } Y = 0, k \left(\frac{dT}{dY} \right)_{Y=0} = h_\infty (T_w - T_f) \text{ (Condition mixte)}$$

En dehors de la couche limite la température du mélange a une valeur prescrite T_e

$$\text{à } Y \rightarrow \infty \quad T = T_e$$

Les équations de base peuvent être rendues adimensionnelles par l'introduction des grandeurs caractéristiques suivantes :

$$X = xL, \quad Y = yL, \quad U = U_e u, \quad V = V_e v, \quad \rho = \rho_e \bar{\rho}, \quad T = \theta T_e, \quad \mu = \mu_e \bar{\mu}, \quad \omega_l = \Omega_l a \rho$$

Où L, H, T_e, ρ_e sont respectivement les longueurs caractéristiques, la température caractéristique, et la densité caractéristique, L et H sont à définir ultérieurement.

On introduit les variables de similitude : $(x, y) \rightarrow (\xi, \eta)$, $\xi = Ax^4$, et $\eta = \beta \int_0^y \bar{\rho} dY$ [80]

(les expressions des paramètres A et β étant à déterminer au cours des calculs), et la fonction de courant $\psi(\xi, \eta) = g(\xi)F(\eta)$. L'équation de continuité est alors automatiquement

satisfaite:

$$\frac{\partial \psi}{\partial y} = \bar{\rho} x^2 u, \quad \frac{\partial \psi}{\partial x} = 2 \bar{\rho} x y v$$

Si on remplace les termes de différentiation dans les équations par :

$$\frac{\partial}{\partial x} = \xi_x \frac{\partial}{\partial \xi} + \eta_x \frac{\partial}{\partial \eta} = 4Ax^3 \frac{\partial}{\partial \xi} + \eta_x \frac{\partial}{\partial \eta}; \quad \frac{\partial}{\partial z} = \beta \bar{\rho} \frac{\partial}{\partial \eta}; \quad \frac{\partial^2}{\partial z^2} = \beta^2 \bar{\rho}^2 \frac{\partial^2 \bar{\rho}}{\partial \eta^2} + \beta^2 \bar{\rho} \frac{\partial^2}{\partial \eta^2}$$

On obtient pour les composantes u et v les expressions suivantes:

$$u(\eta) = \frac{1}{2} F', \quad v(\xi, \eta) = \frac{1}{2\beta \rho y} F + \frac{x \eta_x}{4\beta \rho y} F' \quad \text{Où « ' » dénote la différentiation par rapport à } \eta.$$

La fonction g , devient:

$$g(x) = \frac{x^2}{2\beta} = \frac{\sqrt{\xi}}{2\beta \sqrt{A}}$$

On se tourne maintenant vers l'équation de conservation de quantité de mouvement:

$$\left. \begin{aligned} \rho U \frac{\partial U}{\partial X} &= \rho_e \bar{\rho} a^2 L \left(x u^2 + \frac{x^2}{4} \eta_x F' F'' \right) \\ \rho V \frac{\partial U}{\partial Y} &= -\frac{1}{2} a^2 \rho_e \bar{\rho} L x F F'' - \frac{1}{4} a^2 \rho_e \bar{\rho} L x^2 \eta_x F' F'' \end{aligned} \right\} \Rightarrow \rho U \frac{\partial U}{\partial X} + \rho V \frac{\partial U}{\partial Z} = a^2 \rho_e \bar{\rho} L x \left(u^2 - \frac{F F''}{2} \right)$$

La pression est celle qui règne à l'extérieur de la couche limite. Elle vérifie l'équation de Navier Stokes appliquée à un écoulement potentiel

Pour le terme de diffusion $\frac{\partial}{\partial Y} \left(\mu \frac{\partial U}{\partial Y} \right)$ avec, $\mu = C_\mu T = C_\mu T_e \theta$ il devient: $\frac{a H r C_\mu T_e}{2L^2} \beta^2 \bar{\rho} F'''$

La pression à travers la couche limite est constante $\frac{\partial P}{\partial Y} = 0$, en utilisant l'équation des gaz

parfaits $P = \rho RT$, on obtient : $\rho_e RT_e = \rho RT \Rightarrow \bar{\rho} = \theta^{-1} \Rightarrow \frac{\partial \bar{\rho}}{\partial \eta} = -\frac{1}{\theta^2} \frac{\partial \theta}{\partial \eta} = -\frac{\theta'}{\theta^2}$

En rassemblant tous ces termes et en divisant par $\rho_e \bar{\rho} a^2 L r$, on obtient:

$u^2 - \frac{FF''}{2} = \theta + \frac{C_\mu T_e B^2}{2H^2 a \rho_e} F'''$, qui peut être réduit à: $\frac{FF''}{2} + F''' - u^2 + \theta = 0$, où le paramètre β est

égal à: $\beta = H \sqrt{\frac{2a\rho_e}{\mu_e}}$,

On note que $\sqrt{a \frac{\rho_e}{C_\mu T_e}} = \sqrt{a \frac{1}{\mu_e / \rho_e}} = \sqrt{\frac{a}{\nu_e}}$ avec ν_e la viscosité cinématique et $\sqrt{\frac{1}{a^{-1} \nu_e}}$ l'inverse

de la longueur de diffusion durant le temps caractéristique cinématique a^{-1} . $\sqrt{a^{-1} \nu_e}$ peut être

pris comme la longueur caractéristique H , dans ce cas $\beta = \sqrt{2}$. Concernant la deuxième longueur caractéristique L et le paramètre A , ils vont disparaître au cours des calculs et ils n'apparaissent pas dans les résultats finaux.

On suit les mêmes étapes de calcul pour les équations de conservation d'énergie et de masse.

Annexe B

La condition aux limites au niveau de la paroi pour l'équation de conservation d'énergie :

$$h_{\infty}(T_w - T_{\infty}) = k \frac{\partial T}{\partial Y} \Big|_{Y=0} \Rightarrow h_{\infty} T_e (\theta_w - \theta_{\infty}) = \frac{k T_e}{H} \frac{\partial \theta}{\partial Y} \Big|_{Y=0} \Rightarrow \frac{h_{\infty} H}{k} (\theta_w - \theta_{\infty}) = \bar{\rho} \beta \frac{\partial \theta}{\partial \eta} \Big|_{\eta=0}$$

$$\text{avec } k = C_k T_e \theta \text{ et } \rho \theta = 1 \Rightarrow \frac{h_{\infty} H}{C_k T_e \beta} (\theta_w - \theta_{\infty}) = \frac{\partial \theta}{\partial \eta} \Big|_{\eta=0}$$

En Introduisant l'expression de β : $\beta = H \sqrt{\frac{2a\rho_e}{C_{\mu} T_e}} = H \sqrt{\frac{2a}{v_e}}$, dans l'expression de la condition

$$\text{aux limites, on obtient: } \frac{h_{\infty}}{k_e} \sqrt{\frac{v_e}{2a}} (\theta_w - \theta_{\infty}) = \frac{\partial \theta}{\partial \eta} \Big|_{\eta=0} \Rightarrow Bi (\theta_w - \theta_{\infty}) = \frac{\partial \theta}{\partial \eta} \Big|_{\eta=0}$$

Où Bi est, le nombre de Biot modifié: $Bi = \frac{h_{\infty}}{k} \sqrt{\frac{v_e}{2a}}$ il est basé sur la longueur caractéristique de diffusion et représente le rapport de la résistance thermique de diffusion à la résistance thermique de convection de fluide externe.

Bibliographie

Bibliographie

- [1] G. Dixon-Lewis, “*Computer modeling of combustion reaction in flowing system with transport*”, Ch. 2 of “*Combustion Chemistry*”, (W. C. Gardiner, Jr. Ed.), Springer Verlag, New York, 1984.
- [2] W.C.Gardiner, Jr. (Ed.), “*Combustion Chemistry*”, Springer-Verlag, New York, 481. 1984
- [3] R. J. Kee, J. A. Miller, G. H. Evans, and G. Dixon-Lewis. Twenty-Second International Symposium on Combustion. The Combustion Institute, Pittsburgh, 1479. 1989
- [4] N. Peters, and B. Rogg, “*Reduced Kinetic Mechanisms for Applications in Combustion Systems*”, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg New York, 1993.
- [5] K. Seshadri, Twenty-Sixth Symposium (International) on Combustion, the Combustion Institute, Pittsburgh, 1996.
- [6] J. A. Miller, Twenty-Sixth Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute, Pittsburgh, 46 1. 1996
- [7] G. Patnaik, K. Kailasanath, and R. S. Sinkovits, Twenty-Sixth International Symposium on Combustion. The Combustion Institute, Pittsburgh, 899. 1996
- [8] R. M. Fristrom, “*Flame Structure and Processes*”, Oxford University Press, Inc., Oxford, New York, Toronto, 1995.
- [9] K. M. Leung, and R. P. Lindstedt, *Combust. Flame*, 102 129. 1995
- [10] B. Zuo, and V. D. Bulck, *Combust. Flame*, 113 615. 1998
- [11] B. Yang, and S. B. Pope, *Combust. Flame*, 112 85. 1998
- [12] J. W. Bozzelli, and A. M. Dean, *Int. J. Chem. Kinet.*, 27 1097. 1995
- [13] V. Dupont, and A. Williams, *Combust. Flame*, 114 103. 1998
- [14] C. K. Westbrook, and F. L. Dryer, Eighteenth Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute, Pittsburgh, 1981 749.
- [15] E. Oran, and J. Boris, *Progress in Energy and Combustion Science*, 7 1. 1981
- [16] J. Warnatz, Eighteenth Symposium (International) on Combustion. The Combustion Institute, Pittsburgh, 369. 1981
- [17] M. Evans, “*Current theoretical concepts of steady state flame propagation*”, *Chem. Rev.* 51 363. 1952
- [18] D. A. Frank-Kamenetzki, “*Diffusion and Heat Exchange in Chemical Kinetics*”, Princeton University Press, Princeton, 1955.
- [19] N. Semenov, “*Chemical Kinetics and Chain Reactions*”, Oxford, UK, 1935.

- [20] Ya. B. Zeldovich, "Combustion Theory", National Advisory Committee for 76 Aeronautics, Technical Report F.TS- 1226-LA, Air Material Command, Washington D.C. (Trans. From Russian), 1949.
- [21] J. O. Hirschfelder, C. F. Curtiss, and R. B. Bird, "*Molecular Theory of Gases and Liquids*", Wiley, New York, 1954.
- [22] D. B. Spalding, Phil. Trans. Roy. Soc. London, 249. 1956
- [23] D. B. Spalding, and P. L. Stephenson, Proc. Roy. Soc. London, 324. 1971
- [24] L. D. Smoot, W. Hecker, and G. Williams, Combust. Flame, 26 323. 1976
- [25] T. Turányi, L. Zalotai, S. Dóbbé, T. Bérces "*Effect of the uncertainty of kinetic and thermodynamic data on methane flame simulation results*" *Phys.Chem.Chem.Phys.*, **4**, 2568-2578. (2002)
- [26] Wagner, T. and Boyce, A.J. and Fallick, A.E. *Laser combustion analysis of delta S-34 of sulfosalt minerals: Determination of the fractionation systematics and some crystal-chemical considerations*. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 66 (16). pp. 2855-2863. ISSN 0016-7037.(2002)
- [27] Law, C. K., Sung, C. J., Wang, H., & Lu, T. F. "*Development of comprehensive detailed and reduced reaction mechanisms for combustion modelling*". *AIAA Journal*, 41:1629–1646. 2003
- [28] Frenklach, M., Packard, A., Seiler, P., & Feeley, R. "*Collaborative data processing in developing predictive models of complex reaction systems*". *International Journal of Chemical Kinetics*, 36:57–66. 2003
- [29] Simmie, J. M. "*Detailed chemical kinetic models for the combustion of hydrocarbon fuels*". *Progress in Energy & Combustion Science*, 29:599–634. 2003.
- [30] Paul, P. & Warnatz, J. "*A re-evaluation of the means used to calculate transport properties of reacting flows*". *Proceedings of the Combustion Institute*, 27:495–504. 1998
- [31] Yang, Z., Yang, B., & Wang, H. "*The influence of H-atom diffusion coefficient on laminar flame simulation*". *Proceedings of the second joint meeting of the U.S. Sections of the Combustion Institute*. Oakland, CA. 2001
- [32] Herbon, J. T., Hanson, R. K., Golden, D. M., & Bowman, C. T. "*A shock tube study of the enthalpy of formation of OH*". *Proceedings of the Combustion Institute*, 29:1201–1208. 2002

- [33] Hughes, K. J., Turanyi, T., Clague, A. R., & Pilling, M. J. “*Development and testing of a comprehensive chemical mechanism for the oxidation of methane*”. *International Journal of Chemical Kinetics*, 33:513–538. 2001
- [34] Frenklach, M., Wang, H., & Rabinowitz, M. J. “*Optimization and analysis of large chemical kinetic mechanisms using the solution mapping method – combustion of methane*”. *Progress in Energy & Combustion Science*, 18:47–73. 1992
- [35] Warnatz, J. “*Resolution of gas phase and surface combustion chemistry into elementary reactions*”. *Proceedings of the Combustion Institute*, 24:553–579. 1992
- [36] Peters, N. “*Laminar flamelet concepts in turbulent combustion*”. *Proceedings of the Combustion Institute*, 21:1231–1250. 1986.
- [37] Williams, F. A. “*Progress in knowledge of flamelet structure and extinction*”. *Progress in Energy & Combustion Science*, 26:657–682. 2000.
- [38] Law, C. K. & Sung, C. J. “*Structure, aerodynamics, and geometry of premixed flamelets*”. *Progress in Energy & Combustion Science*, 26:459–505. 2000
- [39] Fristrom, R. M. & Westenberg, A. A., *Flame Structure*. McGraw-Hill, Inc., New York. 1965.
- [40] Miller, J. A., Kee, R. J., & Westbrook, C. K. “*Chemical kinetics and combustion modelling*”. *Annual Review of Physical Chemistry*, 41:345–387. 1990
- [41] Kee, R. J., Coltrin, M. E., & Glarborg, P. “*Chemically Reacting Flow - Theory & Practice*”. John Wiley & Sons, Inc., New Jersey. 2003.
- [42] Law, C. K., Ishizuka, S., & Mizomoto, M., “*Lean-limit extinction of propane/air mixtures in the stagnation-point flow*”. *Proceedings of the Combustion Institute*, 18:1791–1798. 1981.
- [43] Egolfopoulos, F. N., Zhang, H., & Zhang, Z. “*Wall effects on the propagation and extinction of steady, strained, laminar premixed flames*”. *Combustion & Flame*, 109:237–252. 1997.
- [44] Vagelopoulos, C. M. & Egolfopoulos, F. N. “*Direct experimental determination of laminar flame speeds*”. *Proceedings of the Combustion Institute*, 27:513–519. 1998.
- [45] Dong, Y., Vagelopoulos, C. M., Spedding, G. R., & Egolfopoulos, F. N. “*Measurement of laminar flame speeds through digital particle image velocimetry: mixtures of methane*”, 2002.
- [46] Ishizuka, S. & Law, C. K. “*An experimental study on extinction and stability of stretched premixed flames*”. *Proceedings of the Combustion Institute*, 19:327–335. 1982.

- [47] Sato, J. “*Effects of Lewis number on extinction behaviour of premixed flames in stagnation flow*”. Proceedings of the Combustion Institute, 19:1541–1548. 1982.
- [48] Chao, B. H., Egolfopoulos, F. N., & Law, C. K. “*Structure and propagation of premixed flame in nozzle-generated counterflow*”. Combustion & Flame, 109:620–638. , 1997
- [49] Libby, P. A., Linan, A., & Williams, F. A. “*Strained premixed laminar flames with nonunity Lewis numbers*”. Combustion Science & Technology, 34:1–42. 1983.
- [50] Bradbury, L. J “*The impact of an axisymmetric jet onto a normal ground*”. Aero Quart, 23:141-147, 1972
- [51] Rubel, A. “*Computations of jet impingement on a flat surface*”. AIAA Journal, 18:168-175. 1980
- [52] Rubel, A “*Inviscid axisymmetric jet impingement with recalculating stagnation region*”. AIAA Journal, 21:351-357, 1983
- [53] Deshpande, M. D. & Vaishnav, R. N. “*Submerged laminar jet impingement on a plane*” Journal of Fluid Mechanics, 114:213–236, 1982
- [54] W.H. Giedt, L.L. Cobb, and E.J. Russ, “*Effect of Hydrogen Recombination on Turbulent Flow Heat Transfer*”, ASME Paper 60-WA-256, New York, 1960.
- [55] R. Conolly and R.M. Davies, “*A study of convective heat transfer from flames*”, Int. J. Heat Mass Trans., 15, 2155-2172, 1972.
- [56] M.A. Cappelli, and P.H. Paul, “*An investigation of diamond film deposition in a premixed oxyacetylene flame*”, J. Appl. Phys., 67(5), 2596-2602, 1990.
- [57] Houtman, C., Graves, D. B., & Jensen, K. F. “*CVD in stagnation point flow-an evaluation of the classical 1D-treatment*”. Journal of the Electrochemical Society, 133(5):961–970, 1986.
- [58] Goodwin, D. G. “*An open-source, extensible software suite for CVD process simulation*”. In Proc. of CVD XVI and Euro CVD Fourteen, Electrochemical. Society. Pages 155–162. 2003.
- [59] R.M. Rauenzahn, “*Analysis of Rock Mechanics and Gas Dynamics of Flame-Jet*” Thermal Spallation Drilling, Ph.D. thesis, Massachusetts Institute of Tech., Cambridge, MA, 1986.
- [60] J.E., Hustad, M., Jacobsen, and O.K. Sonju, “*Radiation and heat transfer in oil/propane jet diffusion flames*”, Inst. Chem. Eng. Symp. Series, 10(129), 657-663, 1992.
- [61] H.-Z. You, “*Investigation of fire impingement on a horizontal ceiling. 2. Impingement and ceiling-jet regions*”, Fire & Materials, 9(1), 46-56, 1985.

- [62] P.A. Eibeck, J.O. Keller, T.T. Bramlette, and D.J. Sailor, Pulse combustion: “*impinging jet heat transfer enhancement*”, Comb. Sci. Tech., 94, 147-165, 1993.
- [63] Smith, H. W., Schmitz, R. A., & Ladd, R. G. “*Combustion of a premixed system in stagnation flow*” I. theoretical. Combustion Science & Technology, 4:131–142. 1971
- [64] Mendes-Lopes, J. M. C. “*Influence of strain fields on flame propagation*”. Ph.D. thesis,, Cambridge University. 1983
- [65] Bergthorson, J. M., Goodwin, D. G., & Dimotakis, P. E. “*Particle streak velocimetry and CH laser-induced fluorescence diagnostics in strained, premixed, methane-air flames*”. Proceedings of the Combustion Institute, 30:1637–1644. 2005a
- [66] Schlichting, H., “Boundary Layer Theory”. McGraw-Hill, Inc. New York. 1960.
- [67] Kee, R. J., Miller, J. A., Evans, G. H., & Dixon-Lewis, G., “*A computational model of the structure and extinction of strained, opposed flow, premixed methane-air flames*”. Proceeding of the combustion institute, 22:1479-1494, 1988
- [68] G. Dixon-Lewis, “*Computer modeling of combustion reaction in flowing system with transport*”, Ch.2 of “Combustion Chemistry”, (W. C. Gardiner, Jr. Ed.), Springer Verlag, New York, 1984.
- [69] Deshpande, M. D. & Vaishnav, R. N., “*Submerged laminar jet impingement on a plane*”. Journal of Fluid Mechanics, 114:213–236. 1982.
- [70] Schach, W., “*Deflection of a circular fluid jet by a flat plate perpendicular to the flow direction*”. Ingenieur Archiv, 6:51–59. 1935
- [71] Phares, D. J., Smedley, G. T., & Flagan, R. C., “*The wall shear stress produced by the normal impingement of a jet on a flat surface*”. Journal of Fluid Mechanics. 418: 351–375. 2000
- [72] Xianchang Li, J. Leo Gaddis, Ting Wang, “*Multiple flow patterns and heat transfer in confined jet impingement*”, Int. J. Heat Fluid Flow.; 26:746-754. 2005
- [73] M.sibulkin, “*Heat transfers near the stagnation point of a body of revolution*”, J.Aeronaut. Sci.19; 570-571. 1952
- [74] Egolfopoulos, F. N., Zhang, H., & Zhang, Z. “*Wall effects on the propagation and extinction of steady, strained, laminar premixed flames*”. Combustion & Flame, 109:237–252. 1997.
- [75] Law, C. K., Ishizuka, S., & Mizomoto, M. “*Lean-limit extinction of propane/air mixtures in the stagnation-point flow*”. Proceedings of the Combustion Institute, 18:1791–1798. 1981.

- [76] Giovangigli, V. & Smooke, M. D. “*Application of continuation methods to plane premixed flames*”. *Combustion Science & Technology*, 87:241–256. 1992.
- [77] Davis, S. G., Quinard, J., & Searby, G., 2001. “*A numerical investigation of stretch effects in counterflow, premixed laminar flames*”. *Combustion Theory & Modelling*, 5:353–362.
- [78] Burr, M.L. Combustion products, In *Indoor Air Quality Handbook*, Spengler, J.D. Samet, J.M., and McCarthy, J.F., eds., McGraw-Hill, New York, chap. 29. 2000
- [79] Schlichting. *Boundary layer theory*. Eds McGraw-hill, 6th edition. Page 86.
- [80] Lees, L, *Jet propulsion* 1956; 26: 259-274
- [81] Hammoud.A, Souidi Ferhat, “*modeling and numerical simulation of premixed laminar flame of carbon monoxide / air mixture on a normal solid surface*”, 4Th International Conference on Thermal Engineering Theory and Applications, Abu Dhabi, UAE, January 12-13, 2009.
- [82] Hammoud. A, Souidi Ferhat, “*Modeling and Numerical simulation of laminar carbon monoxide/oxygen flame impinging on a normal solid surface* “ *Revue des Energies Renouvelables*, CDER, Numéro Spécial 2ème Conférence Internationale sur les Sciences de la Mécanique CISM'08 Oum El Bouaghi, 16 - 18 Novembre 2008.