

Ministère de l'Enseignement Supérieur
et de la Recherche Scientifique

Université Hassiba Benbouali Chlef



وزارة التعليم العالي والبحث العلمي

جامعة حسيبة بن بوعلي بالشلف

كلية العلوم وعلوم المهندس
قسم الهندسة الميكانيكية

Faculté des sciences et sciences de l'ingénieur
Département de génie mécanique

Mémoire de Magister

En Mécanique
Option : Simulation Mécanique

Prédiction des émissions polluantes issues d'un four industriel : Cas de la cimenterie de Chlef

Présenté par

Mr. Mokhtar Didouche Abdelkader

Devant le jury composé de :

A. BETTAHAR	Professeur	Président	U.H.B.C
M.N BOUAZIZ	M.C	Examineur	Université de Médea
A. ZAARAOUI	Docteur	Examineur	Université de Khemis-Miliana
L. LOUKARFI	Professeur	Encadreur	U.H.B.C
A. BENAROUS	M.A.C.C	Co-encadreur	U.H.B.C

Soutenu le 21/05/2008

Remerciements

Je tiens à exprimer ma reconnaissance à Messieurs Benamara et l'équipe jeune de la salle de contrôle pour m'avoir accueilli au sein de l'*ECDE* et ainsi de m'avoir fourni les informations et les données techniques pour réaliser ce travail.

Je remercie le professeur Loukarfi L. et Mr Benarous A. pour m'avoir fait confiance et pour avoir brillamment conduit ce mémoire. Votre expérience, votre disponibilité, votre implication et votre gentillesse ont été des atouts essentiels pour ce travail et pour mes projets d'avenir.

Mes remerciements vont également à tous les membres du jury pour avoir apporté un grand intérêt à cette étude. Merci aux Messieurs: Bouaziz M.N. et Zaaraoui A. d'avoir examiné cet mémoire, professeur Bettahar A. d'avoir présidé ce jury.

Bien sûr ces remerciements vont à toutes les personnes présentes ce jour de soutenance.

A toute ma famille

Table des matières

Nomenclature	1
Introduction générale	4

Chapitre 01 : Etude bibliographique

1. Bref aperçu historique sur l'évolution des fours :.....	6
2. Procédés et techniques de fabrication du ciment :	6
2.1. Origine des matières premières :.....	8
2.2. Stockage et préparation des matières premières:	8
2.2.1. Stockage des matières premières:	8
2.2.2. Broyage des matières premières:	9
2.2.3. Broyage des matières premières pour procédés en voie sèche:	9
2.2.4. Homogénéisation et stockage du cru ou de la pâte:	9
2.3. Combustible, stockage et préparation:	10
2.4. Cuisson du clinker ou clinkérisation:.....	11
2.4.1. Description du four de l' <i>ECDE</i> :	11
2.4.2. La chauffe du four:.....	12
2.4.3. Différents types de Fours rotatifs longs:	13
2.4.4. Gaz résiduaux des fours:	15
2.4.5. Refroidisseurs à clinker:	15
2.5. Broyage et stockage du ciment:	16
2.5.1. Stockage du clinker:.....	16
2.5.2. Broyage du ciment:	16
2.5.3. Pesage et dosage des matériaux broyés:	17
2.5.4. Broyage des additions minérales:	17
2.5.5. Stockage du ciment:	17
2.6. Conditionnement et expédition:	17
3. Emissions:	18
3.1. Analyse et mesure des NO_x :.....	18
3.2. Appareil et dispositif technique de l' <i>ECDE</i> :	19
4. Techniques de réduction des émissions des NO_x :.....	21
4.1. Mesures primaires de réduction des émissions des NO_x :.....	22
4.2. Refroidissement de la flamme:	23
4.3. Tuyères bas NO_x :	23
4.4. Combustion étagée:.....	23
4.5. Chauffe en milieu de four:	24
4.6. Minéralisation du clinker:	25
4.7. Réduction sélective non catalytique (<i>SNCR</i>):	25
4.8. Réduction catalytique sélective (<i>SCR</i>):.....	26
4.9. Recirculation des gaz d'échappement (<i>EGR</i>):	27

Chapitre 02 : Modélisation de l'écoulement réactif dans un milieu turbulent

1. Les équations des bilans moyens :	30
2. Modélisation de la turbulence :	33
2.1 Modèle $k - \varepsilon$ et ses variantes :	33
2.1.1. Traitement de la turbulence au voisinage des parois :	36
2.2. Modèle $k - \omega$ standard:	37
3. Modélisation de la chimie :	38
3.1. Les flammes de prémélange :	41
3.2. Les flammes de diffusion :	42
3.3. Modèle à chimie infiniment rapide et non infiniment rapide :	43
4. Modélisation de l'interaction chimie turbulence :	43
5. Formation des oxydes d'azote :	45
5.1. Mécanisme du NO thermique :	46
5.2. Mécanisme du NO précoce :	47
6. Calcul de la production de NO_x :	48
6.1. Vitesse de formation du NO thermique :	48
6.2. Vitesse de formation du NO précoce :	49
6.3. Calcul des vitesses moyennes de formation du NO :	49
7. Le modèle de rayonnement :	50

Chapitre 03 : Thermochimie de la combustion du méthane

1. Composition et caractéristiques du gaz naturel utilisé à l' <i>ECDE</i> :	54
1.1. Indice de Wobbe et pouvoir calorifique :	55
2. La combustion stoechiométrique du méthane :	56
3. Expression et calcul de la richesse :	56
4. Limites inférieure et supérieure d'inflammabilité :	57
5. Les différents types de modèles utilisés en combustion :	58
5.1 Les schémas globaux à une seule réaction :	58
5.2 Les schémas globaux à deux réactions :	60
5.3 Les schémas semi globaux à plusieurs étapes :	60
5.4 Les schémas quasi globaux :	60
5.6 Les mécanismes cinétiques détaillés :	61
5.6.1. Le mécanisme réactionnel : Principe	61
5.6.2. Equation de vitesse :	62
6. Composition des produits de combustion :	63
7. Les propriétés thermodynamique des produits de combustion :	64
8. Influence des conditions de combustion sur la Température de flamme adiabatique :	65
8.1. Influence du rapport de mélange :	65
8.2. Influence de la température de préchauffage :	66
8.3. Influence de la pression :	67
8.4. Influence de la dilution de l'oxygène dans l'air :	68
9. Le calcul thermochimique avec <i>CEA</i> :	69

Chapitre 04 : Simulation numérique

1. Procédure de Résolution sous <i>Fluent</i> :	73
2. Modèle géométrique :	74
3. Types de conditions aux limites :	74
3.1. Entrées de fluide :	75
3.2. Sortie de fluide :	75
3.4. Parois :	75
3.5. Plan de symétrie :	75
4. Les propriétés physiques du mélange :	76
5. Maillages:	77
6. Résultats et discussion :	79
Conclusion et perspectives :	94
Références bibliographiques :	96
ANNEXE B	107
ANNEXE A	100

Nomenclature

Lettres romaines

a	Coefficient d'absorption	m^{-1}
A_I	Facteur fréquence	
A, B	Constantes du model de Magnussen	
Abs	Absorbance	
$C_{\varepsilon 3}, C_{\mu}$	Constantes du modèle de turbulence	
c_{pi}	Capacité thermique massique à pression constante de l'espèce i	kJ/kg
D_{eff}	Coefficient de diffusion effectif	m^2/s
D_{hydr}	Diamètre hydraulique	m
E	Energie d'activation	kJ/m^2s
g'	Fluctuation d'un variable	
\tilde{g}	Valeur moyenne (Favre) d'un variable pondéré par la masse volumique	
\bar{g}	Valeur moyenne (Reynolds) d'un variable	
g	Variable quelconque	
h^0	Enthalpie de formation	kJ/kg
h	Enthalpie massique	kJ/kg
I'	Intensité adsorbée	
I	Intensité radiative	
I_{tur}	Intensité turbulente	
k^*	Constante de vitesse	
k	Énergie cinétique turbulente	m^2/s^2
l	Longueur de la cellule	m
L_i	Limite inférieur	
L_s	Limite supérieur	
L_{tur}	Dimension caractéristique	m
l_t	Longueur caractéristique turbulente	m
m_a	Masse d'air	kg
m_c	Masse de carburant	kg
m_i	Masse molaire d'espèce i	kg/mol
M_i	Poids moléculaire de l'espèce chimique "i"	$kg/kgmol$
n	Nombre total de l'espèce dans le mélange	
p	pression partielle du gaz	Pa
P	Pression du mélange	Pa
P	Correction de Pope	
pc		
q_{mc}	Débit-masse de carburant	kg/s
q_{ma}	Débit-masse d'air	kg/s
r	Rapport du mélange stoechiométrique	
R	Constante molaire des gaz	$J/mol.K$
S_L	Vitesse laminaire de propagation de la flamme	m/s

S_T	Vitesse turbulente de propagation de la flamme	m/s
S_{ij}	Tenseur de contraintes	
T	Température	K
t	Temps	s
u	Vitesse	m/s
v_t	Vitesse turbulente	m/s
$\widetilde{\omega}$	Taux de réaction de l'espèce chimique i	mol/s
W_i		
W	Indice de Wobbe	kWh/Nm^3
x_α	Vecteur position	
Y_i	Fraction massique de l'espèce chimique i	

Lettres grecques

α_l	Coefficient d'extinction moléculaire	
ϵ_j	Emissivité du j^{me} gaz	
δ_L	Epaisseur de la flamme	m
$\Phi(\vec{s}, \vec{s}')$	Fonction de phase	
ϕ	Variable thermochimique ou Richesse	
λ_t	Conductibilité thermique turbulente	w/mK
ε	Taux de dissipation de k	m^2/s^3
μ_t	Viscosité turbulente	kg/ms
μ	Viscosité dynamique	kg/ms
χ	Terme invariant	
Γ_t	Coefficient de diffusion massique turbulente	m^2/s
ν	Coefficient stochastique	
ω	Taux de dissipation spécifique	$1/s$
ω_{ij}	Tenseur de rotation	
\mathcal{G}	Coefficient stoechiométrique	
σ_s	Coefficient de diffusion	
σ	Constante de Stefan-Boltzmann	
τ_c	Temps caractéristique chimique	s
τ_t	Temps caractéristique turbulent	s
ρ	La masse volumique	kg/m^3

Indices

a	Air
c	Carburant
α	Composante d'une variable
P	Produit
Pc	Correction de Pope
re	Réactif

Abréviations

<i>CFD</i>	Computational Fluid Dynamics
<i>CEA</i>	Chemical Equilibrium and Applications
<i>DNS</i>	Direct numerical simulation
<i>DO</i>	Discrete Ordinates
<i>ECDE</i>	Entreprise des Ciments et ces Dérivées d'Echlef
<i>EGR</i>	Exhaust Gas Recirculation
<i>ETR</i>	Equation de transfert radiatif
<i>IR</i>	Infra Rouge
<i>LES</i>	Large eddy simulation
<i>OTDF</i>	Overall Temperature Distribution Factor
<i>PCI</i>	Pouvoir calorifique inférieur
<i>PCI_m</i>	Pouvoir calorifique inférieur massique
<i>PCS</i>	Pouvoir calorifique supérieur
<i>Pdf</i>	Probability density function
<i>RANS</i>	Reynolds average Navier-Stocks equations
<i>RSM</i>	Reynolds stress model
<i>SCR</i>	Selective Catalytic Reduction
<i>SNCR</i>	Selective Non Catalytic Reduction
<i>TFA</i>	Température de flamme adiabatique
<i>WSGGM</i>	Weighted Sum of Gray Gases Model

Nombres sans dimension

D_a	Nombre de Damkohler
Pr_t	Nombre de Prandlt turbulent
Re	Nombre de Reynolds
Sc_t	Nombre de Schmidt turbulent

Résumé

Les émissions polluantes sont comptées parmi les agents les plus actifs dans la création des pluies acides et la destruction de l'ozone atmosphérique, l'analyse et l'étude des mécanismes de production de ces émissions, permettent de contribuer au développement des techniques de réduction de la pollution et à la conception des systèmes de mesure et de contrôle dans le milieu industriel. Le présent travail consistera à modéliser avec des outils de *CFD* les émissions polluantes de type *NO_x* issues de la combustion du gaz naturel (*GN*) dans un foyer industriel destiné à la production du ciment. La combustion turbulente en flamme non prémélangée du mélange *GN/Air* sera analysée selon une approche par volumes finis pour résoudre les équations de l'écoulement réactif écrites en un moyen de Favre au sein du foyer supposé axisymétrique.

Une chimie à une étape est adoptée pour la description chimique de la flamme y compris un modèle de rayonnement approprié ; le modèle algébrique (*EDM*) et la dépendance stochastique de la température sont utilisées pour modéliser le taux de réaction dans les équations de transport des espèces et le terme source de *NO* respectivement. La fermeture du système est assurée par le modèle $k - \varepsilon$ standard avec une correction de Pope pour prendre en compte le taux d'épanouissement du jet oxydant puis par le modèle $k - \omega$ standard.

Un maillage uniforme structuré est au début créé pour obtenir une solution préliminaire, sur lequel on a utilisé une technique de raffinement adaptative basée sur le gradient de température pour atteindre la solution finale. Les effets de la température de préchauffage du jet secondaire sur la production des *NO_x* sont examinés et corrélés avec l'efficacité globale de la combustion.

La longueur de flamme visible et le taux du *NO ppm* estimées montrent un bon accord avec les valeurs mesurées localement, en plus, une bonne prédiction de la dynamique du jet a amélioré la localisation de la zone localement chauffée située près de la paroi (virole).

Abstract

Pollutant emissions are considered as the most active factors in the acid rains production and ozone destruction process, studies and analyses of their production mechanisms may improve pollution reduction techniques and contribute to the developments of the measures and control systems. The present work deals with a *CFD* modelling of the *NO* emissions issued from the natural gas (*NG*) combustion in an industrial furnace designed for cement production. The non premixed turbulent combustion of the *NG/Air* mixture will be analysed using a finite volume approach to solve the reacting flow equations written in a Favre averaging form on an axisymmetric model of the furnace.

A single step reaction will be adopted for the description of the flame chemistry including an appropriate radiation model; algebraic (*EDM*) expression and stochastic dependence on temperature are used to model the reaction rate in the species transport equation and the *NO* source term respectively. The system closure will be ensured by a $k - \varepsilon$ two equations model with a limited Pope correction to account for the spreading rate dynamics of the oxidant jet then a $k - \omega$.

A uniform structured mesh was initially created to get a preliminary solution, on which we used an adaptive refinement technique based on temperature gradient to reach the final solution. The co-flow jet configuration effects on the *NO* production are examined and correlated to the overall efficiency of the combustion process.

Estimated visible flame length and *NO ppm* rate shows good agreements with the local measured values, in addition, a well estimation of the jet dynamic has improved the localisation of the wall heating zones .

Introduction générale

Un des problèmes majeurs que doit affronter actuellement la population mondiale est celui de la pollution de l'air engendrée principalement dans les pays industrialisés. Cette pollution a un impact local, sur la santé de la population dans les zones urbaines, mais aussi global, sur la chimie de l'atmosphère pouvant aller jusqu'à des modifications climatiques. Une grande partie de l'énergie domestique et industrielle responsable de cette pollution est produite par des systèmes de combustion [1] qui émettent des espèces polluantes extrêmement toxiques telles que le monoxyde de carbone, les oxydes d'azote (NO_x), les suies et les Hydrocarbures Aromatiques Polycycliques (HAP). Ces deux dernières en particulier, essentiellement produites par la combustion de combustibles fossiles, ont été reconnues comme mutagènes voire cancérigènes pour les êtres vivants. D'autre part, les NO_x sont des irritants pulmonaires et jouent un rôle important dans la formation des brouillards de pollution, près de 67% des NO_x rejetés dans l'atmosphère sont d'origine anthropique [2], parmi lesquels des quantités énormes sont dus seulement à l'activité industrielle. Le coût global du retraitement des déchets, les investissements nécessaires pour la santé publique et l'incertitude sur l'impact climatique sont autant d'arguments justifiant pleinement le développement d'une industrie propre.

Des mesures ont déjà été prises pour réduire les rejets de polluants au niveau des ressources fixes (fours, chaudières, turbine à gaz...etc.) que ce soit au niveau africain avec la mise en vigueur de nouvelles normes depuis 2002, ou bien à l'échelle mondiale avec les accords de Kyoto signés en 2002. Ces préoccupations atteignent aussi directement l'opinion publique. Ainsi les systèmes moins polluants sont mieux perçus et font partie d'enjeux économiques importants. Dans le domaine de l'industrie du ciment, la réduction des émissions polluantes est devenue une priorité, afin de satisfaire les normes mondiales, mais aussi comme un sérieux argument de vente. Diverse techniques sont appliquées aux fours de cimenterie, selon les solutions imaginées par les ingénieurs praticiens, cependant, une solution ne peut être efficace que si elle est appuyée par une bonne analyse qualitative et quantitative.

Le présent travail constitue une approche numérique pour l'analyse de l'écoulement réactif turbulent au sein du four de la cimenterie de Chlef (ECDE), et pour la prédiction des

émissions polluantes (de type NO_x) issues de la combustion turbulente du gaz naturel, en flamme de diffusion.

Les principaux objectifs de ce travail sont:

- L'analyse du comportement de l'écoulement réactif dans le four de la cimenterie de Chlef.
- La prédiction fine des NO_x à la sortie d'un four industriel.
- Prédire la position de la zone de réchauffement local et la longueur de flamme visible.
- L'analyse de la relation entre l'efficacité de la combustion et le taux des émissions polluantes.

Le premier chapitre dresse une bibliographie sur les processus de production du ciment utilisés actuellement, et présente quelque technique de mesure et de réduction des émissions polluantes, une description détaillée du four de la cimenterie de *Chlef* est aussi incluse.

Le second chapitre donne une formulation des équations de l'écoulement réactif turbulent, une description des réactions d'oxydation du méthane dans l'air, et décrit les aspects de l'interaction entre la chimie et la turbulence.

Le troisième chapitre est une approche analytique de la thermochimie de combustion du méthane, les propriétés de transport moléculaire du mélange brûlé y sont évaluées, aussi, quelques caractéristiques fondamentales de la flamme de diffusion sont prédites.

Le dernier chapitre présente les divers cas de la simulation numérique de la combustion turbulente au sein du four industriel, une analyse paramétrique des effets de l'air secondaire y figure aussi, avec une discussion des résultats obtenus, et une comparaison avec les mesures effectuées sur le site de la cimenterie.

Notre travail s'achève avec une conclusion et un ensemble de perspectives.

Chapitre 01 : Etude bibliographique

1. Bref aperçu historique sur l'évolution des fours :

Depuis la plus haute antiquité, l'homme a cuit la pierre calcaire, ou le gypse pour l'employer ensuite comme liant dans les constructions. Cette cuisson s'est faite dans des fours qui étaient de simples cuves.

Les romains perfectionnent le procédé en remplaçant le calcaire par une marne calcaire qui, contenant de l'argile donnait après cuisson un liant hydraulique.

L'année 1756 où il démontre (*Laucien SMEATION*) que l'hydraulicité provient de l'argile dans le mélange qu'il cuisait à feu modéré dans des fours "BOUTEILLE".

Plus tard "ASPDIN" (1824) et "JOHNSON" (1844) perfectionnèrent la technique de leur confrère "SMEATION" ; il créa des fours où il s'efforça de rattraper une partie de la chaleur qui s'échappait dans les fumées pour sécher et préchauffer la matière à cuire et a fait passer les fumées sous des plateaux contenant la pâte à sécher, mais ces fours ont un inconvénient de discontinus, et de faible production et consommaient beaucoup.

En 1885 l'anglais "RANSOME" construit le premier four rotatif, sa longueur était de 05 mètres avec un diamètre de 0.45 m, chauffé au gaz, mais il ne put jamais le faire marcher, fusion très poussée, et le collage formait un bouchon sur le revêtement.

Et c'est en 1953, qu'une nouvelle invention a vu le jour pour réduire la consommation thermique des fours. Il s'agit des fours *HUMBILDT* avec préchauffeurs à suspension gazeuse. Dans ce type de four, les gaz chauds provenant de l'aval du four transmettent leur chaleur à une farine qui descend dans une série de cyclones disposés l'un au dessus l'autre à l'amont du four appelé four à 04 étages.

2. Procédés et techniques de fabrication du ciment :

La réaction chimique de base de la fabrication du ciment commence avec la décomposition du carbonate de calcium ($CaCO_3$) en chaux (oxyde de calcium, CaO) accompagnée d'un dégagement de gaz carbonique (CO_2), à environ $900^\circ C$. Ce processus appelé calcination est suivi de la cuisson du clinker ou clinkérisation pendant laquelle l'oxyde de calcium réagit à haute température (en général entre 1400 et $1500^\circ C$) avec la silice, l'alumine et l'oxyde ferreux pour former des silico-aluminates de calcium composant le clinker. Celui-ci est ensuite broyé et mélangé à du gypse et à d'autres constituants ce qui permet d'obtenir le ciment.

Il existe quatre grands procédés de fabrication du ciment : la voie sèche, semi-sèche, semi-humide et humide.

- Dans la voie sèche, ce qui est le cas de l'Entreprise du Ciment et ses Dérivées d'Echlef (ECDE), les matières premières broyées et séchées forment le cru ou farine qui a l'aspect d'une poudre fluide. Le cru est ensuite introduit dans le préchauffeur ou le précalcinateur du four ou plus rarement, dans un four tubulaire long en voie sèche.
- Dans la voie semi-sèche, la farine mélangée à de l'eau forme des granules qui sont introduits dans un préchauffeur à grilles situé en amont du four ou dans un four long équipé de croisillons.
- Dans la voie semi-humide, la pâte est d'abord débarrassée de son eau dans des filtre-presses. Le gâteau de filtre-pressé est ensuite extrudé sous forme de granules et introduit dans un préchauffeur à grilles ou directement dans un sécheur pour la fabrication du cru.
- Dans la voie humide, les matières premières (dont la teneur en humidité est souvent élevée) sont broyées dans l'eau pour former une pâte pouvant être pompée. Elle est ensuite introduite directement dans le four ou peut passer auparavant dans un sécheur.

La Figure 1.1 illustre le procédé de fabrication en deux voies sèche et humide.

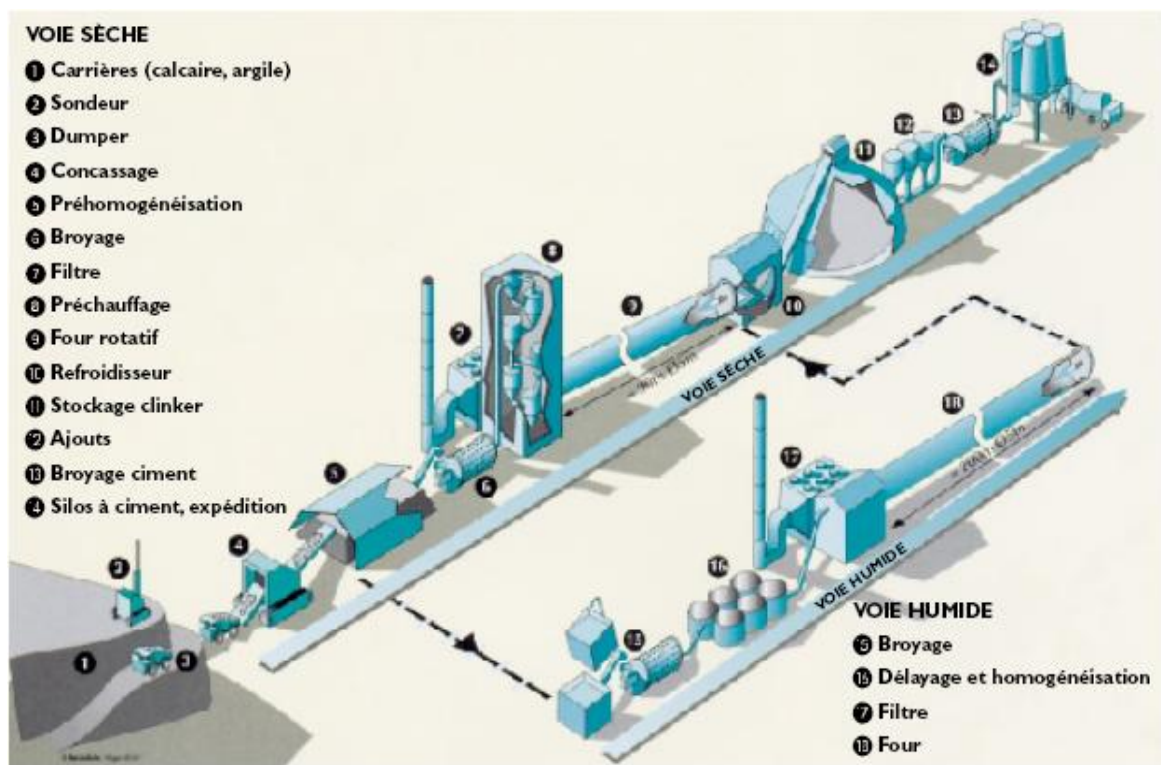


Figure 1.1 : Procédé de fabrication du ciment par deux voies sèche et humide [2]

Le choix du procédé dépend dans une large mesure de l'état des matières premières (sèches ou humides). Une grande partie de la production mondiale de clinker est toujours fabriquée en

voie humide. Cependant, en ALgérie, la totalité de la production de ciment est fabriquée en voie sèche en raison de la disponibilité des matières premières sèches. Les procédés humides consomment davantage d'énergie et sont donc plus coûteux. Les usines utilisant la voie semi-sèche se convertiront probablement aux technologies sèches à l'occasion d'une extension ou de travaux de modernisation importants.

Les opérations suivantes sont communes à tous les procédés :

- extraction des matières premières,
- stockage et préparation des matières premières,
- stockage et préparation des combustibles,
- cuisson du clinker,
- broyage et stockage du ciment,
- conditionnement et expédition.

2.1. Origine des matières premières :

La presque totalité des matières premières est extraite dans des mines ou des carrières, généralement à ciel ouvert. Les opérations nécessaires comportent : le forage dans la roche, l'abattage à l'explosif, l'excavation, le transport et le concassage.

Les principales matières premières (pierres calcaires, marnes crayeuses et schistes argileux ou argiles) sont extraites dans des carrières généralement proches de l'usine. Après un concassage primaire, les matières premières sont transportées vers l'usine où elles sont stockées et préparées.

2.2. Stockage et préparation des matières premières:

La préparation des matières premières est une opération très importante qui intervient avant la cuisson du cru dans le four car elle garantit que sa composition chimique est constante et elle permet d'obtenir une poudre de la finesse requise.

2.2.1. Stockage des matières premières:

L'utilisations de halls de stockage dépend des conditions climatiques et de la quantité de matière fine (farine ou cru) produite par l'installation de concassage. Pour le cas de l' (ECDE) possède d'une capacité de production de 3000 tonnes/jour, ces bâtiments peuvent contenir de 20000 à 40000 tonnes de matériaux.

La composition chimique des matières premières introduites dans le four doit être la plus homogène possible, ce qui est obtenu en contrôlant la charge dans le broyeur à cru. Si la

qualité des matériaux extraits des carrières est variable, il est possible de procéder à un pré-mélange en les disposant en couches successives selon la longueur ou la circonférence du hall de stockage et en les prélevant perpendiculairement à l'axe des couches. Quand la composition chimique des matériaux extraits est relativement homogène, des systèmes plus simples de stockage et de reprise sont suffisants.

Les matières premières utilisées en faibles quantités, (additions minérales par exemple), peuvent être stockées dans des silos ou dans des stockages souterrains.

2.2.2. Broyage des matières premières:

Le pesage et le dosage précis des matériaux introduits dans le broyeur sont importants car ils déterminent la constance de la composition chimique du cru, essentielle pour la stabilité de fonctionnement du four et pour l'obtention d'un ciment de qualité. Pesage et dosage jouent aussi un rôle important dans le rendement énergétique de l'installation de broyage. Le plus utilisé des équipements de pesage et de dosage des matières premières alimentant les installations de broyage est le tablier d'alimentation suivi par le tapis peseur.

2.2.3. Broyage des matières premières pour procédés en voie sèche:

Les matières premières, dans des proportions soigneusement contrôlées, sont broyées et homogénéisées de façon à former un mélange de composition chimique requise. Dans la voie sèche et semi-sèche, elles sont broyées en poudre fine et séchées principalement à l'aide des gaz chauds du four et/ou de l'air d'exhaure du refroidisseur. Un four auxiliaire peut être nécessaire pour fournir le complément de chaleur nécessaire si les matières premières contiennent une forte proportion d'humidité et pour le démarrage du four.

La finesse et la distribution granulométrique du produit issu du broyage des matières premières jouent un rôle important dans l'opération suivante, la cuisson. Le réglage des paramètres du séparateur utilisé pour trier le produit à la sortie du broyeur permet d'obtenir les valeurs requises. Les matériaux secs sont triés avec des séparateurs aérauliques.

2.2.4. Homogénéisation et stockage du cru ou de la pâte:

En sortant du broyeur, le cru ou la pâte doivent être malaxés et homogénéisés une nouvelle fois pour que le mélange acquière sa rhéologie optimale avant introduction dans les différents types de four. Le cru est homogénéisé et stocké dans des silos, la pâte dans des cuves ou dans des silos.

Des systèmes pneumatiques et mécaniques assurent le transport du cru dans les silos de stockage. Les convoyeurs mécaniques exigent en général un investissement élevé mais leur coût d'exploitation est très inférieur à celui des systèmes pneumatiques [4]. Le système le plus couramment utilisé actuellement associe des aéroglissières ou des convoyeurs à vis ou à chaîne à un tapis élévateur à godets.

2.3. Combustible, stockage et préparation:

Différents combustibles peuvent fournir la chaleur nécessaire au procédé. Les trois combustibles les plus utilisés dans les fours à clinker sont par ordre d'importance décroissante:

- le gaz naturel,
- le fuel (lourd),
- le charbon pulvérisé et le coke de pétrole.

Les cendres produites par la combustion de ces produits sont majoritairement formées de silice et d'alumine qui se combinent avec les matières premières et deviennent partie intégrante du clinker. Cela doit être pris en compte dans le calcul de la proportion de matières premières : il est donc souhaitable d'utiliser un combustible dont la teneur en cendres soit régulière et appropriée, ce qui ne signifie pas forcément faible.

Du fait de leur coût et sa disponibilité, le gaz naturel est le principal combustible utilisé dans l'industrie du ciment en Algérie. Mais le choix du combustible dépend de la situation locale (mines de charbon en exploitation dans un pays donné, par exemple). Cependant, comme la température dans les fours est très élevée et que les temps de séjour y sont longs, les fours ont une capacité de destruction des matières organiques considérable ce qui permet d'utiliser toute une variété de combustibles moins chers et en particulier différents types de déchets.

Pour minimiser les déperditions de chaleur, l'excès d'oxygène dans les fours est le plus faible possible. Le dosage du combustible doit donc être extrêmement uniforme et fiable et il doit se présenter sous une forme permettant une combustion facile et rapide. Tous les combustibles liquides et gazeux remplissent ces conditions. En cas d'utilisation de combustibles solides pulvérisés, les trémies, convoyeurs et distributeurs doivent être conçus en fonction de ces critères de combustion. La plus grande partie du combustible (65 à 85%) doit brûler facilement, le reste (15 à 35 %) peut être constitué de matériaux grossièrement concassés ou en morceaux.

2.4. Cuisson du clinker ou clinkérisation:

Il s'agit de l'opération la plus importante du procédé de fabrication en termes de potentiel d'émissions, de qualité et de coût du produit. Le cru (ou la pâte pour la voie humide) est introduit dans le four où il est séché, décarbonaté et clinkérisé pour donner le clinker, lequel est refroidi par de l'air avant d'être stocké.

Pendant la cuisson du clinker, la température de la charge du four doit impérativement être maintenue entre 1400 et 1500°C et celle des gaz à 2000°C environ. Le clinker doit également cuire en milieu oxydant ; c'est pourquoi un excès d'air est requis dans la zone de clinkérisation d'un four à ciment.

2.4.1. Description du four de l'ECDE:

Le four de l'ECDE est un four rotatif long en voie sèche a été mis au point à *Echlef* vers 1970 par une société japonaise (*KAWAZAKI*) en collaboration avec une société belge (*ACSEC*) pour les équipements électriques.

L'entreprise possède de deux énormes installations produisant près de 3000 tonnes par jour en voie sèche sont prévues pour préchauffer et clinkériser ; il suffit donc de les compléter avec une alimentation, précalcinateur et un refroidisseur. La partie aval du four long est équipée d'un capot de chauffe pour améliorer les échanges thermiques.

Le four rotatif se compose, comme le montre la Figure 1.2, d'un cylindre en acier dont le rapport longueur diamètre est 20:1. Il est supporté par quatre appuis et est incliné selon une pente de 4,5 % ; un mécanisme d'entraînement lui fait effectuer de 0,5 à 4,5 tours par minute autour de son axe. L'association rotation-pente fait lentement progresser la matière dans le four. Pour résister aux pointes de température très élevées, l'intérieur du four est revêtu de briques réfractaires.



Figure 1.2: Four rotatif long en voie sèche de l'ECDE

Selon le procédé utilisé, la consistance des matières premières, etc., il peut arriver que des matières s'accumulent de temps à autre sur la paroi interne du four. Ces concrétions en forme d'anneaux peuvent se former à l'entrée du four côté matière (anneaux de sulfate), près de la zone de clinkérisation (anneaux de clinker) ou à la sortie (anneaux de cendres). Les deux derniers types de concrétions peuvent se fragmenter brutalement ; dans ce cas, une grande quantité de matière de mauvaise qualité à haute température est délivrée à la sortie du four. Elle peut être retraitée ou doit être mise au rebut en tant que déchet de fabrication. Les cyclones et les grilles des fours équipés de préchauffeurs peuvent aussi faire l'objet d'une accumulation de matière qui peut conduire à des colmatages.

2.4.2. La chauffe du four:

Le combustible qui alimente le brûleur principal produit une flamme dont la température atteint 2000°C. Pour des raisons d'optimisation du procédé, la longueur de la flamme doit pouvoir être réglée dans certaines limites. Dans le brûleur à chauffe indirecte, l'air primaire (10 à 15 % de l'air de combustion) détermine la forme et la longueur de la flamme.

Brûleur :

Le brûleur (Figure 1.3) est constitué de deux parties:

- Partie hors le four qui comprend toutes les installations de service à savoir les pompes, les ventilateurs, les appareils de surveillance, les tuyaux de raccordement ...etc.

- La deuxième partie qui va être à l'intérieur du four et essentiellement un tuyau de 6 à 8 mètres de long, ayant un diamètre à nue de 400 mm et un diamètre avec réfractaire de 700 mm. Au bout de ce tuyau on va retrouver un disque support des buses d'injection qui peuvent être au nombre de 24 buses de divers diamètres. Les buses peuvent être éliminé par l'utilisation de buses pleines.

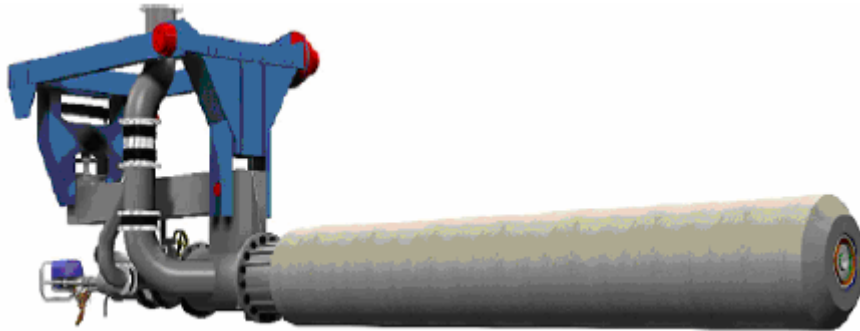


Figure 1.3: brûleur à gaz pour four rotatif [3].

Le brûleur utilisé dans le four rotatif de l'*ECDE* est de marque *DIOFLEX* fonctionne comme un injecteur, le carburant est injecté au centre et entouré par un jet d'air primaire, en plus un air secondaire est aspiré du refroidisseur dans le four de telle façon que la flamme dégagée se concentre autour de la ligne centrale du four.

2.4.3. Différents types de Fours rotatifs longs:

Il existe principalement trois types de four rotatif longs [4]:

a. Fours rotatifs avec préchauffeurs:

Les fours rotatifs avec préchauffeurs ont un rapport longueur/diamètre caractéristique compris entre 10 :1 et 17 :1. Ces fours se différencient selon la technique utilisée des préchauffeurs à grilles ou des préchauffeurs avec matière en suspension dans les gaz :

- Technologie des préchauffeurs à grilles (fours *Lepol*).
- Technologie des préchauffeurs à cyclones avec matière en suspension dans les gaz
- Technologie des préchauffeurs droits
- Technologie du préchauffeur à quatre étages de cyclones.

b. Fours rotatifs avec préchauffeur et précalcinateur (cas de L'*ECDE*):

La technique de la précalcination est à la disposition des industriels du ciment depuis 1970 environ. Dans ce procédé, la chauffe se fait en deux points. La combustion primaire du

combustible a lieu dans le foyer du four ; une chauffe secondaire se déroule dans une chambre de combustion spéciale située entre le four rotatif et le préchauffeur. Dans un four à précalcinateur type, 60 % de la totalité du combustible peut être brûlé dans cette zone. Cette énergie sert principalement à calciner le cru qui est déjà presque entièrement cuit quand il entre dans le four. De l'air chaud du refroidisseur est utilisé pour la combustion dans le calcinateur. La matière est à 870°C environ à la sortie du calcinateur.

La Figure 1.4 illustre l'application de ce procédé pour le four de l'*ECDE* avec préchauffeur à cyclones et précalcinateur. La précalcination augmente la capacité de production de clinker des fours rotatifs.



Figure 1.4: Four rotatif avec préchauffeur à cinq étages de cyclones et précalcinateur

Les fours avec préchauffeur à cinq étages de cyclones et précalcinateur sont considérés comme la technologie standard pour les usines neuves en voie sèche.

La taille d'une usine neuve dépend avant tout des prévisions de développement du marché. La capacité de production à l'*ECDE* est actuellement de 3000 tonnes/jour [5].

Les premiers précalcinateurs n'avaient que quatre étages de préchauffage ; la température des gaz résiduels et la consommation de combustible étaient donc plus élevées. Quand la teneur naturelle en humidité des matières premières est faible, le choix d'un préchauffeur à six étages peut être privilégié, en particulier quand il est associé à un filtre à manches.

Quand les apports d'éléments en circulation sont trop élevés, il faut équiper les fours d'une canalisation de dérivation des gaz pour leur permettre de fonctionner sans s'arrêter. Cependant, comme les caractéristiques des gaz sont variables, une dérivation sur un four à précalcinateur est bien plus efficace que sur un four simplement équipé d'un préchauffeur.

Bien que le cru soit déjà calciné de 75 à 95 % quand il entre dans le four, la plupart des fours à précalcinateur sont encore des fours rotatifs comportant une zone de calcination, c'est-à-dire qu'ils ont un rapport L/D compris entre 13:1 et 16:1 comme les fours simplement équipés d'un préchauffeur.

c. Fours verticaux:

Il existe quelques fours verticaux de fabrication de ciment en Europe. Ils se composent d'un cylindre vertical de 2 à 3 m de diamètre et de 8 à 10 m de haut revêtu d'un matériau réfractaire. Ils sont alimentés à leur partie supérieure par des granules de cru et par des granules de coke ou de charbon. La matière à cuire traverse une zone de clinkérisation de faible longueur située dans la partie haute légèrement évasée du four. Elle est ensuite refroidie par l'air de combustion qui provient de la base du four et sort en partie inférieure du four sur une grille de défournement, sous la forme de clinker.

Les fours verticaux produisent moins de 300 tonnes de clinker par jour. Ils ne sont rentables que pour les petites unités de production ce qui explique que leur nombre diminue.

2.4.4. Gaz résiduaire des fours:

Dans tous les fours, les gaz résiduaire traversent un système de dépoussiérage (filtre électrostatique ou filtre à manches) avant d'être envoyés vers la cheminée principale.

Dans la voie sèche, la température des gaz peut être relativement haute et cette chaleur peut être réutilisée dans le broyeur à cru quand il est en marche (fonctionnement compound). Quand il est arrêté (fonctionnement direct), les gaz passent en général dans une tour de conditionnement où ils sont refroidis par un brouillard d'eau avant de passer dans le collecteur de poussières, à la fois pour réduire leur volume et pour améliorer leur aptitude à la séparation.

2.4.5. Refroidisseurs à clinker:

Le refroidisseur à clinker fait partie intégrante du four et a une influence déterminante sur les performances et l'économie de l'installation de préparation à hautes températures. Sa fonction est double : récupérer le maximum de chaleur dans le clinker chaud (1450°C) pour la

recycler dans le procédé et abaisser la température du clinker à un niveau compatible avec le bon fonctionnement des équipements aval.

La chaleur est récupérée en préchauffant l'air utilisé pour la combustion principale et la combustion secondaire au plus près de la limite thermodynamique. Ceci est rendu difficile par les températures élevées, le très haut pouvoir abrasif du clinker et la granulométrie très variée. En refroidissant le clinker rapidement, on fige sa composition minéralogique ce qui augmente son aptitude au broyage et optimise la réactivité du ciment.

Il existe deux grands types de refroidisseurs : rotatifs et à grille, ce dernier est pratiquement le cas de l'*ECDE*.

2.5. Broyage et stockage du ciment:

2.5.1. Stockage du clinker:

Le clinker et les autres constituants du ciment sont stockés dans des silos ou dans des hangars fermés. Si les stocks sont très importants, ils peuvent être entreposés à l'extérieur à condition de prendre toutes les précautions nécessaires pour éviter l'envol de poussières.

Les types de stockage du clinker les plus courants sont les suivants :

2.5.2. Broyage du ciment:

Le ciment Portland est obtenu par broyage et mélange de clinker et de sulfates comme le gypse et l'anhydrite. Les ciments composés contiennent d'autres constituants comme du laitier granulé de haut fourneau, des pouzzolanes naturelles ou artificielles, des calcaires ou des fillers inertes. Ces constituants sont broyés avec le clinker ou doivent être séchés et broyés séparément (les stations de broyage peuvent être implantées ailleurs que sur le site de production du clinker).

Le type de ciment à fabriquer détermine le choix du procédé et celui de l'installation de broyage. L'aptitude au broyage, l'humidité et le comportement à l'abrasion des constituants du type de ciment fabriqué sont tous particulièrement importants.

Les stations de broyage fonctionnent généralement en circuit fermé c'est-à-dire qu'elles peuvent séparer le ciment présentant le niveau de finesse requis et renvoyer le ciment insuffisamment broyé dans le broyeur.

Quant à l'*ECDE*, dispose d'un broyeur vertical à galets repose sur l'action de 4 galets montés sur des bras articulés et se déplaçant sur une table ou dans un bol de broyage horizontaux.

2.5.3. Pesage et dosage des matériaux broyés:

La précision et la fiabilité du pesage et du dosage des matériaux introduits dans le broyeur sont déterminantes pour le maintien d'un bon rendement énergétique de l'atelier de broyage. De ce point de vue, le tapis d'alimentation peseur est l'équipement le plus important pour l'alimentation de la station de broyage.

2.5.4. Broyage des additions minérales:

Les additions minérales sont généralement broyées avec le gypse et le clinker. La décision de les broyer séparément dépend des facteurs suivants :

- du pourcentage d'additions minérales dans le produit final et dans la production de ciment dans son ensemble,
- de la disponibilité d'un second broyeur,
- de la différence de broyabilité entre le clinker et les additions minérales,
- de l'humidité des additions minérales.

En cas de nécessiter, les gaz qui s'échappent du four, l'air d'exhaure du refroidisseur (ou les deux) ou bien encore une source indépendante de gaz chauds peut servir au séchage préalable des additions minérales.

2.5.5. Stockage du ciment:

Des systèmes de transport mécaniques et pneumatiques peuvent être utilisés pour acheminer le ciment jusqu'aux silos de stockage. En règle générale, les premiers exigent des investissements plus importants que les seconds mais leur coût d'exploitation est bien inférieur [6]. Le système de transport actuellement le plus courant combine le transport pneumatique et des transporteurs à vis sans fin ou à chaînes avec un élévateur à godets.

Les différents types de ciments sont stockés dans des silos différents mais il faut souvent plusieurs silos pour stocker un type donné de ciment. Cependant grâce aux nouvelles conceptions, il devient possible de stocker des ciments différents dans un même silo.

De l'air comprimé injecté par des caissons situés en partie basse du silo permet d'initier et de réaliser l'extraction du ciment.

2.6. Conditionnement et expédition:

Le ciment est chargé directement en vrac dans des camions citernes, des wagons ou envoyé dans un atelier d'ensachage et de séchage

3. Emissions:

La directive *IPPC* (Prévention et réduction intégrées de la pollution) contient la liste générale des principaux polluants atmosphériques à prendre en compte pour fixer les valeurs limites des émissions. Les principaux polluants concernant la fabrication du ciment sont :

- les oxydes d'azote (NO_x) et autres composés azotés,
- le dioxyde de soufre (SO_2) et autres composés soufrés,
- les poussières.

Le premier polluant (NO_x) constitue le cœur de notre préoccupation dont on présente par la suite leurs techniques d'analyse et de mesure ainsi leurs techniques de réduction qui sont disponibles dans le domaine des cimenteries.

Les polluants suivants, cités dans cette liste, posent également problème dans le cadre de la fabrication du ciment :

- le monoxyde de carbone (CO),
- les composés organiques volatils (COV).
- les dioxines et les furanes ($PCDD$ et $PCDF$),
- les métaux et leurs composés,
- l'acide fluorhydrique HF ,
- l'acide chlorhydrique HCl ,
- le dioxyde de carbone CO_2 .

Enfin, les déchets, le bruit et les odeurs sont d'autres émissions dont l'effet est normalement faible et/ou local.

3.1. Analyse et mesure des NO_x :

Il existe plusieurs méthodes pour l'analyse et la mesure des NO_x . Ces méthodes ne font pas l'objet de notre travail et le lecteur soucieux pour plus de détaille pourra se référer à la littérature correspondante [7]. Parmi ces méthodes on cite les plus couramment utilisées :

- **La chimiluminescence:**

La principale méthode utilisée pour la mesure de NO_2 est basée sur la chimiluminescence : nous savons que NO réagit avec l'ozone pour donner NO_2 en émettant des photons. En mettant l'échantillon (contenant NO et NO_2 notamment) à étudier en présence d' O_3 en excès, la quantité de lumière émise est proportionnelle à la concentration en NO seulement. Parallèlement, on mesure la concentration totale en NO_x par un procédé analogue.

On en déduit finalement NO et NO_2 par comparaison des deux mesures.

- **Méthodes spectrométriques:**

Ces méthodes sont actuellement parmi les plus employées. Comme la chimiluminescence elles permettent d'étudier des échantillons de concentration de l'ordre de 1000 *ppm*.

- **Méthodes conductimétriques ; réactions avec les oxydes métalliques:**

Cette méthode est relativement récente et possède également une précision relativement bonne (jusqu'à 1000 *ppm*). Cette méthode est basée sur les propriétés semi-conductrices de certains oxydes métalliques dont la conductivité électrique varie en fonction de la quantité de gaz chimisorbé à la surface.

- **Méthodes électrochimiques:**

Ces méthodes reposent sur le calcul d'un courant, circulant entre deux électrodes, créé par une réaction d'oxydoréduction.

- **Méthode chimique:**

Cette méthode repose sur le principe de coloration du milieu suite à une réaction entre une solution absorbante et le gaz à étudier. Dans le cas des NO_x on utilise la méthode de *Saltzman* qui repose sur la formation d'un sel de diazonium par barbotage de NO_2 dans une solution d'amine aromatique. Après formation et développement du colorant azoïque rose violacé, on fait une lecture colorimétrique sur un spectrophotomètre.

3.2. Appareil et dispositif technique de l'ECDE:

Une sonde de prélèvement des gaz à mesurés est placée en amont du four équipée d'un système de filtrage et un mécanisme de lubrification pour protéger la sonde contre les hautes températures qui règnent à la sortie du four.

Pour l'analyse et la mesure des gaz, l'ECDE utilise un dispositif (*ULTRAMAT 23*) de mark *SIEMENS* (Figure 1.5) permet la mesure simultanée de max. 4 composants gazeux : trois gaz actifs au maximum dans les infrarouges comme par exemple : CO , CO_2 , NO , SO_2 , CH_4 et en plus l' O_2 grâce à une cellule de mesure à oxygène.

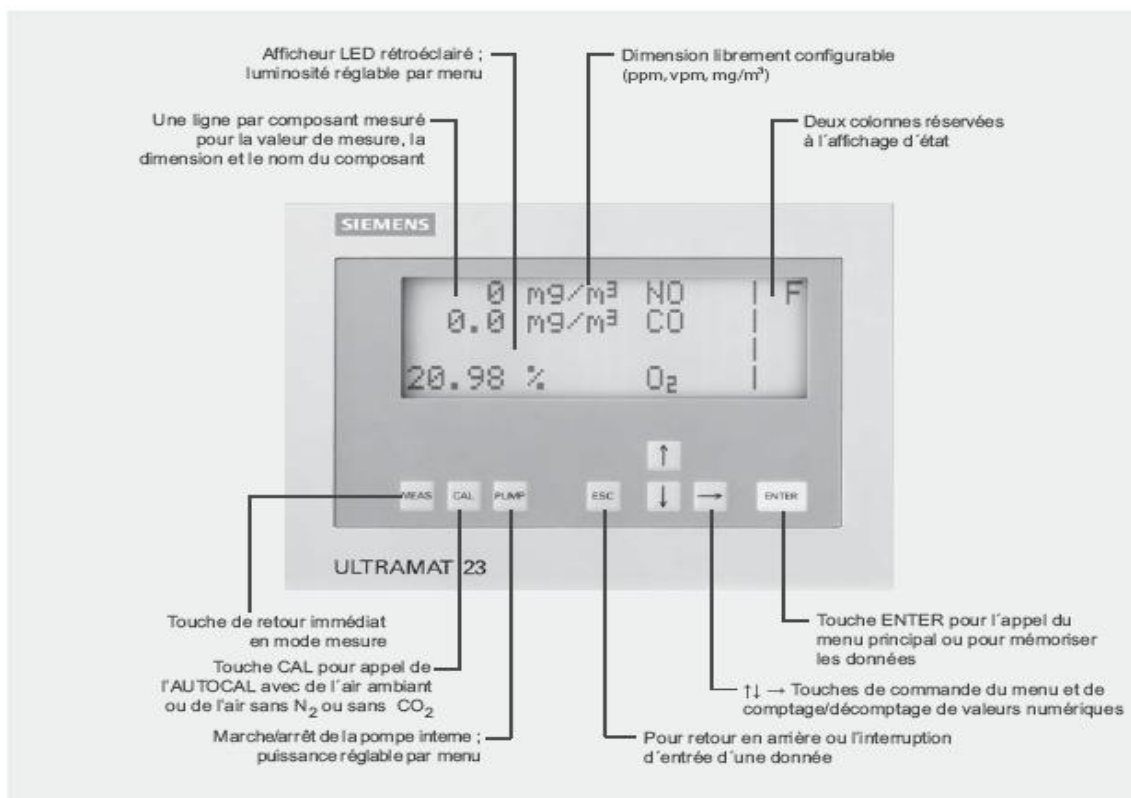


Figure 1.5: Analyseur *ULTRAMAT 23*, clavier à membrane et afficheur graphique [8].

ULTRAMAT 23 utilise la méthode spectrométrique qui repose sur le principe d'absorption de rayonnements infrarouge non dispersifs par les molécules hétéroatomiques à des longueurs d'ondes précises [8]. La loi de *Beer-Lambert* donne l'intensité adsorbée en fonction du nombre de molécules sur le trajet du faisceau laser.

Loi de *Beer-Lambert*:

$$I' = I_o \exp(-\alpha_1 lc) \quad (1)$$

α_1 : coefficient d'extinction moléculaire

Ce qui donne:

$$Abs = a.p.l \quad (2)$$

l : longueur de la cellule

a : coefficient d'absorbance

Abs : absorbance

p : pression partielle du gaz

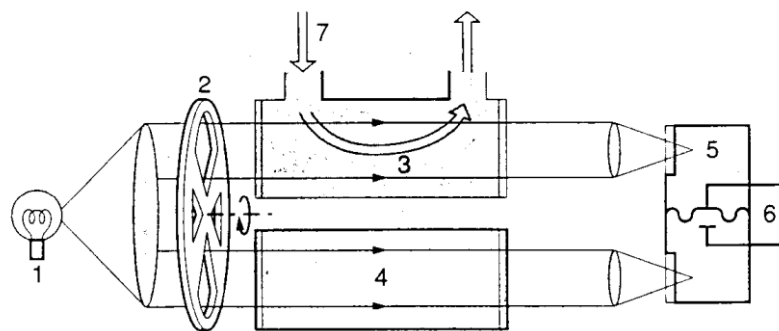
Avec :

$$\alpha_1 = ap/(c \times 0.4343) \quad (3)$$

L'absorbance est proportionnelle au chemin optique et à la concentration en gaz. Les longueurs d'onde d'absorption des NO_x sont: $5.26 \mu m$ pour NO et $8.06 \mu m$ pour NO_2 .

Un analyseur 'IR non dispersif' (Figure 1.6) est constitué de deux cuves parallèles, l'un étant la cellule de référence remplie d'un gaz neutre, en général N_2 , l'autre la cellule d'analyse remplie des NO_x . Deux faisceaux IR traversent ces cellules où il n'est absorbé que dans la cellule d'analyse. Un récepteur constitué de deux compartiments, rempli du gaz à analyser, absorbe l'énergie résiduelle. Ceci provoque un échauffement du gaz de chaque compartiment ce qui se traduit par une pression différentielle mesurée par un amplificateur et traduite en concentration.

A ce système s'ajoute un 'chopper' à l'entrée du dispositif, qui permet de créer un signal périodique en obturant les faisceaux. Le signal périodique est plus facile à traiter qu'un signal continu. Les cellules mesurent de quelques mm à $300mm$. Il est possible d'obtenir des trajets de plusieurs mètres à l'aide de cuves à réflexion multiples.



1. Lampe infrarouge - 2. Obturateur tournant "chopper" - 3. Cellule d'analyse
4. Cellule de référence - 5. Détecteur rempli avec le composé à mesurer
6. Condensateur variable - 7. Gaz à analyser

Figure 1.6: Analyseur par absorption IR non dispersif [7]

4. Techniques de réduction des émissions des NO_x :

Le Tableau 1.1 donne une vue d'ensemble des techniques de réduction des émissions des NO_x liées à la fabrication du ciment. Les Niveaux d'émission indiqués exprimé en moyennes journalières, sur gaz secs ($273 K$, $101,3 kPa$ et $10 \% O_2$) et kg/tonne de clinker sur la base de $2000 m^3$ /tonne de clinker

Technique	Applicabilité aux différents types de four	Efficacité de la réduction	Niveaux d'émission indiqués	
			mg/m ³ ¹	kg/tonne ²
Refroidissement de la flamme	Tous	0-50 %	400-	0.8-
Brûleur bas NO_x	Tous	0-30 %		
Combustion étagée	Précalcinateur	10-50 %	<500- 1000	<1.0-2.0
	Préchauffeur			
Chauffe en milieu de four	Longs	20-40 %	Pas d'info.	-
Clinker minéralisé	Tous	10-15 %	Pas d'info.	-
<i>SNCR</i>	Préchauffeur + précalcinateur	10-85 %	200-800	0.4-1.6
<i>SCR</i> – données provenant uniquement d'installations pilotes	Potentiellement applicable à tous les fours	85-95 %	100-200	0.2-0.4

Tableau 1.1: Techniques de réduction des NO_x [4].

4.1. Mesures primaires de réduction des émissions des NO_x :

De nombreuses cimenteries ont pris des mesures d'optimisation primaires générales (régulation de la conduite, amélioration de la technique de chauffe, optimisation des liaisons des refroidisseurs et de la sélection des combustibles) qui permettent également de réduire les émissions des NO_x . Certains fours modernes bien optimisés, équipés de préchauffeurs et de préchauffeurs/précalcinateurs, parviennent à abaisser le niveau de leurs émissions des NO_x au-dessous de 500 mg/m³ uniquement grâce à des mesures primaires ou en les associant à la combustion étagée [4]. La qualité des matières premières (aptitude à la cuisson du cru) et la configuration du four peuvent constituer des obstacles pour parvenir à ce niveau de réduction.

4.2. Refroidissement de la flamme:

L'addition d'eau au combustible ou directement dans la flamme abaisse la température et augmente la concentration en radicaux hydroxyles ce qui peut avoir un effet positif sur la réduction des NO_x dans la zone de clinkérisation car certains rapports signalent que des réductions de 0 à 50 % ont ainsi été obtenues. L'évaporation de l'eau nécessite un apport de chaleur complémentaire, ce qui provoque de nouvelles émissions de CO_2 (de 0,1 à 1,5 %) qui restent cependant très faibles par rapport à la totalité des émissions de CO_2 du four [2] L'injection d'eau peut perturber la marche du four.

4.3. Tuyères bas NO_x :

La configuration des brûleurs bas NO_x varie dans les détails mais pour l'essentiel, le gaz (combustible) et l'air sont injectés dans le four par des conduites concentriques. La proportion d'air primaire ne représente plus que 6 à 10 % de ce qui est nécessaire dans une combustion stœchiométrique (en règle générale, 20 à 25 % dans des brûleurs classiques). De l'air axial est injecté à grande vitesse dans la conduite extérieure. Le gaz peut être injecté par la conduite centrale ou par la conduite intermédiaire. Une troisième conduite sert à injecter un flux d'air tourbillonnaire (*Swirl*) mis en mouvement par des aubes situées à la sortie ou avant la sortie de la cane d'alimentation en combustible.

Cette configuration de brûleur provoque une ignition très rapide, en particulier des composés volatils du combustible dans une atmosphère appauvrie en oxygène, ce qui tend à réduire la formation des NO_x . Dans certaines installations bien conçues, des réductions de 30 % du niveau des émissions des NO_x ont été obtenues [9]. Mais l'utilisation de brûleurs bas NO_x n'est pas toujours suivie d'une réduction des émissions. Ce type de brûleurs peut être monté sur tous les fours rotatifs, dans le four comme dans le précalcinateur ; ils ont permis d'obtenir des niveaux d'émission de 600 à 1000 mg/Nm³ [10].

4.4. Combustion étagée:

La combustion étagée est utilisée dans les fours à ciment à plusieurs étages de combustion. Son application est généralement associée à l'utilisation de précalcinateurs spécialement conçus à cet effet. Le premier étage de la combustion est le four rotatif où les conditions de cuisson du clinker sont optimales. Le deuxième étage est un brûleur situé à l'entrée du four ; il crée une atmosphère réductrice qui décompose une partie des oxydes d'azote formés dans la zone de clinkérisation. La température élevée de cette zone favorise la reconversion des NO_x

en azote élémentaire. Au troisième étage, le combustible est introduit dans le calcinateur avec une certaine quantité d'air tertiaire ce qui crée là aussi une atmosphère réductrice. Ce procédé diminue la formation des NO_x combustibles et les échappées des NO_x à l'extérieur du four. Au quatrième et dernier étage de combustion, le reste d'air tertiaire est introduit dans l'installation en tant qu'air final et utilisé pour la combustion résiduelle [10].

Les calcinateurs actuels se différencient principalement par l'emplacement de l'arrivée de combustible, le mode d'alimentation en combustible, en cru et en air tertiaire et par leur configuration géométrique [10].

La technique de la combustion étagée ne peut en général être utilisée que dans les fours équipés d'un précalcinateur. Les installations de préchauffage avec cyclones mais sans précalcinateur exigent des aménagements importants. Si cela ne peut s'accompagner d'une augmentation de la capacité de production, la solution proposée par les fabricants consiste à installer une 'petite' conduite d'alimentation en air tertiaire et un calcinateur. Dans ce cas, seule une faible proportion (10 à 25 %) de la quantité totale de chaleur que le four doit fournir passe dans le calcinateur mais cela suffit pour créer une zone réductrice permettant la décomposition des oxydes d'azote [4].

L'utilisation de combustible solides en morceaux (pneus usagés par exemple) est une variante possible de la technique de la combustion étagée car ce type de combustible crée un milieu réducteur en brûlant. Dans les fours à précalcinateur/préchauffeur ce type de combustible, qui selon les études aurait un effet positif sur la réduction des NO_x , peut être introduit à l'entrée du four ou dans le précalcinateur. Il est cependant très difficile de créer une atmosphère réductrice contrôlée en brûlant des combustibles en morceaux. [2]

4.5. Chauffe en milieu de four:

Dans les fours longs en voie humide et sèche, la création d'une zone réductrice par la combustion de combustibles en morceaux peut diminuer les émissions des NO_x . Comme il n'existe pas normalement de zone de température à 900 ou 1000°C dans les fours longs, des systèmes de chauffe ont été aménagés en milieu de four pour permettre l'incinération des déchets qui ne peuvent être brûlés par le brûleur primaire, comme par exemple les pneus. [2]

Des considérations de conception mécanique font que le combustible ne peut être injecté que par intermittence, à chaque rotation du four. Pour maintenir la continuité de l'apport de chaleur, il est possible d'utiliser des combustibles solides qui brûlent lentement comme les pneus ou d'autres types de déchets en conteneurs. Il existe quelques installations de ce type et des réductions de 20 à 40 % des émissions des NO_x ont été signalées dans certains cas. La

vitesse de combustion de ces déchets peut être déterminante ; si elle est trop lente, une atmosphère réductrice se forme dans la zone de clinkérisation ce qui peut altérer gravement la qualité du produit et si elle est trop élevée, la température dans la zone de chaînage du four peut devenir excessive, ce qui les endommage irrémédiablement [9].

4.6. Minéralisation du clinker:

L'apport de minéralisateurs dans la matière première permet d'ajuster la qualité du clinker et d'abaisser la température dans la zone de clinkérisation, ce qui réduit la formation des NO_x . Cette réduction pourrait atteindre 10 à 15 %, mais des études signalent des réductions de 50 % [4].

Le fluorure de calcium est un exemple de minéralisateur mais des apports excessifs pourraient provoquer une augmentation des émissions de HF .

4.7. Réduction sélective non catalytique (SNCR):

La réduction sélective non catalytique ou *SNCR* consiste à injecter des composés de type NH_2-X dans les gaz résiduels pour réduire le NO en N_2 . La réaction est optimale entre 800 et 1000°C, et le temps de séjour doit être suffisant pour que les agents injectés aient le temps de réagir avec le NO , cette plage de températures est facile à obtenir dans les fours à préchauffeur, dans les fours à précalcinateur et sans doute dans certains fours *Lepol*. La température et le temps de séjour requis pourraient être très difficiles, voire impossibles, à obtenir dans les fours longs en voie humide et sèche. L'agent NH_2-X le plus courant est une solution d'eau ammoniacale à 25 % de NH_3 [2]. D'autres réducteurs tels que le gaz ammoniac, les solutions d'urée, la chaux nitrurée ou le cyanamide et autres substances similaires peuvent être utilisés à l'échelle industrielle [4]. L'expérience montre que dans la plupart des applications, l'eau ammoniacale est le réducteur le mieux adapté à la *SNCR* dans les fours avec préchauffeurs et précalcinateurs [2].

Si la cimenterie est déjà équipée d'un système de combustion étagée, de nouveaux développements doivent être faits dans la mise en œuvre de la *SNCR*. L'utilisation simultanée de ces techniques exige que les températures, les temps de séjour et l'atmosphère gazeuse à l'endroit où la réaction a lieu soient compatibles. [4]

La plupart des unités de *SNCR* actuellement en service sont conçues ou conduites (ou les deux) pour réduire de 10 à 50 % les niveaux des NO_x (pour des rapports molaires NH_3/NO_2 de 0,5 à 0,9) et abaisser leurs émissions à 500 - 800 mg NO_x/m^3 , ce qui est suffisant pour se

conformer à la législation en vigueur dans certains pays. Les installations conçues et conduites (ou les deux) pour améliorer ces performances obtiendront de meilleurs résultats.

Il est important de respecter les plages de température indiquées ci-dessus car si elles sont inférieures, de l'ammoniac non transformé se dégage (échappée de NH_3) et si elles sont trop élevées, l'ammoniac s'oxyde en NO_x . On peut aussi avoir une échappée de NH_3 quand le rapport molaire NH_3/NO_2 est élevé, c'est-à-dire à partir de 1,0-1,2. Dans d'autres secteurs de l'industrie, l'échappée d'ammoniac a parfois provoqué la formation d'aérosols de chlorures et de sulfates d'ammonium qui ont traversé le filtre et formé des panaches blancs en haut des cheminées d'évacuation des gaz résiduaire. Les études ont démontré que les quantités d'aérosols produites par les cimenteries étaient très faibles [4]. L'ammoniac inutilisé peut s'oxyder et se transformer en NO_x dans l'atmosphère ; l'échappée de NH_3 peut aussi enrichir les poussières en ammoniac ce qui empêche de les recycler dans le broyeur [2]. La possibilité d'une échappée de NH_3 doit être prise en compte dans la conception des unités de *SNCR*. Des émissions de monoxyde de carbone (CO) et de protoxyde d'azote (N_2O) peuvent aussi se produire [4]. Un apport de chaleur supplémentaire est nécessaire pour vaporiser l'eau ce qui provoque une légère élévation des émissions de CO_2 . Le transport et le stockage de l'ammoniac sont potentiellement dangereux pour l'environnement et obligent à prendre des mesures de sécurité supplémentaires [2]. Le stockage d'une solution d'eau ammoniacale à 25 % évite quelques-uns des problèmes posés par l'utilisation de l'ammoniac.

La réduction des NO_x est d'autant plus efficace que le rapport molaire NH_3/NO_2 est élevé. Cependant, le niveau de réduction des NO_x ne peut pas être augmenté à volonté, car un dosage plus important risque d'entraîner une échappée de NH_3 . Selon les informations disponibles, dans un four équipé d'un préchauffeur à quatre étages de cyclones d'une capacité de production maximum de 2 000 tonnes de clinker/jour, un rapport molaire d'environ 1,0 a permis de réduire de près de 80 % les émissions des NO_x sans échappée de NH_3 . Le bon fonctionnement de l'unité de *SNCR* (système de réduction adapté, injection optimisée d'eau ammoniacale) ne provoque pas d'émissions d'ammoniac supérieures à la normale [4].

4.8. Réduction catalytique sélective (SCR):

La *SCR* réduit le NO et le NO_2 en N_2 à l'aide de NH_3 et d'un catalyseur entre 300 et 400 °C. Cette technique est très utilisée pour réduire les émissions des NO_x dans d'autres secteurs industriels (centrales thermiques au charbon, incinérateurs de déchets). Les fabricants de ciment s'intéressent surtout à deux systèmes de traitement, l'un pour les gaz résiduaire faiblement poussiéreux et l'autre pour les gaz résiduaire fortement poussiéreux. Dans le

premier cas, il faut réchauffer les effluents gazeux après les avoir dépoussiérés, ce qui augmente les coûts. Des raisons techniques et économiques incitent à préférer les systèmes de traitement des gaz fortement poussiéreux [2] [10]. Pour l'instant, la SCR n'a été testée que pour des fours avec préchauffeurs à cyclones et en voie semi-sèche (fours *Lepol*) mais elle pourrait être aussi applicable à d'autres types de fours.

Les systèmes de traitement des gaz résiduels fortement poussiéreux par la SCR doivent permettre d'espérer des réductions potentielles importantes des émissions des NO_x (85 à 95 %) [2]. Il faut effectuer des périodes de production en grandeur réelle pour éliminer les incertitudes techniques et économiques liées à la mise en œuvre de la SCR à une plus grande échelle, ces incertitudes concernent principalement la forte teneur en poussières des gaz (jusqu'à 500 g/Nm^3), les techniques de dépoussiérage des catalyseurs, leur durée de vie et le montant total des investissements [2].

Comme les catalyseurs éliminent aussi les hydrocarbures, la SCR diminue également la teneur en composés organiques volatils (COV), en PCDD et en PCDF.

Étant donné son potentiel de réduction élevé, les bons résultats des essais pilotes et le fait que la SCR représente l'état de l'art dans les installations comparables, la SCR est une technique intéressante pour l'industrie du ciment.

4.9 Recirculation des gaz d'échappement (EGR):

La recirculation des gaz d'échappement [11] ou EGR pour *Exhaust gas recirculation* (le terme anglais est plus couramment rencontré dans la littérature) est un système inventé au début des années 1970 premièrement pour les moteurs diesels et étendu pour d'autres domaines industriels qui utilisent la combustion comme une source d'énergie tel que les fours de cimenteries. Cette technique est disponible à l'ECDE et consiste à rediriger une partie des gaz d'échappement du four à partir des gaz aspirés du refroidisseur et les réinjectés dans ce dernier comme air secondaire.

Chapitre 02 : Modélisation de l'écoulement réactif dans un milieu turbulent

La turbulence est un phénomène extrêmement complexe qui est encore loin d'être maîtrisé est sur lequel, malgré les très nombreuses études disponibles, on a que des résultats parcellaires. Le nombre de *Reynolds*, représentant le rapport entre les forces d'inertie et les forces de frottement qui s'exercent sur un fluide, permet de caractériser le régime d'écoulement. Pour de plus grands nombres de *Reynolds* et à partir d'un certain seuil, des instabilités apparaissent et l'écoulement semble désordonné ; l'écoulement est alors qualifié de turbulent. Les fluctuations spatiales et temporelles des différentes grandeurs sont d'autant plus irrégulières que la vitesse est élevée. La turbulence est difficilement prévisible car une faible variation des conditions aux limites de l'écoulement peut provoquer des modifications importantes du champ des diverses grandeurs. Elle peut être caractérisée par quelques propriétés : c'est un phénomène tridimensionnel, irrégulier dans l'espace et le temps, rotationnel, diffusant fortement toute quantité transportée, et dissipant de façon importante l'énergie cinétique en chaleur.

Au sein d'un écoulement turbulent, coexistent plusieurs structures de tailles et de fréquences différentes. Les grandes structures peuvent être assimilées à de gros tourbillons et sont porteuses d'énergie cinétique. Leurs dimensions peuvent atteindre l'ordre de grandeur du domaine occupé par l'écoulement. La viscosité moléculaire n'y joue aucun rôle. Leur énergie cinétique est généralement produite par les gradients de vitesse de l'écoulement moyen. Ces grandes structures, soumise au phénomène d'étirement tourbillonnaire, donnent naissance à des structures plus petites tout en leur transférant une partie de leur énergie [12]. Ce processus se répète et, au dessous d'une certaine échelle de longueur, la viscosité moléculaire joue un rôle important ; l'énergie cinétique turbulente, transférée des grandes structures vers les plus petites, est dissipée sous forme de chaleur. Ce processus de transfert est appelé "cascade d'énergie", idée dont le développement est principalement dû à *Kolmogorov* (1941).

Dans la plupart des systèmes de combustion du domaine industriel, le type de régime d'écoulement observé est turbulent et interagit avec la combustion. La combustion turbulente résulte de cette interaction entre deux phénomènes complexes ayant lieu à des échelles de temps très faibles. En mécanique des fluides numérique (*CFD*, comme *Computational Fluid Dynamics* en anglais) pour modéliser numériquement les phénomènes liés à la combustion turbulente, on peut distinguer, à l'heure actuelle, trois degrés de résolution des équations des bilans moyens [13] ou appelées aussi équations de l'aérothermochimie (Figure.2.1).

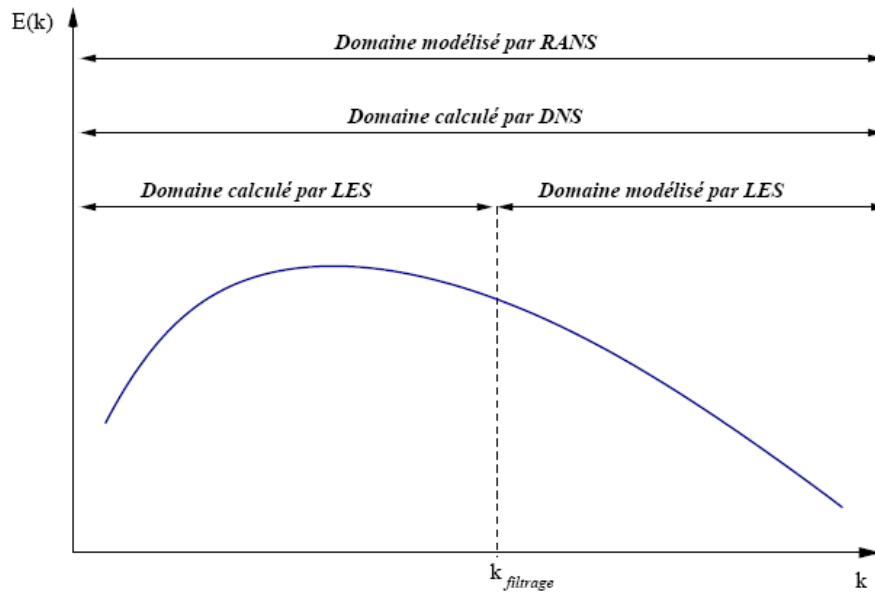


Figure 2.1 : Domaines fréquentiels du spectre d'énergie turbulente calculés et/ou modélisés par méthode *RANS*, *LES* et *DNS* [13]

Le premier degré, le plus grossier, est celui du moyennement au sens de *Reynolds* (*RANS*, pour *Reynolds Averaged Navier-Stokes* en anglais). Ce modèle s'appuie sur une résolution des valeurs moyennes des grandeurs physiques de la combustion turbulente, en utilisant des modèles de fermetures pour les équations de conservation formulées en valeurs moyennes, seuls les champs moyens sont résolus. Les estimations des grandeurs physiques d'un problème correspondent à leur moyenne temporelle dans un écoulement stationnaire ou périodique (moyenne sur plusieurs cycles). Le deuxième degré de résolution correspond à des simulations numériques faites à l'échelle des plus grands tourbillons de l'écoulement turbulent, c'est la simulation aux grandes échelles (*LES*, pour *Large Eddy Simulation*). Les équations ne sont résolues numériquement que pour les grandes échelles de la turbulence repérées par une méthode de filtrage, alors que les effets dus aux plus petites échelles sont représentés à l'aide de modèles de fermeture adaptés. Les modèles de fermeture *RANS* ou *LES* peuvent être obtenus en étudiant les phénomènes à modéliser par simulation numérique directe (*DNS*, pour *Direct Numerical Simulation*). Dans ces simulations, les équations de l'aérothermochimie sont directement résolues à chaque instant, sans nécessiter de modèle approché pour la turbulence, toutes les échelles et toutes les variations des grandeurs physiques de la combustion turbulente sont calculées. Ce type de simulation s'est beaucoup développé durant ces dernières années mais reste appliqué à des géométries de petites dimensions pour des configurations basiques [13] à cause de la lourdeur en temps de calcul puisque le nombre de points où la solution doit être capté est une puissance de 9/4 du nombre

de Reynolds [14]. Le calcul *DNS* a permis de mieux comprendre les mécanismes de la combustion turbulente à petite échelle et de générer des modèles de fermetures adéquats pour le *RANS* et la *LES*.

Avantages et inconvénients des différentes approches sont résumés dans le Tableau 2.1:

Approche	Avantages	Inconvénients
<i>RANS</i>	- « faible » résolution requise - simplification (2D — symétrie) - - « faible » coût numérique	- écoulement moyen - modélisation
<i>LES</i>	- instationnaire - impact de la modélisation	- modélisation - calculs tri-dimensionnels - précision numérique - coûts numériques
<i>DNS</i>	- pas de modèle - outil d'étude	- coûts numériques énormes - problèmes académiques

Tableau 2.1: Avantages et inconvénients des approches *RANS*, *LES* et *DNS* pour la simulation numérique des écoulements turbulents, réactifs ou non [15].

1. Les équations des bilans moyens :

Ces équations permettent de déterminer les quantités caractéristiques de l'écoulement qui sont subdivisées, pour le cas d'une flamme sans gouttes ou particules solides, en trois variables [16] :

- Les variables dynamiques (les composantes de la vitesse de l'écoulement, dans un trièdre donné, noté ici u_α , $\alpha = 1,2,3$)
- Les variables thermodynamiques ; la masse volumique ρ et l'énergie interne massique (ou l'enthalpie massique) e (ou h) du mélange gazeux ;
- Les variables chimiques ; la fraction massique pour les n constituants du milieu gazeux (les différents composés chimiques réagissants) : $Y_i, i = 1, \dots, n$.

Entre ces variables, il existe deux types de relations :

- Les équations de bilan, qui sont la traduction des grands principes de la physique (conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie) ;
- Les équations d'état thermodynamique du fluide composé par le mélange gazeux.

En ce qui concerne ces derniers, on considère pratiquement toujours un mélange idéal de gaz parfaits en équilibre thermique, ce qui se traduit par les équations classiques :

$$P / \rho = \sum_{i=1}^n Y_i \frac{R}{m_i} T \quad (4)$$

Où P désigne la pression du mélange.

$R = 8,314 \text{ 41 J/(mol.K)}$ constante molaire des gaz,

m_i masse molaire des constituant i ,

Et :

$$h = \sum_{i=1}^n h_i Y_i \quad (5)$$

Avec :

$$h_i = \int_0^T c_{p_i}(T) dT + h_i^0 \quad (6)$$

Et c_{p_i} capacité thermique massique à pression constante du constituant i ,

h_i^0 enthalpie de formation à 0 K du constituant i .

Les valeurs de $c_{p_i}(T)$ et h_i^0 sont des données que l'on doit trouver dans des tables spécifiques (par exemple les tables du *NIST, JANAF* [17])

Pour établir les équations du bilan dans le cas des écoulements réactifs (combustion), on utilise généralement des moyennes pondérées par la masse volumique ou moyennes de Favre pour toutes les variables sauf ρ et P [16]. Cela donne, pour toute variable g :

$$\tilde{g} = \overline{\rho g} / \bar{P} \quad (7)$$

Où le surlignage (-) est la moyenne statistique non pondérée et le tilde ($\tilde{}$) est la moyenne pondérée par ρ . Dans les équations, on verra apparaître aussi les fluctuations autour des valeurs moyennes ; on notera ici :

$$g' = g - \tilde{g} \quad (8)$$

Avec $\tilde{g}' = \overline{\rho g'} / \bar{\rho} = 0$

Au contraire, pour ρ et P , on gardera $\bar{\rho}$ et \bar{P} , et les fluctuations ρ' et P' seront :

$$\rho' = \rho - \bar{\rho} \text{ et } P' = P - \bar{P} \quad (9)$$

En tenant compte de ces notations, les équations de bilans moyens s'écrivent :

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_\alpha} (\bar{\rho} \tilde{u}_\alpha) = 0, \text{ pour l'équation de continuité} \quad (10)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_\beta}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_\alpha} (\bar{\rho} \tilde{u}_\alpha \tilde{u}_\beta) = -\frac{\partial \bar{P}}{\partial x_\beta} + \frac{\partial}{\partial x_\alpha} (\bar{\tau}_{\alpha\beta} - \bar{\rho} \tilde{u}'_\alpha \tilde{u}'_\beta) + \bar{\rho} \tilde{Y}_\beta, \beta = 1,2,3, \text{ pour l'équation (11)}$$

de quantité de mouvement

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_\alpha} (\bar{\rho} \tilde{u}_\alpha \tilde{Y}_i) = \frac{\partial}{\partial x_\alpha} (\bar{J}_{\alpha,i} - \bar{\rho} \tilde{u}'_\alpha \tilde{Y}'_i) + \bar{\rho} \tilde{W}_i, i = 1, \dots, n, \text{ pour l'équation (12)}$$

de transport d'espèce

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{h}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_\alpha} (\bar{\rho} \tilde{u}_\alpha \tilde{h}) = \frac{\partial}{\partial x_\alpha} (\bar{J}_{\alpha,h} - \bar{u}_\beta \bar{\tau}_{\alpha\beta} - \bar{\rho} \tilde{u}'_\alpha \tilde{h}') + S_h, \alpha = 1,2,3, \text{ pour l'équation (13)}$$

de l'énergie

Cette écriture utilise la notation d'*Einstein*, chaque fois qu'un indice se répète dans le même terme, cela implique une sommation ; par exemple :

$$\frac{\partial}{\partial x_\alpha} \bar{\rho} \tilde{u}_\alpha = \frac{\partial}{\partial x_1} \bar{\rho} \tilde{u}_1 + \frac{\partial}{\partial x_2} \bar{\rho} \tilde{u}_2 + \frac{\partial}{\partial x_3} \bar{\rho} \tilde{u}_3 = \text{div}(\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}}) \quad (14)$$

Les équations précédentes contiennent des termes inconnus, qui nécessitent des expressions fonction des termes connus, ceci impose mathématiquement une fermeture du système d'équations:

- Les termes $-\tilde{u}'_\alpha \tilde{u}'_\beta$, ou $-\tilde{u}'_\alpha \tilde{h}'$, ou $-\tilde{u}'_\alpha \tilde{Y}'_i$, que l'on appelle flux de diffusion turbulente de quantité de mouvement, ou d'enthalpie, ou d'espèces, respectivement, font intervenir les fluctuations, que l'on ne connaît pas ;

- Les termes \tilde{W}_i , appelés taux de réactions moyens, ne sont pas seulement fonction de la chimie : comme les valeurs non moyennées de \tilde{W}_i sont très fortement non linéaires par rapport à la température ou la concentration, les valeurs moyennées seront fortement dépendantes des fluctuations de ces variables, que l'on ne connaît encore pas.

- Les termes $\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t}$, $\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_\beta}{\partial t}$, $\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_i}{\partial t}$ et $\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t}$ représentent l'accumulation des variables ; masse volumique, vitesses, enthalpie et fractions massiques respectivement, au cours du temps t , qui sont nuls dans le cas d'un problème stationnaire.

- Les seconds termes du membre de gauche représentent les flux de convection des variables.

Dans l'équation (13), S_h est un terme source introduit la participation de l'effet du rayonnement dans l'équation de l'énergie, décrite dans le paragraphe 7.

Pour le cas des équations d'état, le problème se pose du même genre ; en effet la moyenne des équations classiques donne :

$$\bar{P} = \tilde{\rho}R \sum_{i=1}^n \frac{\widetilde{Y_i T}}{m_i} = \tilde{\rho}R \sum_{i=1}^n \frac{\tilde{Y}_i \tilde{T}}{m_i} + \tilde{\rho}R \sum_{i=1}^n \frac{\widetilde{Y_i T'}}{m_i} \quad (15)$$

Et de même :

$$\tilde{h} = \sum_{i=1}^n Y_i \int_0^T c_{p_i}(T) dT + \sum_{i=1}^n \tilde{Y}_i h_i^0 \quad (16)$$

Pour le cas de combustion avec de l'air, donc à peu près 79% d'azote, $\sum_{i=1}^n \frac{Y_i}{m_i}$ est très peu variable en fonction de la composition exacte du milieu gazeux et on a simplement [16] :

$$\bar{P} = \tilde{\rho}R_m \tilde{T} \quad (17)$$

Avec
$$R_m = \sum_{i=1}^n \frac{\bar{Y}_i R}{m_i} \quad (18)$$

Enfin, pour pouvoir utiliser ces équations, il faut les compléter par des modèles permettant de calculer, de façon approximative, les flux de diffusion turbulentes et le taux de réaction moyen en fonction des grandeurs caractéristiques moyennes. Nous allons décrire, dans le paragraphe qui suit, les principaux modèles de turbulence permettant d'exprimer les flux de diffusions turbulentes, ensuite, le modèle permettant de décrire le taux de réaction moyen. Dans les écoulement pleinement turbulents, les flux laminaires moyens : $\bar{J}_{\alpha,i}$, $\bar{\tau}_{\alpha,\beta}$ et $\bar{J}_{\alpha,h}$ sont négligeables devant les flux turbulents [16].

2. Modélisation de la turbulence :

Les modèles de turbulence, comme nous l'avons motionné ci-dessus, doivent permettre de calculer les tensions de *Reynolds* et les flux de diffusions turbulents d'enthalpie ou d'espèces. C'est dans l'obtention de tels modèles que réside le coeur du problème de la turbulence. Des modèles résous une équation de transport supplémentaire pour chacune de ces grandeurs comme par exemple le modèle *RSM*, tandis que, d'autres les expriment en fonction des valeurs moyennes des variables caractéristiques de l'écoulement tels que le modèle *k-ε* et ses variantes, et le modèle *k-ω* décrits au paragraphe 2.1 et 2.2 respectivement.

2.1 Modèle *k-ε* et ses variantes :

Ce modèle appartient à la catégorie de modèles basés sur l'hypothèse de *Boussinesq* [18], suivant laquelle tous les flux turbulents peuvent être reliés aux gradients des grandeurs

moyennes par des coefficients de diffusion turbulents, analogues aux coefficients de diffusion moléculaires qui relient les flux laminaires aux gradients des variables caractéristiques de l'écoulement. Ainsi, les flux turbulents de chaleur sont-ils reliés aux gradients d'enthalpie moyenne par un coefficient de conductibilité thermique turbulente λ_t et les flux turbulents d'espèces chimiques, aux gradients de fractions massiques moyennes par un coefficient de diffusion massique turbulente Γ_t . Les tensions de *Reynolds* sont quant à elles, reliées aux gradients de vitesses moyennes par l'intermédiaire de la viscosité turbulente par μ_t , ces flux sont donnés comme suit :

$$-\widetilde{u'_\alpha h'} = \lambda_t \frac{\partial \widetilde{h}}{\partial x_\alpha}, \quad -\widetilde{u'_\alpha Y'_i} = \Gamma_t \frac{\partial \widetilde{Y}_i}{\partial x_\alpha}, \quad -\widetilde{u'_\alpha u'_\beta} = \mu_t \left(\frac{\partial \widetilde{u}_\alpha}{\partial x_\beta} + \frac{\partial \widetilde{u}_\beta}{\partial x_\alpha} \right), \alpha \neq \beta \quad (19)$$

Avec

$$\mu_t = C_\mu k^2 / \varepsilon, \quad \Gamma_t = \frac{\mu_t}{Sc_t}, \quad \lambda_t = \frac{\mu_t}{Pr_t} \quad (20)$$

$C_\mu = 0,09$, Sc_t et Pr_t sont les nombres de *Schmidt* et *Prandtl*, respectivement en régime turbulent supposées constants (de l'ordre de 0,8 pour de gaz).

Par conséquent, le calcul d'un écoulement turbulent est équivalent, avec cette hypothèse, au calcul d'un écoulement laminaire dont les propriétés physiques sont remplacées par des propriétés effectives, somme des propriétés moléculaires et turbulentes. L'information relative à la turbulence et regroupée dans l'expression des propriétés turbulentes, qui varient en tout point du domaine de calcul. Ces propriétés, qui s'expriment en m^2/s , peuvent être exprimés par le produit d'une vitesse turbulente v_t et d'une longueur caractéristique turbulente l_t . La première peut être définie comme la racine de l'énergie cinétique de turbulence k , le calcul de la vitesse turbulente requiert donc de résoudre une équation supplémentaire de conservation pour k , cette équation comprend un terme de production d'énergie cinétique de turbulence sous l'action du cisaillement produit par les gradients de vitesses dans le fluide, et un terme de dissipation de cette énergie cinétique, due à la viscosité moléculaire du fluide. Ce dernier terme noté ε , peut être représenté, d'après l'analyse dimensionnelle, à partir de $k^{3/2}/l_t$ [19]. On peut également le calculer à partir du choix de la dimension caractéristique de l'écoulement. En pratique, ce choix est difficile car les échelles de longueurs dépendent de la géométrie de l'écoulement et ne peuvent donc être estimés que si des études expérimentales détaillées sont disponibles pour la configuration étudiée [19]. Dans le modèle $k - \varepsilon$

développées par *Lauder* et *Spalding* [20], en revanche, on introduit une équation de conservation supplémentaire pour la variable ε . Ainsi, leurs formulations sont données par :

$$\frac{\partial}{\partial t} \overline{\rho k} + \frac{\partial}{\partial x_\alpha} (\overline{\rho \tilde{u}_\alpha k}) = \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(\overline{\rho} \frac{\mu_t}{Pr_k} \frac{\partial k}{\partial x_\alpha} \right) - \underbrace{\overline{\rho u'_\alpha u'_\beta} \frac{\partial \tilde{u}_\alpha}{\partial x_\beta}}_{\text{La production de } k} - \underbrace{\overline{\rho \varepsilon}}_{\text{La dissipation de } k} \quad (21)$$

Et :

$$\frac{\partial}{\partial t} \overline{\rho \varepsilon} + \frac{\partial}{\partial x_\alpha} (\overline{\rho \tilde{u}_\alpha \varepsilon}) = \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(\overline{\rho} \frac{\mu_t}{Pr_\varepsilon} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_\alpha} \right) - \underbrace{\overline{\rho \frac{\varepsilon}{k} C_1 u'_\alpha u'_\beta} \frac{\partial \tilde{u}_\alpha}{\partial x_\beta}}_{\text{La production de } \varepsilon} - \underbrace{\overline{\rho C_2 \frac{\varepsilon^2}{k}}}_{\text{La dissipation de } \varepsilon} \quad (22)$$

Les relations du modèle $k - \varepsilon$, comportent cinq constantes, dont les valeurs ont été déterminées afin de valider ce modèle pour un certain nombre de configurations expérimentales définies, à titre d'exemple, sont [16] :

$$C_\mu = 0,09 ; C_1 = 1,44 ; C_2 = 1,92 ; Pr_k = 1 ; Pr_\varepsilon = 1,3 \quad (23)$$

En raison de sa simplicité et son robustes, le modèle $k - \varepsilon$ est largement utilisé et implémenté dans tous les logiciels de simulation numérique, car il permet de tenir compte des effets de la turbulence sans alourdir significativement le calcul de l'écoulement [19]. Il a été utilisé au cours de l'étude numérique, décrivant correctement le comportement d'un écoulement non tourbillonnaire axisymétrique en aval d'un injecteur coaxial unique [21], une expression dite de *Pope* est ajoutée à l'équation de transport du taux de dissipation ε , le taux de production de l'énergie cinétique est ainsi corrigé par un terme invariant χ , et s'écrit [22] :

$$P_{pc} = C_{\varepsilon 3} \overline{\rho} \frac{\varepsilon^2}{k} \chi \quad (24)$$

Le terme χ s'exprime en fonction des composantes des tenseurs S et W :

$$\chi = \omega_{ij} \omega_{jl} S_{li} \quad (25)$$

où :

$$S_{li} = \frac{1}{2} \frac{k}{\varepsilon} \left[\frac{\partial \tilde{u}_l}{\partial x_i} + \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_l} \right] \quad (26)$$

$$\omega_{jl} = \frac{1}{2} \frac{k}{\varepsilon} \left[\frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_l} - \frac{\partial \tilde{u}_l}{\partial x_j} \right] \quad (27)$$

La correction du terme du taux de production de l'énergie cinétique dans l'équation de transport de ε permet de prendre en considération l'effet de l'étirement tourbillonnaire sur la viscosité du jet et par conséquent, sur son taux d'épanouissement, ainsi, le jet rond (considéré axisymétrique) s'épanouit moins rapidement que le jet plan [23].

L'utilisation du modèle $k - \varepsilon$ est néanmoins soumise à certaines restrictions. Les hypothèses du modèle limitent en effet sa validité aux écoulements à nombre de *Reynolds* élevé et il doit donc être adapté pour les zones de l'écoulement où cette hypothèse n'est pas vérifiée, notamment au voisinage des parois. Le traitement de la turbulence au voisinage des parois est décrit au paragraphe 2.1.1.

D'autre part, les équations du modèle ont été établies en supposant la turbulence homogène et isotrope, hypothèse considérée comme valable dans le cas des écoulements non swirlés [16]. Par conséquent, une réécriture du modèle $k - \varepsilon$ pour l'adapter à un plus grand nombre de configurations d'écoulement et inclure plus particulièrement des termes spécifiques aux écoulements à swirl, a été développée par *Choudhury*. Ce modèle, implémenté dans le code *Fluent* [24] sous la dénomination de *RNG- $k - \varepsilon$* [25], techniques sur ce modèle peuvent être trouvés dans la littérature [26].

2.1.1. Traitement de la turbulence au voisinage des parois :

Lorsqu'on s'approche de la paroi, la vitesse et les grandeurs caractéristiques de la turbulence tendent vers zéro et la décroissance de ε fait tendre la viscosité turbulente ν_t vers l'infini dans cette zone. Pour résoudre ce problème, le modèle original de Jones et Launder inclut une fonction d'amortissement, facteur multiplicatif de ν_t dont la valeur décroît exponentiellement avec le nombre de *Reynolds* turbulent de l'écoulement. Des modèles plus récents (modèle de *Spalart-Allmaras*, et modèle $k - \omega$) [26] incluent également des artifices d'amortissement permettant d'utiliser ces formulations à travers toute la couche limite. Cependant, la résolution des importants gradients de vitesse rencontrés dans la zone proche de la paroi requiert un maillage très fin dans cette zone et donc un effort de calcul considérable.

Une autre méthode, simple et classiquement utilisée, consiste à utiliser des lois de parois ou fonctions de parois pour redéfinir des conditions aux limites pour les équations de conservation au premier point de maillage voisin de la paroi, placé en dehors de la couche limite, pour éviter de résoudre les équations du modèle de turbulence dans celle-ci. Ces conditions aux limites portent sur les valeurs de tensions de *Reynolds*, de la production

d'énergie cinétique de turbulence et de sa dissipation, pour les équations relatives à la quantité de mouvement et à la turbulence, et sur les flux turbulents moyens de chaleur et de masse pour les équations de conservation de l'énergie et d'espèce. Elles sont définies à partir des conditions aux limites définies aux parois elles mêmes (variables imposés ou flux imposés) et des lois de parois. Les lois de parois supposent que la structure de l'écoulement entre le noeud de maillage le plus proche de la paroi et celles-ci est similaire à un écoulement de couche limite qui peut être décrit par une évolution linéaire des variables (vitesses, température et fractions massiques) au voisinage immédiat de la paroi, dans la sous-couche laminaire de la couche limite, et logarithmique dans le reste de celle-ci. Les couches limites visqueuses, thermiques et massiques ne diffèrent que par l'épaisseur de leur sous-couche laminaire. On trouvera l'expression des lois lin-log classiques et leur formulation dans le logiciel *Fluent* en tant que fonctions de parois standard dans [26]. Pour le cas de l'écoulement à l'intérieur du four de cimenterie, on activera la fonction standard pour les parois, sachant que les effets thermiques de la couche limite ne sont que d'une importance secondaire dans le problème de prédiction de la pollution [27].

2.2. Modèle $k - \omega$ standard:

Le modèle $k - \omega$ standard est une extension de celui développé en 1988 par Wilcox [28], aux écoulements à faible nombre de Reynolds, compressibilité et à haut taux d'épanouissement. Ce modèle a une formulation empirique qui a été amélioré au cours des dernières années, en plus d'une bonne prédiction de la dynamique des jets confinés (initialement assurée par le modèle de Wilcox) le modèle $k - \omega$ standard introduit des termes de production supplémentaires de l'énergie cinétique turbulente (k) et du taux de dissipation spécifique (ω , définie par le rapport du ε sur k) dans les équations de transport dans le but d'améliorer la prédiction dynamique dans le cas des jets libres [26].

Les équations de l'énergie cinétique turbulente k et le taux de dissipation spécifique ω du modèle sont donnés comme suite:

$$\frac{\partial}{\partial t} \bar{\rho k} + \frac{\partial}{\partial x_\alpha} (\bar{\rho \tilde{u}_\alpha k}) = \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(\bar{\rho} \frac{\mu_t}{Pr_k} \frac{\partial k}{\partial x_\alpha} \right) - \underbrace{\bar{\rho u'_\alpha u'_\beta} \frac{\partial \tilde{u}_\alpha}{\partial x_\beta}}_{\text{La production de } k} - \underbrace{\bar{\rho \beta^* f_\beta^* k \omega}}_{\text{La dissipation de } k} \quad (28)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \bar{\rho \omega} + \frac{\partial}{\partial x_\alpha} (\bar{\rho \tilde{u}_\alpha \omega}) = \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(\bar{\rho} \frac{\mu_t}{Pr_\omega} \frac{\partial \omega}{\partial x_\alpha} \right) - \underbrace{\bar{\rho \alpha} \frac{\omega}{k} \bar{\rho u'_\alpha u'_\beta} \frac{\partial \tilde{u}_\alpha}{\partial x_\beta}}_{\text{La production de } \omega} - \underbrace{\bar{\rho \beta} \cdot f_\beta \omega^2}_{\text{La dissipation de } \omega} \quad (29)$$

Dans ces équations ; Pr_k et Pr_w sont les nombres de *Prandtl* turbulent pour k et ω , respectivement définis comme : $Pr_k = Pr_w = 2$, la viscosité turbulente μ_t est calculée par la relation:

$$\mu_t = \alpha^* \frac{k}{\omega} \quad (30)$$

où le coefficient α^* amorti la viscosité turbulente en causant une correction à faible nombre de *Reynolds*, ce coefficient et les coefficients α, β, β^* du modèles sont fonction du nombre de *Reynolds* turbulent et dans le cas d'un grand nombre de *Reynolds* $\alpha = \alpha^* = 1$, en plus, les coefficients β, β^* sont fonction à un terme qui tient en compte de la compressibilité du fluide, les fonctions f_β, f_{β^*} quant à eux, sont liées au tenseur du taux de contrainte S_{ij} . On trouvera la formulation de tous ces coefficients et les constantes du modèle dans la littérature [26].

3. Modélisation de la chimie :

La combustion turbulente fait intervenir différentes échelles de longueur, de vitesse et de temps, de ce fait, l'analyse physique utilise souvent des nombres sans dimensions pour comparer les effets des divers mécanismes (turbulence, chimie, ...); on définit donc le nombre de *Damkolher* comme étant le rapport de l'échelle temporelle de turbulence à l'échelle chimique :

$$Da = \frac{\tau_t}{\tau_c} \quad (31)$$

Dans la plupart des configurations pratiques des écoulements réactifs, le nombre de *Damkolher* est soit proche de l'unité ($Da \approx 1$) comme c'est le cas de la formation de polluants (NO par exemple) où les processus chimiques sont lents (τ_c relativement élevé), soit supérieur à l'unité ($Da \gg 1$) comme c'est le cas dans l'oxydation des combustibles où l'échelle du temps chimique est très inférieure à l'échelle de la turbulence (appelée dans ce cas la chimie rapide) (Figure 2.2).

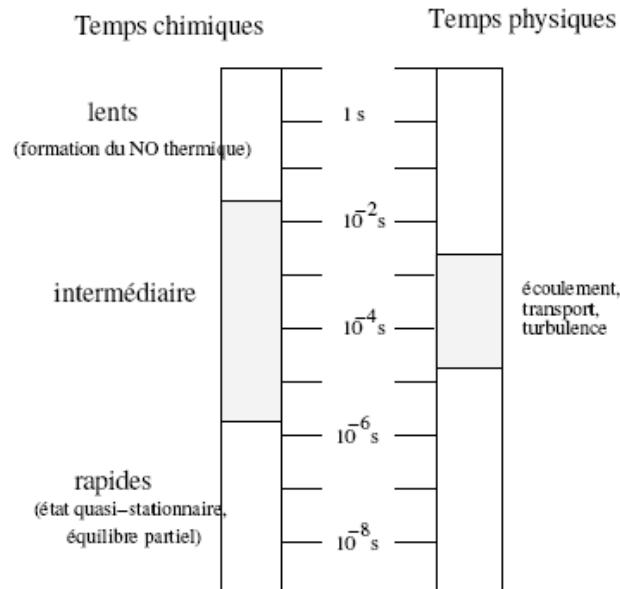


Figure 2.2 : Estimation des temps caractéristiques chimiques et turbulents [29].

Bien évidemment dans la modélisation physique, la configuration de l'écoulement de chaque réactif (combustible + oxydant : Fuel + Oxidizer) a une influence directe sur la nature de la combustion (et précisément sur la flamme), en effet, dans le cas où le combustible et l'oxydant sont initialement mélangés avant d'atteindre la zone de réaction (on parle alors de combustion de prémélange), rien ne s'oppose à ce qu'ils réagissent (Figure 2.3).

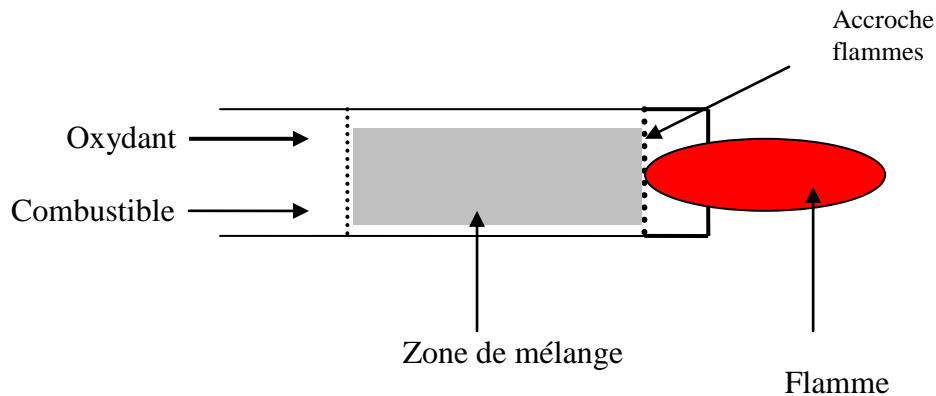


Figure 2.3 : La combustion prémélangée.

Cette situation offre un rendement de combustion très élevé, mais la flamme a parfois tendance à se propager vers la zone de mélange, ce qui peut poser des problèmes de sécurité qu'on évite souvent grâce à l'installation des accroches flammes [30]. Dans ce cas, le débit de matière brûlée (ou taux de consommation d'un réactif) est fixé par les lois de la cinétique

chimique alors que les phénomènes de diffusion moléculaire n'ont pratiquement pas d'effets considérables sur la flamme.

Une autre configuration consiste en l'existence du combustible et de l'oxydant initialement séparés, ils diffusent à travers les divers composants du mélange, forment une couche fine de mélange avant d'atteindre la flamme (dite de diffusion) qui ne peut se propager vers des zones où l'un des réactifs est absent. Le taux de réaction est contrôlé parfaitement par la convection, la diffusion et le transport turbulent (Figure 2.4).

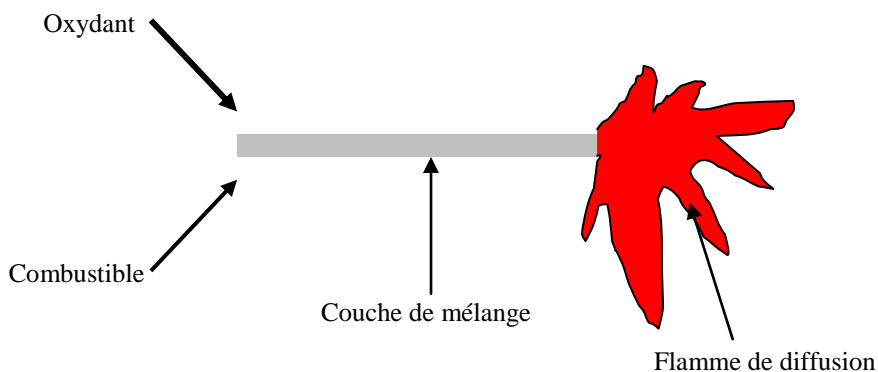


Figure 2.4 : La combustion non-prémélangée.

Le tableau ci-dessous présente une classification simpliste des régimes de combustion, la description est basée sur la configuration des réactifs ainsi que sur le régime de leur écoulement, ce qui fait apparaître quatre cas extrêmes.

Configuration des réactifs	Régime de l'écoulement	Exemples pratiques
Prémélangés	Laminaire	Fours domestiques. Brûleurs Bunsen.
Prémélangés	Turbulent	Turbines à gaz. Moteurs à allumage commandé.
Non-prémélangés	Laminaire	Bougies. Briquets.
Non prémélangés	Turbulent	Moteurs Diesel. Moteurs fusée. Fours industriels.

Tableau 2.2: Les différents régimes de la combustion [30].

3.1. Les flammes de prémélange :

Lorsque le régime de l'écoulement est laminaire, la flamme l'est aussi, la théorie thermique simplifiée a été élaborée en 1940 par *Mallard*, elle part d'un modèle où les gaz frais (réactifs) et les gaz brûlés (produits de combustion) sont séparés par une mince zone de flamme (d'épaisseur δ_L) décomposée à son tour en une zone thermique (de réchauffage des réactifs) et une zone chimique (zone de réaction) (Figure 2.5).

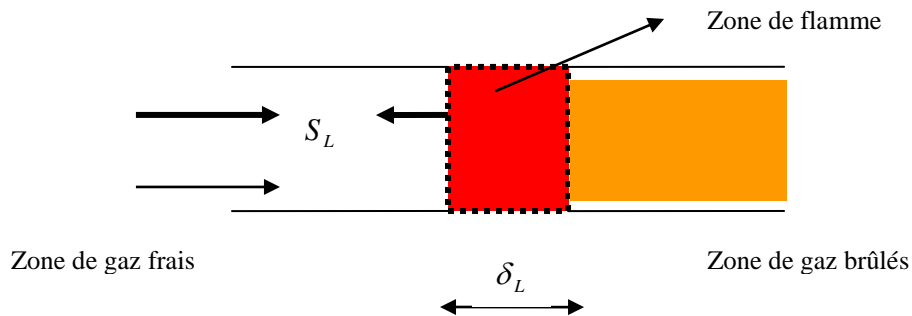


Figure 2.5 : Structure simplifiée d'une flamme plane laminaire.

De part et d'autres de la flamme, un grand gradient de température est observé (le rapport peut atteindre cinq à sept fois), la flamme de prémélange a tendance à se propager vers la zone des gaz frais avec une vitesse S_L qui dépend de plusieurs paramètres (composition du mélange frais, température initiale des réactifs, ...), mais elle varie généralement entre 0.1 et 1 mètres / seconde [30].

Lorsque le régime laminaire est dépassé, la flamme devient turbulente, sa vitesse S_T et son épaisseur δ_T augmentent selon la relation théorique [30] :

$$\frac{S_T}{S_L} = 1 + \alpha \cdot \left[\frac{U'}{S_L} \right]^n \quad (32)$$

α, n Sont des constantes voisines de l'unité.

U' Est la moyenne du carré de l'énergie cinétique de turbulence (appelée vitesse *RMS*).

Selon la relation théorique, la vitesse de la flamme turbulente dépend toujours du régime laminaire S_L , et croît avec le niveau énergétique de la turbulence U' (bien qu'on remarque expérimentalement une légère décroissance juste avant l'extinction de la flamme), mais elle en fait, aussi liée au caractère chimique et géométrique de l'écoulement.

L'épanouissement de la flamme (la forme du front de flamme) est aussi contrôlé par sa vitesse, *Damkolher* a montré que le rapport des surfaces de la flamme laminaire et turbulente, est égal à celui de leurs vitesses [30]:

$$\frac{S_T}{S_L} = \frac{A_T}{A_L} \quad (33)$$

Le rapport des sections, montre que la flamme turbulente est plus « éparpillée » que la flamme laminaire (le phénomène du *wrinkling*).

3.2. Les flammes de diffusion :

Dans les flammes de diffusion, les réactifs sont séparés par le front de la flamme et diffusent tous vers son milieu, le taux de consommation du combustible est totalement contrôlé par le phénomène de diffusion (et non pas par les lois de la cinétique chimique comme c'est le cas pour les flammes de prémélange). De telles flammes ne peuvent de se propager et leurs structures (formes) dépendent fortement du nombre de *Damkolher* local, alors que la température et le taux de réaction du combustible varient considérablement de part et d'autres de leurs cotés (Figure 2.6).

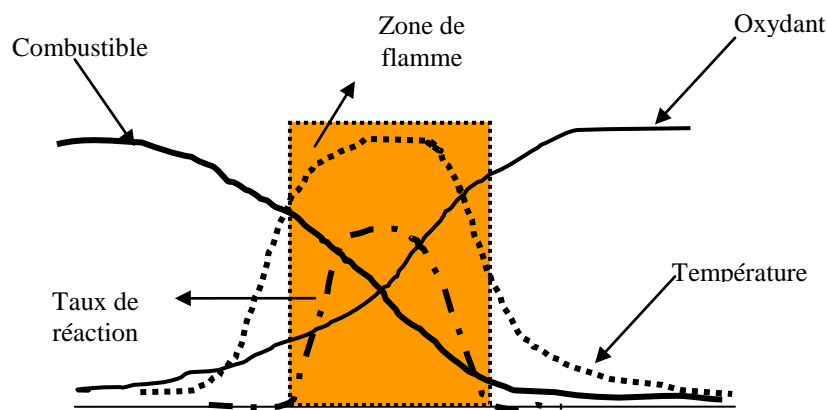


Figure 2.6 : Profils approximatifs de température et du taux de réaction dans une flamme de diffusion [30].

Analytiquement, une description plus détaillée de la structure de la flamme de diffusion peut être faite en se basant sur une formulation en scalaires passifs (noté *Z* et appelé variable de *Zeldovich*), définis comme une combinaison linéaire des fractions massiques des réactifs et choisis comme variables indépendantes vérifiant une équation de transport sans terme source (donc plus facile à résoudre). Dans certains cas particuliers, la température et les fractions massiques se présentent comme des fonctions linéaires simples de la seule variable indépendante *Z*.

3.3. Modèle à chimie infiniment rapide et non infiniment rapide :

De Soete [31] définit la combustion comme un ensemble de réactions chimiques, dites élémentaires, pour la majorité bimoléculaires, se terminant par l'oxydation d'un réactif initial appelé combustible (hydrocarbure) par un réactif appelé comburant (O_2). Cette processus est finalement très exothermique.

Les vitesses de formation et de destruction, de chaque espèce pendant la réaction chimique, permettent de calculer le taux de réaction \overline{W} [29] (équation 12, page 4). Ces informations regroupées dans le terme "cinétique chimique" sont essentielles en combustion. Un cas limite est atteint, l'équilibre chimique, lorsque les temps de formation des espèces sont infiniment rapides. Dès que les réactifs sont mis en contact à l'échelle moléculaire, ils forment instantanément des produits de combustion, sans passer par des espèces intermédiaires radicalaires.

Certains modèles de combustion, comme le modèle de *Magnussen* ou *EDM* [32] qui a été utilisé au cours de ce travail, se basent sur cette hypothèse de chimie infiniment rapide qui décrit bien la combustion des hydrocarbures classiques tel que c'est le cas pour le gaz naturel [33] [34].

4. Modélisation de l'interaction chimie turbulence :

Il s'agit maintenant de trouver des modèles pour exprimer les taux de réaction moyens, les \overline{W}_i , en fonction des variables connues, c'est-à-dire des valeurs moyennes elles-mêmes, et aussi en fonction des caractéristiques de la turbulence, puisque celle-ci doit jouer un rôle. Nous allons considérer d'abord le cas des flammes turbulentes où la chimie est très rapide par rapport à tout les processus de la dynamique des fluides, y compris la turbulence.

En principe, il existe trois types de modèles ; les modèles algébriques, stochastiques (*Pdf* présumée ou transportée) et les modèles géométriques basés sur la notion de densité de surface de flamme (Σ), qui est dans ce cas obtenue par une description matérielle. Ces derniers nécessitent une compréhension plus profonde des mécanismes de production et de destruction de la surface de la flamme [35].

Les modèles stochastiques consistent à utiliser une fonction densité de probabilité sont principalement utilisés si un variable (par exemple la fraction de mélange) est considérée, leurs extension aux cas multi-variables sans recourir à la supposition de l'indépendance statistique est particulièrement délicate [27], tandis que, la résolution de l'équation de

transport pour la *Pdf* abouti à des difficultés additionnelles liées à la modélisation du micro-mélange [27].

Le modèle de Macro-Mélange (*Eddy-dissipation*) :

Le modèle est basé sur la notion du *Eddy Break Up* ou *EBU* développé dans les années 1970 par *Spalding* [36] pour le calcul des flammes prémélangées, le concept d'*Eddy-dissipation* a été développé par *Magnussen* et *Hjertager* en 1976 [32] pour étendre le principe du modèle au cas des flammes non prémélangées. Celui-ci postule qu'on peut représenter le phénomène de combustion turbulente par des divisions successives (ou *Break-Up*), sous l'action du frottement turbulent, du domaine des gaz frais en éléments de plus en plus petits (appelés *eddies* ou *bouffées turbulentes*), et ce jusqu'à atteindre une taille limite à laquelle ces *bouffée*, contenant les réactifs supposés mélangés à l'échelle moléculaire, sont en contact suffisant avec les gaz brûlés pour que leurs température soit assez élevée pour réagir instantanément [19]. Dans le modèle de *Spalding*, ainsi que dans le modèle de *Magnussen* et *Hjertager*, implémenté dans *Fluent* sous le nom *Eddy-dissipation Model* ou *EDM*, la chimie est considérée comme infiniment plus rapide que le mélange (même turbulent) des réactifs, et la composition atteinte alors dans ces structures fines correspond à celle de l'équilibre chimique. Par conséquent, on peut supposer la vitesse de réaction moyenne comme inversement proportionnelle au temps caractéristique du mélange des grandes échelles de la turbulence et indépendante de la cinétique chimique. Le taux moyen net de production/destruction de l'espèce *i* dans la réaction *r* peut donc s'exprimer par:

$$\overline{W}_{i,r} = v'_{i,r} M_{w,i} A \rho \frac{\varepsilon}{k} \min \left(\frac{Y_{re}}{v'_{re,r} M_{w,re}}, B \frac{\sum_P Y_P}{\sum_N v''_{j,r} M_{w,j}} \right) \quad (34)$$

Où $M_{w,j}$ est le poids moléculaire de l'espèce *i*, ρ est la masse volumique du mélange, l'indice *re* représente le réactif donnant la valeur minimale de l'expression $\frac{Y_{re}}{v'_{re,r} M_{w,re}}$, l'indice *p* représente les produits de la réaction, *A* et *B* sont des constantes du modèle, leurs valeurs sont de 4 et 0.5 respectivement [33].

La relation (34) exprime que la vitesse de réaction est limitée par l'espèce en défaut, qui peut être un réactif, ce qui est logique, mais aussi les produits de combustion.

Ceci est un artifice qui permet de simuler l'inflammation du mélange réactif sous l'effet du préchauffage par les produits de combustion, ainsi que cela se produit en pratique dans un équipement de combustion, alors que l'absence de notion de cinétique dans ce modèle ne

permet nulle part de tenir compte de l'effet de la température d'inflammation. On suppose donc que, si les produits de combustion existent, c'est qu'on a atteint localement la température d'inflammation et donc que la réaction peut se produire. La conséquence de ceci est que, pour que la réaction de combustion puisse démarrer, il est obligatoire d'imposer une fraction non nulle de produits de combustion quelque part dans le domaine. Dès que la réaction a démarré, elle est supposée se maintenir pour autant que la turbulence soit présente ($k/\varepsilon > 0$) et il est donc impossible de simuler les phénomènes d'extinctions locales ou de décollement des flammes turbulentes avec ce modèle, néanmoins, dans le cas du four étudié, le problème principal est que la production de l'énergie cinétique est beaucoup plus importante que son taux de dissipation à cause des grandes vitesses d'injection du fluide dans la chambre de combustion par le brûleur, ce qui implique que la combustion se déroulera dans un temps caractéristique infiniment grand, ceci engendra des instabilités acoustique et de combustion [37], donc il est utile d'insister sur une interaction chimie-turbulence avec ce modèle.

5. Formation des oxydes d'azote :

Le terme oxydes d'azote, aussi désigné par NO_x , regroupe le monoxyde d'azote (NO), le dioxyde d'azote (NO_2) et le protoxyde d'azote (N_2O), formés au cours des réactions de combustion. Dans les conditions de fonctionnement industrielles, le NO est généralement l'espèce majoritaire, le N_2O étant émis en quantités infimes (de l'ordre du *ppm* [19]) et le NO_2 étant un intermédiaire formé à partir du NO et rapidement réduit en celui-ci. Les mécanismes significatifs en termes de pollution industrielle sont donc ceux qui conduisent à la formation du NO . On en distingue actuellement cinq ; le mécanisme du NO thermique (ou mécanisme de *Zeldovich*), le mécanisme du NO précoce (ou mécanisme du *Fenimore*), le mécanisme du N_2O intermédiaire, celui du NNH et enfin le mécanisme du NO du combustible. Ce dernier impliquant l'azote lié chimiquement dans la molécule de combustible, il concerne donc principalement les combustibles liquides et solides et n'est pas significatif dans le cas de la combustion du gaz naturel qui ne contient pas généralement d'azote lié.

Seuls les deux premiers mécanismes sont donc décrits dans les paragraphes qui suivent.

Le principal défi dans le calcul de la production de NO_x dans le cas des flammes de diffusion réside dans la difficulté de trouver un mécanisme valable pour la diversité des richesses (ou d'excès d'air) rencontrées dans les différentes zones de flamme [19]. Tomeczek et Gardon ont récemment proposé une combinaison des quatre mécanismes décrits ci après avec une adaptation des constantes de vitesse permettant de reproduire de manière

satisfaisante la production de NO dans les flammes industrielles de méthane-air. Ce modèle est n'est toutefois pas encore implémenté dans les codes commerciaux [19].

5.1. Mécanisme du NO thermique :

Elaboré par *Zeldovich* en 1947 [38], le premier mécanisme de formation du NO comprend les réactions suivantes :



Ce mécanisme est désigné dans la littérature sous le nom de "mécanisme de *Zeldovich* simplifié". Dans les années 1970, une troisième réaction a été ajoutée au mécanisme original, particulièrement dans les conditions près de la stochiométrie et les mélanges riches :



Conduisant aussi au "mécanisme de *Zeldovich* étendu".

L'ensemble des auteurs utilisent les constantes de vitesse k_i déterminées par *Hanson* et *Salimian* (reprises par exemple de [39]) pour les réactions 35,...37, pour calculer la vitesse de formation nette de NO . En supposant que la concentration en molécules de N_2 est stationnaire, la vitesse de formation de NO s'exprime par:

$$\frac{d[NO]}{dt} = 2k_1[N_2][O] \frac{\left(1 - \frac{k_{-1}k_{-2}[NO]^2}{k_1[N_2]k_2[O_2]}\right)}{\left(1 + \frac{k_{-1}[NO]}{k_2[O_2]}\right)} \quad (38)$$

Où $\frac{d[NO]}{dt}$ est exprimé en $mol/(m^3.s)$, par exemple. Si on pose l'hypothèse supplémentaire que la concentration en NO reste suffisamment faible pour négliger sa vitesse de destruction par rapport à sa vitesse de formation (ce qui est généralement le cas), l'équation (38) se simplifie alors en [40] :

$$\frac{d[NO]}{dt} = 2k_1[N_2][O] \quad (39)$$

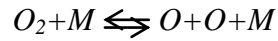
Où

$$k_1 = 1,8 \times 10^8 e^{-38370/T} \left(m^3 / mol.s\right) \quad (40)$$

Et où les concentrations sont exprimées en mol/m^3 .

Dans l'équation (37) la concentration en $[O]$ est nécessaire pour déterminer la vitesse de formation du NO . L'hypothèse de l'équilibre partiel du radical $[O]$ permet d'aboutir à sa concentration molaire par le biais de la réaction du troisième corps [41] :

$$(41)$$



D'où :

$$[O] = 36,64T^{1/2} [O_2]^{1/2} e^{-27123/T} \quad \text{gmol/m}^3 \quad (42)$$

Ce qui conduit généralement à une concentration partielle plus élevée en atome d'Oxygène.

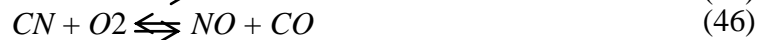
On désigne le *NO* formé par ce mécanisme par l'expression "NO thermique" en raison de la dépendance importante de la vitesse de formation du *NO* à la température ; celle-ci est due à la température d'activation très élevée de la réaction (35) (38000 K [19]), ceci rend la formation de *NO* par ce mécanisme significative lorsque la température du milieu dépasse 1800 K [42][40], ce qui en fait le mécanisme le prédominant dans les fours de procédés industriels à haute température, tels que les fours de cimenteries.

5.2. Mécanisme du *NO* précoce :

En 1970, Fenimore [43] découvre un nouveau mécanisme, qui conduit à une formation plus rapide de *NO* que le mécanisme de *Zeldovich*, qu'il baptise mécanisme du *NO* précoce ou *Prompt NO*, ce dernier est lié à la présence de radicaux CH_i résultant de la décomposition de la molécule de combustible dans la zone d'oxydation de la flamme [19]. Ces radicaux sont capables de briser la liaison de la molécule d'azote par des réaction caractérisées par des température d'activation moins élevées que celle de la réaction (35) et donc plus rapides ; parmi celles-ci, les principales sont :



Les radicaux *HCN* et *N* sont ensuite transformés en *NO* par les réactions suivantes:



et



La formation du *NO* précoce augmente lorsque la concentration en radicaux CH_i augmente, c'est-à-dire lorsque l'excès d'air diminue ; elle passe par un maximum puis diminue lorsque l'excès d'air diminue encore, en raison d'un manque d'oxygène nécessaire pour les réactions (46) et (47). *Miller* et *Bowman* [44] ont montrés que pour un défaut d'air de 17% et au-delà, ce schéma réactionnel cesse d'être rapide et que le *NO* formé est reconverti en *HCN*. En outre, les réactions du mécanisme de *Zeldovich*, en compétition avec celle de Fenimore, détruisent le *NO* formé (via $N + NO \rightarrow N_2 + O$, d'après [44]).

L'ensemble de ces voies réactionnelles forme donc un mécanisme très complexe. On considère toutefois généralement que la contribution du *NO* précoce au *NO* formé au total est significative surtout dans les flammes riches dans la température reste suffisamment faible pour que le mécanisme de *Zeldovich* ne soit pas prédominant. C'est le cas notamment des brûleurs prémélangés à combustion de surface, des brûleurs à combustion étagée et des turbines à gaz par exemple [40] [19]. La contribution du *NO* précoce dans les installations de combustion stationnaire classique (c'est-à-dire sans technique particulière de réduction des émissions de *NO thermique*) reste négligeable [19].

Le calcul de la formation du *NO* par ce mécanisme nécessite de disposer de concentrations en radicaux CH_i notamment. Généralement, celles-ci sont obtenues par des modèles semi-empiriques qui les relie à la fraction de carbone du combustible et à l'excès d'air global [19].

6. Calcul de la production de NO_x :

Pour calculer la teneur des produits de combustion en NO_x , *Fluent* résout une équation de transport pour la fraction massique de *NO*, Y_{NO} , du même type que les équations du bilan moyen :

$$\frac{\partial \rho Y_{NO}}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j Y_{NO}}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\rho D_{eff} \cdot \frac{\partial Y_{NO}}{\partial x_j} \right] + \omega_{NO} \quad (48)$$

Cette équation supplémentaire est toutefois résolue en supposant connus l'écoulement et les champs des variables scalaires ; elle intervient en post-traitement du calcul de la simulation en combustion, en supposant que les teneurs en *NO*, très faibles par rapport aux autres espèces stables de la combustion, n'influence pas le reste de la réaction, ni l'équilibre chimique, le terme source de l'équation de transport de Y_{NO} est calculé comme :

$$\omega_{NO} = M_{w,NO} \left(\frac{d[NO]_{th}}{dt} + \frac{d[NO]_{pr}}{dt} \right) \quad (49)$$

Où $M_{w,NO}$ est le poids moléculaire de *NO* et $\frac{d[NO]_{th}}{dt}$ et $\frac{d[NO]_{pr}}{dt}$ sont, respectivement, les vitesses de formation nette du *NO thermique* et *précoce*.

6.1. Vitesse de formation du *NO thermique* :

Le mécanisme de formation du *NO thermique* est décrit au paragraphe 5.1 ; la vitesse de formation nette est calculée suivant la relation (38), dans laquelle les constantes de vitesse sont fournies par *Hanson* et *Salimian* [39]. Si le modèle de combustion utilisé dans le calcul

principal est suffisamment détaillé pour inclure les radicaux O et OH , les concentrations locales nécessaires dans la relation (38) sont connues. En revanche, si la réaction de combustion ne contient pas ces espèces, leur concentration est calculée à partir d'une hypothèse supplémentaire :

- Pour les radicaux O : leur concentration peut être calculée en supposant l'équilibre atteint avec O_2 : $[O] = k_p [O_2]^{1/2}$ où la constante k_p est tirée de [40] ; cependant, on observe généralement que les concentrations en radicaux O peuvent être localement significativement plus élevées que leur valeur d'équilibre, ce qui conduit à sous estimer la concentration en NO calculée de cette manière [40]. *Fluent* propose donc également une expression modifiée pour k_p conduisant à des concentrations en O plus élevée, intitulée approche par équilibre partiel (*Partial Equilibrium approach*).
- Pour les radicaux OH : l'approche consiste à négliger la réaction (37) du mécanisme thermique en partant du principe que $k_2 [O_2]_{eq} \gg k_3 [OH]_{eq}$; ceci est supposé réaliste en conditions de combustions pauvre (c'est-à-dire avec excès d'air)[40], ce qui est pratiquement notre cas.

6.2. Vitesse de formation du NO précoce :

Le mécanisme de formation du NO précoce est décrit au paragraphe 5.2. Dans le modèle proposé dans *Fluent*, on postule que c'est la réaction (43) qui contrôle la vitesse de formation du NO précoce ; celle-ci peut donc être calculée à partir de la concentration en CH et N_2 . À nouveau, des hypothèses sont nécessaires pour relier la valeur de la concentration en CH à celles des espèces stables. Le modèle proposé par *De Soete* [31] donne $[CH] = k_{p2} [O_2]^a [Fuel]$, où la constante k_{p2} dépende de la nature du combustible et l'exposant a est lié à la fraction molaire en O_2 dans la flamme suivant une relation empirique. Ce modèle semble toutefois donner des résultats insatisfaisants dans des conditions riche d'hydrocarbures plus lourds que l'éthylène ; la valeur de la constante k_{p2} est donc multipliée dans *Fluent* par un coefficient correctif dépendant du nombre d'atomes de carbone du combustible et de l'excès d'air global de la réaction de combustion [40].

6.3. Calcul des vitesses moyennes de formation du NO :

Comme celles qui décrivent la réaction de combustion, les relations précédentes sont fortement non linéaires avec la température et les concentrations. A nouveau, si l'écoulement est turbulent, il est nécessaire de connaître la distribution statistique des variables utilisées

dans ces relations pour en déduire la valeur moyenne du terme source de l'équation de transport de ω_{NO} (équation .48) par :

$$\bar{\omega}_{NO} = \iiint \dots \int \omega_{NO}(V_1, V_2, \dots, V_n) \varphi(V_1, V_2, \dots, V_n) dV_1 dV_2 \dots dV_n \quad (50)$$

Où $V_i, i=1 \dots n$ représente l'ensemble des variables dont dépend la vitesse de formation du NO , en l'occurrence, la température et/ou les différentes concentrations d'espèces. φ représente la fonction densité de probabilité présumée (*Pdf*). En supposant que toutes les variables V_i peuvent être considérées comme statistiquement indépendantes, la fonction conjointe $\varphi(V_1, V_2, \dots, V_n)$ correspond simplement au produit des fonctions $\varphi(V_i)$ des variables prises séparément. A nouveau, la forme des fonctions $\varphi(V_i)$ est postulée par une fonction de type *Pdf bêta* [40], dont les paramètres dépendent de la valeur moyenne et de la variance de variables considérées ; les valeurs moyennes de la température et des concentrations sont disponibles en tant que solution de combustion, mais pas leurs variance. Celle-ci est modélisée dans le post-processeur de calcul des NO_x à partir des gradients locaux des valeurs moyennes et des grandeurs de la turbulence et leurs formulations sont données dans [40] par exemple.

Le calcul des NO_x a été réalisé à posteriori en utilisant le modèle thermique, avec l'hypothèse de l'équilibre partiel pour le calcul des radicaux. Une fonction densité de probabilité conjointe sur T en O_2 a été utilisée lorsque le modèle *EDM* est été utilisé pour le calcul de la combustion. Les résultats des calculs de NO_x sont présentés au chapitre quatre.

7. Le modèle de rayonnement :

Le rayonnement thermique est un phénomène d'origine électromagnétique émis par les molécules du milieu lorsqu'elles sont le lieu de transitions de niveaux électroniques. L'énergie rayonnée lors de ces transitions se situe dans les zones du spectre électromagnétique correspondant aux domaines de l'ultraviolet, du visible et de l'infrarouge. Dans la plupart des applications en combustion, les transferts thermiques par rayonnement s'effectuent à des longueurs d'ondes appartenant au domaine du visible et de l'infrarouge ($0.1 \rightarrow 100 \mu m$) [13]. Les configurations rencontrées peuvent le plus souvent être ramenées à l'image générique d'un volume de mélange de gaz confiné dans une enceinte aux parois solides. Le rayonnement intervient comme un terme source dans l'équation de conservation de l'énergie, son influence est incontournable dans les domaines industriels et surtout lorsqu'il s'agit de la prédiction des émissions polluantes de type NO_x [45].

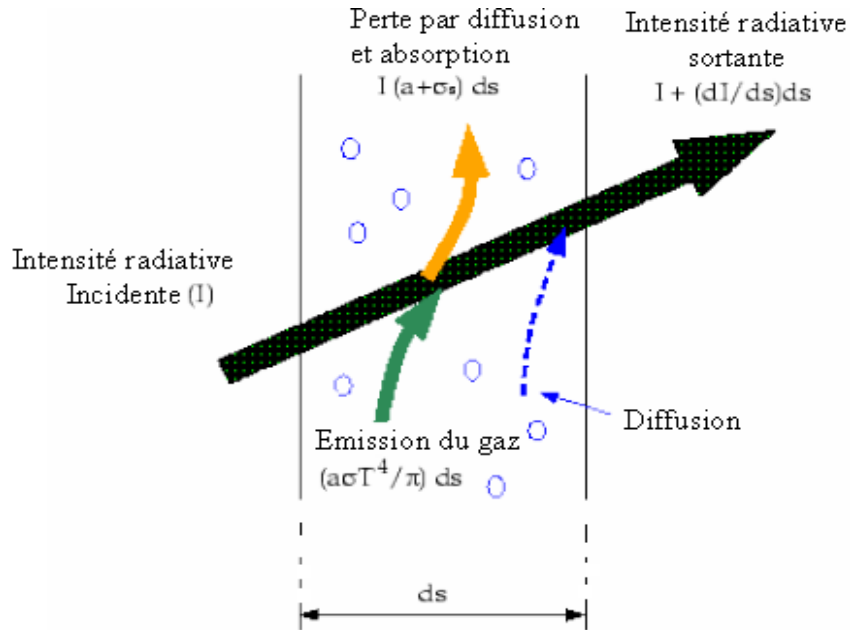


Figure 2.7 : Transfert de chaleur par rayonnement [46].

Les transferts radiatifs (Figure 2.7) sont gouvernés par l'Equation de transfert Radiatif (notée *ETR*) qui s'exprime [46] par:

$$\frac{dI(\vec{r}, \vec{s})}{dS} = -(a + \sigma_s)I(\vec{r}, \vec{s}) + a\left(\frac{\sigma T^4}{\pi}\right) + \frac{\sigma_s}{4\pi} \int_0^{4\pi} \Phi(\vec{s}, \vec{s}') d\Omega' \quad (51)$$

Cette relation montre que la variation de l'intensité radiative I , en un point (représenté par son vecteur position \vec{r}) et dans la direction \vec{s} est liée à :

- La perte de l'intensité radiative dans la direction \vec{s}' , due à l'absorption et la diffusion de I par le milieu participant, premier terme du membre de droite de la relation (51), l'absorption et la diffusion sont représentées respectivement par le coefficient d'absorption a et de diffusion σ_s de ce milieu. Dans le cas d'un milieu gazeux exempt de particules solides, ce qui est le cas des produits de la combustion du gaz naturel pour autant que celle-ci se produise sans production de suie, le coefficient de diffusion peut être omis dans l'équation (51) [19].
- L'accroissement de I due à l'émission propre du milieu gazeux, exprimée par le second terme du membre de droite (où σ est la constante de *Stefan-Boltzmann*) et à la diffusion, dans la direction \vec{s} des intensités provenant de toutes les directions \vec{s}' environnantes, représenté par le dernier terme de la relation (51). La fonction de phase $\Phi(\vec{s}, \vec{s}')$ caractérise la manière dont le milieu redirige les directions \vec{s}' vers les

direction \vec{s} par diffusion, à nouveau, dans le cas d'un milieu purement gazeux, ce dernier terme peut être omis de l'*ETR* [19].

La relation (51) Constitue la contribution de la direction \vec{s} au terme source radiatif de l'équation de conservation de l'énergie ; ce dernier peut donc être calculé en sommant les contributions de toutes les directions.

Le calcul de la solution de la relation (51), pose un double problème, dans le premier problème, il nécessite la connaissance de la valeur du coefficient a (et éventuellement σ_s), qui caractérise l'émission et l'absorption du rayonnement électromagnétique par le milieu gazeux et qui est liée aux propriétés de vibration et de rotation des molécules qui composent ce milieu [13], la propriété d'absorption est donc répartie dans un domaine spectral donné et dépend de la composition et de la température du milieu, elle peut être calculée en considérant celle d'un milieu gris équivalent, cette absorption globale est obtenue à partir de corrélations polynomiales impliquant des coefficients de pondération dépendant de la température et des pression partielles en les différents constituants absorbants du milieu (dans le cas du gaz naturel, les principaux gaz absorbants sont le CO_2 , l' H_2O et éventuellement le CO [19]). Au cours de ce travail, le modèle de *la somme pondérée des gaz gris* (*WSGGM*, pour *Weighted Sum of Gray Gases Model*) sera utilisé et décrit par la suite.

Le second problème rencontré dans la résolution de l'*ETR* est lié à sa forme intégral-différentielle et sa forte non linéarité, qui ne peut être résolue que moyennant un certain nombre d'approximations, différentes méthodes de résolution existent et diffèrent par le niveau de simplification au problème initial. Pour chaque problème, il faut bien choisir le modèle de rayonnement approprié, qui en fait, basé sur certains critères [46]. L'*épaisseur optique* est un bon indicateur pour le choix du modèle [46], il est défini par le produit du coefficient d'absorption (a) par une longueur caractéristique (L), qui peut être prise comme le diamètre interne, dans le cas d'une chambre de combustion [46]. Un milieu gazeux est considéré comme optiquement mince lorsque la valeur de l'épaisseur optique est inférieure à l'unité ($a \times L < 1$), dans ce cas, les modèles appropriés sont le modèle des *Ordonnées Discrètes* (*DO*, pour *Discrete Ordinates*) et le modèle des transferts discrètes (*DTRM*, pour *Discrete Transfer Radiation Model*) [19] [46]. L'approche *DO* est indiquée pour traiter le problème de la combustion, où des dégagements de chaleur locaux importants sont attendus à l'intérieur du domaine dans la zone de réaction. Pour atteindre une précision comparable à celle des calculs en *DO*, le modèle *DTRM* nécessite une discrétisation angulaire plus fine et donc un effort de calcul supplémentaire [19], le modèle *DO* qui appartient à la famille *des*

méthodes des flux est basé sur la théorie développée originellement par *Chui et Raithby* [47], où chaque octant de l'espace angulaire complet 4π autour de chaque point du domaine est discrétisé en $(N_\theta \times N_\phi)$ angles solides (où θ est l'angle polaire et ϕ l'angle azimutal), comprenant chacun un seul rayon globalisant l'intensité dans l'angle solide considéré.

Le modèle *WSGGM* [48] calcule la valeur du coefficient d'absorption a , nécessaire dans la relation (51), à partir de l'émissivité globale ϵ du gaz :

$$a = \frac{\ln(1-\epsilon)}{s} \quad (52)$$

dans la relation (52), s est une dimension caractéristique représentant le trajet optique moyen dans le domaine. L'émissivité globale est calculée comme une somme pondérée des émissivités ϵ_j d'un ensemble de gaz gris j équivalents, chacun d'entre eux représentant une zone du spectre :

$$\epsilon = \sum_{j=0}^J a_{\epsilon,j} \epsilon_j \quad (53)$$

Dans cette relation, ϵ_j est l'émissivité du j^{me} gaz et $a_{\epsilon,j}$ représente le facteur poids qui lui est accordé dans le coefficient global, chaque émissivité ϵ_j peut être calculée par :

$$\epsilon_j = 1 - e^{-k_j p s} \quad (54)$$

où k_j est le coefficient d'absorption du j^{me} gaz et p est la somme des pressions partielles des gaz absorbants dans le milieu gazeux global. Les coefficients de pondération $a_{\epsilon,j}$ dépendent du nombre de gaz considéré, de la composition du milieu gazeux en gaz absorbants et de sa température.

Une fois que ces modèles sont choisis, l'ensemble formé par les équations, de continuité, de quantité de mouvement, de l'énergie, de transport de turbulence (k, ϵ) et de bilan d'espèces aux quelles on ajoute l'équation d'état du mélange constituent un ensemble fermé d'équations aux dérivées partielles, c'est-à-dire qu'il ne nécessite plus que des conditions aux limites et initiales pour pouvoir être intégré. C'est à ce niveau là que se situe le calcul numérique s'impose, en effet, les équations ne sont pas intégrables analytiquement, et les méthodes numériques, comme celles des volumes finis (Annexe A) constituent la voie la plus convenable pour les calculs.

Chapitre 03 : Thermochimie de la combustion du méthane

Les présents calculs seront purement thermochimiques, les effets aérodynamiques de l'air ne seront pas pris en considération dans les équations de bilan.

Bien que l'aérodynamique de l'air (turbulence surtout) est primordiale pour l'entretien de la flamme, son effet sera examiné sur la production des NO_x et sur l'efficacité de la combustion dans le chapitre suivant, cet effet fera l'objet d'une simulation numérique via le code commercial *Fluent*.

Les calculs thermochimiques présentent l'avantage de fournir les informations concernant la structure de flamme, comme la température de flamme adiabatique (*TFA*), la proportion, le type et le nombre d'espèces chimiques les plus probables dans le mélange, la vitesse fondamentale de la flamme (S_L , pour une flamme de prémélange), ainsi que les propriétés de transport moléculaire (la viscosité dynamique et la conductivité thermique) du mélange.

Ces calculs seront faits d'une manière analytique pour le cas d'une combustion complète (CO_2 , H_2O comme produits), et feront l'objet d'un fichier de données qui sera communiqué à un code de calcul des équilibres chimiques nommé *CEA (Chemical Equilibrium and Applications)* [49].

Dans les installation modernes où l'air utilisé est stocké sous forme de liquide, il est important d'analyser l'effet du pourcentage d'oxygène dans l'oxydant sur les propriétés physico-chimiques du mélange, ce n'est pas le cas du four de la cimenterie de *Chlef*, où l'air primaire est directement prélevé de l'extérieur amont du brûleur, et l'air secondaire est absorbé de l'aval au niveau de la sortie du foyer, en l'occurrence, il est important d'analyser l'effet du préchauffage de l'air, et de la pression de combustion sur le comportement thermochimique du méthane.

1. Composition et caractéristiques du gaz naturel utilisé à l'ECDE :

Le gaz naturel distribué sur le territoire national peut provenir de différents sites de production [50], sa composition est donc soumise à des variations fonctions des stratégies d'approvisionnement, elles-mêmes pouvant varier suivant les périodes de l'année. Le gaz naturel reste cependant un mélange composé essentiellement d'alcanes et de gaz inertes, avec une teneur majoritaire en méthane d'au moins 85 % quelle que soit la provenance du gaz. Une composition moyenne de gaz naturel de type Hassi R'mel et Adrar est donnée, à titre indicatif dans le Tableau 3.1:

Constituant	Formule	Hassi R'mel % Molaire	Adrar % Molaire
Azote	N ₂	6,15	2,30
Oxyde de carbone	CO ₂	0,19	6,12
Méthane	CH ₄	85,10	88,31
Ethane	C ₂ H ₆	5,90	2,48
Propane	C ₃ H ₈	1,92	0,61
Iso-butane	i-C ₄	0,24	0,06
N-butane	nC ₄	0,33	0,06
N-pentane	nC ₅	0,17	0,06

Type de gaz (1996)	Pouvoir calorifique (th/Nm ³) (PCS)	Densité	Indice de Wobbe (th/Nm ³)
Hassi R'mel	9,45	0,6399	11,81
Adrar (Sbâa)	8,16	0,6449	10,16
Propane	24,35	1,562	19,48

Tableau 3.1: Compositions moyennes et propriétés des gaz naturels distribués en Algérie [50].

Le méthane étant l'espèce majoritaire entrant dans la composition du gaz naturel, les caractéristiques d'un gaz naturel sont donc évidemment assez proches de celles du méthane, ce qui fait que notre simulation considérera un mélange de 100% méthane.

1.1. Indice de Wobbe et pouvoir calorifique :

L'indice de *Wobbe*, noté W et exprimé en kWh/Nm³, est directement lié au pouvoir calorifique supérieur, noté PCS , exprimé en unité d'énergie par unité de volume (kWh/Nm³ par exemple).

$$W = \frac{PCS}{\sqrt{\text{densité}}} \quad (55)$$

La densité est le rapport des masses volumiques entre le gaz naturel et l'air pris dans les mêmes conditions de pression et température.

Pour un injecteur et une pression de service donnés, la puissance délivrée par la combustion est proportionnelle à l'indice de *Wobbe*. On fait la distinction entre le pouvoir calorifique supérieur (PCS) et le pouvoir calorifique inférieur (PCI) selon que l'eau obtenue par combustion se trouve à l'état liquide ou à l'état gazeux. La seule grandeur véritablement utile en pratique est le PCI , puisque, dans les produits de combustion des moteurs et des brûleurs, l'eau est rejetée sous forme de vapeur. Une méthode de calcul du pouvoir

calorifique, parfois utilisée lorsqu'on ne connaît d'un composé que son enthalpie massique de formation extraite des tables de données thermodynamiques tel que la table de JANAF [17]. Le PCI massique (PCI_m) s'obtient alors en utilisant la relation générale de thermochemie dans les conditions normales de pression et de température (1 bar et 25 °C) :

$$\Delta h^0 = \sum(\Delta h^0)_p - \sum(\Delta h^0)_r$$

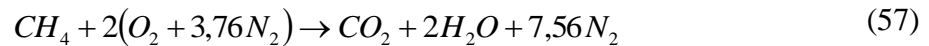
Avec Δh^0 : Variation d'enthalpie massique, ou effet thermique, de la réaction de combustion (égale en valeur absolue mais de signe contraire au PCI_m)

$\sum(\Delta h^0)_p$ et $\sum(\Delta h^0)_r$: sommes des variations d'enthalpie massique des réactions de formation, à partir des produits (indice P) et des réactifs (indice R).

Pour le méthane le PCI_m égal à 50 009 kJ / kg et la densité =0,5537 [51].

2. La combustion stoechiométrique du méthane :

L'équation chimique de combustion s'écrit comme suite :



On appelle stoechiométrie la composition du mélange air-carburant requise pour obtenir une combustion complète, selon l'équation précédente. Le rapport stoechiométrique r est le quotient des masses respectives m_a et m_c d'air et de carburant mises en présence dans les conditions stoechiométriques :

$$r = (m_a / m_c)_{st} \quad (58)$$

r est généralement compris entre 13 et 15 pour les hydrocarbures, plus précisément $r = 17,23$ pour le méthane [51].

On admet pour l'air la composition en volume de 20,9 % d' O_2 et 79,1 % de N_2 (l'argon, dont la teneur volumique dans l'air est 0,93 %, et les autres constituants présents à l'état de traces sont assimilés à l'azote).

3. Expression et calcul de la richesse :

Dans les applications industrielles de la combustion (moteurs, turbines, foyers, etc.), les conditions de combustion ne sont pas nécessairement celles correspondant à la stoechiométrie et se caractérisent soit par un excès, soit par un défaut de carburant par rapport à l'oxygène. La composition du milieu réactionnel s'exprime alors par la richesse ϕ , définie par la relation:

$$\phi = \frac{(m_c / m_a)_{re}}{(m_c / m_a)_{st}} \quad (59)$$

avec $(m_c / m_a)_{re}$ rapport des masses respectives m_c et m_a de carburant et d'air effectivement utilisées.

La richesse s'écrit également en fonction du rapport stoechiométrique r :

$$\phi = (q_{mc} / q_{ma})r \quad (60)$$

Avec :

q_{ma} débit-masse d'air,

q_{mc} débit-masse de carburant.

La richesse se rapporte donc au réactif le plus noble, c'est-à-dire le carburant, et le mélange est riche ou pauvre selon que le carburant se trouve en excès ou en défaut.

En pratique, la combustion pourra se dérouler dans des conditions de richesse très variables selon les types d'installations ou d'engins considérés. Dans les réacteurs d'avion, dans les turbines, ainsi que dans les fours et foyers industriels, la combustion se déroule en milieu pauvre ou, très exceptionnellement, stoechiométrique.

4. Limites inférieure et supérieure d'inflammabilité :

Lorsque l'on considère un mélange d'air, de carburant et éventuellement de diluant, l'expérience montre que la propagation de la flamme n'est possible qu'à l'intérieur d'un certain domaine de composition [51]. Les limites d'inflammabilité inférieure L_i et supérieure L_s caractérisent les compositions extrêmes en carburant entre lesquelles le système est inflammable, l'existence de ces limites s'interprète à la fois par des raisons d'ordre thermique et cinétique.

Les limites d'inflammabilité varient également en fonction des conditions expérimentales : température, pression, dilution de l'oxygène dans l'air. Une élévation de température entraîne toujours une augmentation de L_s et une réduction de L_i [51], l'influence de la pression est plus complexe et, selon les carburants, on peut observer à haute pression soit un élargissement, soit un rétrécissement du domaine d'inflammabilité. La dilution de l'oxygène dans l'air contribue toujours à restreindre les possibilités d'inflammation, cette action se manifeste sur la limite supérieure L_s [51].

Pour le méthane les limites d'inflammabilité obtenues dans l'air, à pression atmosphérique, à 25 °C et exprimés en terme de richesse varient entre 0,5 et 1,7 [51], correspondant à un rapport de mélange allant de 11,17 à 38.

5. Les différents types de modèles utilisés en combustion :

Dans la combustion d'un hydrocarbure, on peut distinguer trois stades qui diffèrent par les produits formés et le bilan énergétique locale [52], la Première étape où l'hydrocarbure initial se dégrade en hydrocarbures intermédiaires oléfiniques plus légers, ces intermédiaires majoritaires, pour des alcanes jusqu'en C_{18} , sont respectivement l'éthylène puis le propène; le bilan énergétique de cette première étape est sensiblement nul, du fait de la compensation entre l'exothermicité de la réaction d'oxydation de l'hydrogène et l'endothermicité des réactions de pyrolyse [52], durant le second stade, on assiste à une oxydation des oléfines intermédiaires avec production de monoxyde de carbone, cette étape est faiblement exothermique, en fin, le monoxyde de carbone s'oxyde en dioxyde de carbone, d'une manière fortement exothermique et produit la majeure partie de l'énergie totale libérée par la combustion.

5.1 Les schémas globaux à une seule réaction :

Considérons l'équation d'une réaction irréversible globale à une seule étape de la combustion complète d'un hydrocarbure C_xH_y . Dans le cadre d'une hypothèse de chimie rapide, [53] cette équation s'écrit :



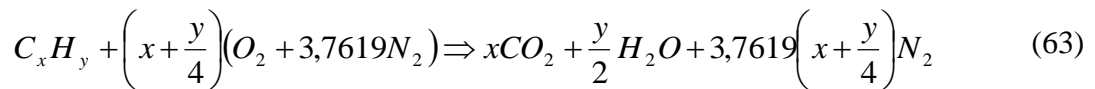
avec $\mathcal{G}_{C_xH_y}$ et \mathcal{G}_{O_2} , les coefficients stoechiométriques de carburant et de l'oxygène dans les réactifs, \mathcal{G}_{CO_2} et \mathcal{G}_{H_2O} les coefficients stoechiométriques de CO_2 et H_2O dans les produits et \mathcal{G}_{N_2} le coefficient stoechiométrique de l'élément inerte N_2 .

Dans l'hypothèse où l'air est un mélange composé de 21% de O_2 et 79% de N_2 en volume (pour chaque mole de O_2 dans l'air, il y a 3,76 moles de N_2), le bilan de la réaction chimique à la stoechiométrie permet d'en déduire les coefficients stoechiométriques.

Ces coefficients, prennent les valeurs suivantes :

$$\begin{aligned}
 \mathcal{G}_{C_xH_y} &= 1 \\
 \mathcal{G}_{O_2} &= \left(x + \frac{y}{4}\right) \mathcal{G}_{C_xH_y} \\
 \mathcal{G}_{CO_2} &= x \\
 \mathcal{G}_{H_2O} &= y/2 \\
 \mathcal{G}_{N_2} &= 3,7619 \left(x + \frac{y}{4}\right)
 \end{aligned} \tag{62}$$

L'équation (61) peut donc s'écrire de la façon suivante :



A l'aide de l'équation (58) on peut déterminer la relation stoechiométrique air-carburant par :

$$\left(\frac{m_{air}}{m_{C_xH_y}}\right)_{st} = \frac{\left(x + \frac{y}{4}\right) (O_2 + 3,7619 N_2)}{C_xH_y} \tag{64}$$

laquelle peut s'écrire de la façon suivante :

$$\left(\frac{m_{air}}{m_{C_xH_y}}\right)_{st} = \mathcal{G}_{st} \frac{M_{air}}{M_{C_xH_y}} \tag{65}$$

où M_{air} et $M_{C_xH_y}$ sont respectivement les masses molaires de l'air et du carburant ; \mathcal{G}_{st} est le coefficient stoechiométrique, s'exprimant par :

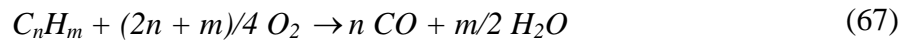
$$\mathcal{G}_{st} = \left(x + \frac{y}{4}\right) (4,76) \tag{66}$$

C'est le schéma qui sera appliqué au cours de la simulation de la combustion du méthane dans le chapitre quatre.

Ces schémas à une seule réaction supposent que les seuls produits formés sont CO_2 et H_2O et ne permettent pas de représenter les détails d'inflammation liés à l'accumulation des composés intermédiaires. La température calculée est sensiblement plus élevée que celle mesurée dans la flamme, conséquence de la non prise en compte des équilibres entre CO_2 et CO et entre H_2O et H_2 , en fin de réaction.

5.2 Les schémas globaux à deux réactions :

On représente la combustion de l'hydrocarbure par une séquence de deux réactions (la première irréversible et la seconde réversible) :



Dans ces schémas, la température de flamme peut être calculée avec une bonne précision tout comme la concentration en monoxyde de carbone à l'équilibre. Mais ces schémas rendent compte de manière insuffisante de la nature séquentielle de la combustion des hydrocarbures. La phase initiale d'oxydation précédant l'élévation de température n'apparaît pas.

5.3 Les schémas semi globaux à plusieurs étapes :

Ce schéma développé par *Hautman et coll.* [54] représente la combustion de l'hydrocarbure par une première étape globale produisant de l'éthylène :



suivie de trois autres équations correspondant respectivement à l'oxydation de l'éthylène, l'équilibre entre CO_2 et CO et l'équilibre entre H_2O et H_2 :



Ce schéma prend en compte des étapes principales de la combustion des hydrocarbures et permet de représenter l'accumulation d'éthylène comme composé intermédiaire. Il donne aussi une représentation correcte du profil de concentration de l'hydrocarbure initial en fonction du temps ; il prend en compte les processus compétitifs entre produits intermédiaires et produits initiaux au cours de la réaction.

5.4 Les schémas quasi globaux :

Edelman et Fortune [55] proposent un mécanisme avec une étape globale suivie de neuf réactions élémentaires pour l'oxydation de CO et H_2 . *Edelman et Harsha* [56] proposent une autre version de ce mécanisme avec la même réaction globale,



suivie de 21 réactions élémentaires pour le système CO, H_2, CO_2 .

Ce mécanisme permet de calculer avec précision la température des gaz brûlés et leur composition, mais il ne permet pas de représenter correctement les premières étapes de la combustion :

- Les réactions de l'hydrocarbure initial avec les atomes et radicaux ne sont pas prises en compte.
- Les hydrocarbures intermédiaires n'apparaissent pas.

Ceci a pour conséquence une mauvaise estimation des concentrations en atomes, en radicaux et en monoxyde de carbone, pendant une partie de la réaction. Une amélioration de ce mécanisme a été apportée par *J. Duterque et coll* [57], en subdivisant la première étape globale en deux étapes mettant en jeu des composés intermédiaires.

5.6 Les mécanismes cinétiques détaillés :

Grâce à la nécessité aux méthodes de calcul de plus en plus efficaces, de calculateurs de plus en plus performants et grâce à une connaissance limitée des paramètres cinétiques d'un nombre de réactions de plus en plus grand, il est impossible d'introduire les schémas cinétiques détaillés pour modéliser l'oxydation des hydrocarbures dans un code de *CFD*, autrement dit, ils demanderaient un nombre important des équations de conservation à résoudre [19]. Cependant, on a jugé utile de donner quelques notions sur ces derniers et leur implémentation dans les codes de *CFD* reste comme une perspective future.

5.6.1. Le mécanisme réactionnel : Principe

Le mécanisme ou schéma cinétique détaillé est un ensemble de réactions chimiques, pour la plupart élémentaires. Les autres réactions transcrivent globalement des processus complexes où les espèces intermédiaires ont été négligées dans la mesure où elles n'affectent pas les prévisions du modèle. Pour n espèces, on peut avoir n^2 paires de réactifs et pour chaque paire, il y a un nombre donné de produits possibles. L'écriture du mécanisme peut se faire à partir des espèces les plus simples, jusqu'à l'hydrocarbure initial ; c'est ainsi que l'on peut distinguer le système H_2/O_2 , le système $CO/H_2/O_2$, le système espèces intermédiaires/ H_2/O_2 et enfin la partie propre à l'hydrocarbure initial. Pour qu'un mécanisme soit validé, il faut qu'il soit testé dans un grand nombre de conditions expérimentales, car des réactions élémentaires données peuvent jouer un rôle différent pour des régimes expérimentaux différents, par exemple, les réactions entre un hydrocarbure et l'hydrogène atomique sont importantes pour les mélanges riches et moins importantes dans le cas des mélanges pauvres pour lesquels les réactions avec le radical hydroxyle et l'oxygène atomique

prédominant, de même, en fonction de la température, l'importance relative des différentes réactions peut subir des variations notables.

En plus des processus élémentaires, on peut être amené à écrire des étapes globales, faute de connaître le cheminement réactionnel exact ou pour éviter de compliquer inutilement le mécanisme par l'introduction d'espèces intermédiaires non indispensables.

5.6.2. Equation de vitesse :

Pour modéliser l'oxydation des hydrocarbures, il est apparu nécessaire d'adopter une manière uniforme pour exprimer la vitesse de réaction en fonction de la température. On utilise généralement la formulation modifiée de l'expression d'Arrhenius :

$$k^* = A_I * T^b * \exp(-E/RT) \quad (74)$$

, où k^* représente la constante de vitesse, A_I le facteur de fréquence, E l'énergie d'activation, R la constante des gaz parfaits et T la température en degrés Kelvin. L'exposant de T est nécessaire pour rendre compte de l'écart observé par rapport à la loi d'Arrhenius classique si l'on considère un large domaine de température.

L'évaluation des vitesses de réaction est difficile et longue et n'a pas été menée à bien dans certains cas, ce qui conduit à employer dans les mécanismes de combustion des données cinétiques incertaines.

L'utilisation de la théorie de l'état de transition et autres méthodes théoriques peuvent donner de bonnes évaluations des vitesses des réactions élémentaires et les études de modélisation peuvent fournir des valeurs estimées des vitesses, en particulier pour des réactions très difficiles à étudier expérimentalement.

Un autre élément essentiel pour les études de modélisation est la connaissance précise des caractéristiques thermochimiques des espèces intervenant dans le mécanisme (chaleur de formation, chaleur spécifique, entropie, enthalpie) ce qui malheureusement n'est pas toujours possible, en particulier pour les espèces intermédiaires fugaces. Ainsi, il peut arriver que les modèles soient incapables de refléter l'expérience, à moins d'assigner à des constantes de vitesses bien établies des valeurs très différentes de celles connues, invariablement, ceci indique que le mécanisme proposé est incomplet ou bien qu'une partie du mécanisme est incorrecte ou bien encore que le modèle physique est erroné [52]. Outre la dépendance de la température, la constante de vitesse peut dépendre de la pression ; c'est un phénomène encore plus difficile à exprimer.

Les mécanismes d'oxydation des hydrocarbures ont une structure hiérarchisée schématisée dans la Figure 3.1 ci-dessous :

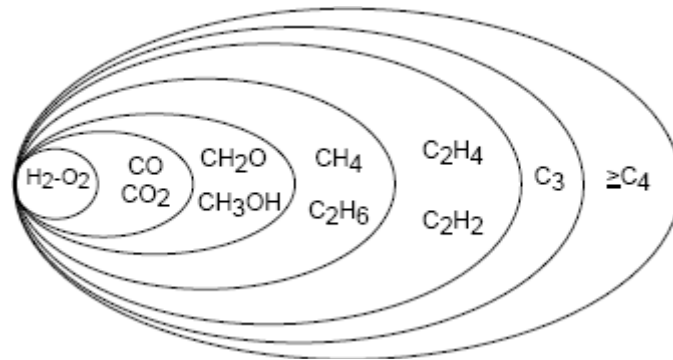


Figure 3.1: Structure hiérarchisée des mécanismes détaillés [52].

On distingue les mécanismes dits de basse température et de haute température. Le mécanisme de haute température est donné pour le méthane (Figure 3.2) :

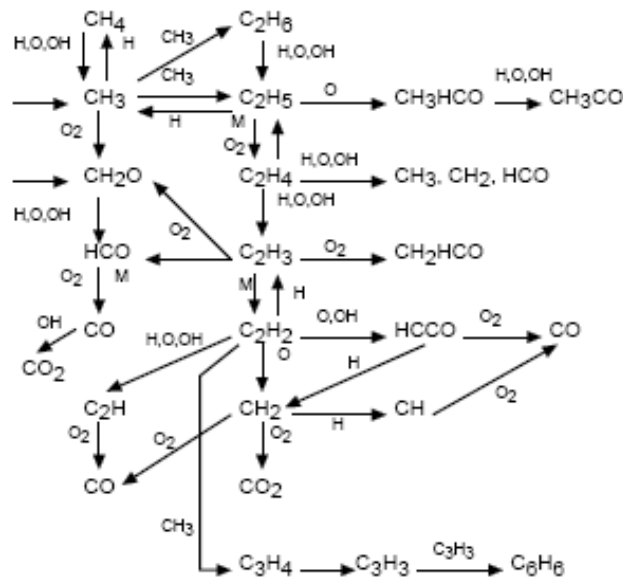


Figure 3.2 : Oxydation du méthane [52]

6. Composition des produits de combustion :

En réalité, la composition du mélange final est toujours beaucoup plus complexe et elle dépend, en plus des conditions de combustion (température, pression, % O_2), de la richesse.

Dans la (Figure 3.3), on donne l'influence de la richesse sur la composition finale des produits de combustion dans un point de fonctionnement avec une température d'air de 600K. Ainsi, les espèces représentées dans (la Figure 3.5) ont une fraction massique importante, alors que les espèces ayant des fractions massiques inférieures à 10^{-6} sont négligées.

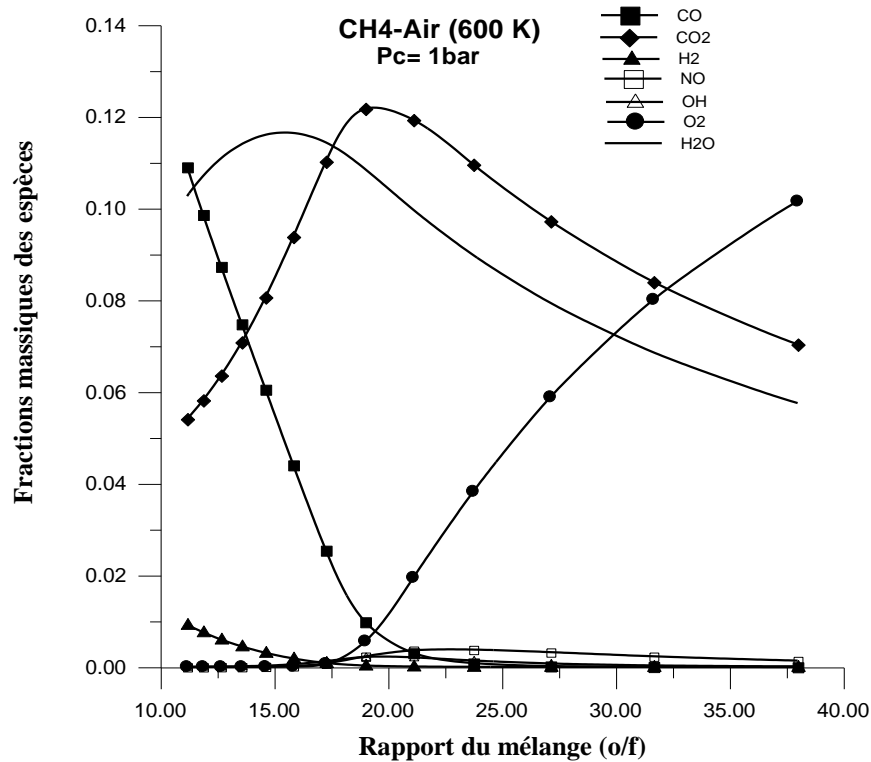


Figure 3.3: Différents fractions massiques des espèces contenants dans la combustion du méthane à la température de préchauffage d'air égale à 600 K

Dans le cas d'une combustion complète ou stoechiométrique, qui correspond dans notre cas à un rapport de mélange avoisinant $r \approx 19$, les produits de combustion sont composés essentiellement du CO_2 et H_2O . En mélange riche, le système réactionnel ne contient pas suffisamment d'oxygène pour permettre une oxydation totale, il se forme alors, en plus des espèces citées précédemment, de l'oxyde de carbone et des concentrations plus ou moins faible d'hydrogène, en mélange pauvre, on observe, en plus de CO_2 et H_2O , de l'oxygène, se qui est logique par ce qu'il se présente avec un excès et des faibles concentrations en NO dues à la réaction entre l'oxygène et l'azote moléculaire en présence de haute température.

7. Les propriétés thermodynamique des produits de combustion :

En faite, à pression ambiante, tout repose sur le calcul de la température de flamme adiabatique, une fois calculée, toutes les propriétés thermodynamiques, tels que l'enthalpie, la viscosité, la conductivité thermique,...etc., peuvent être déterminées explicitement, car elles sont fonction de cette dernière et leurs principe de calcul est donné dans (Annexe B).

En admettant l'équilibre chimique et thermodynamique atteint, ainsi la composition des produits de combustion connue par minimisation de l'énergie libre ou fonction de *Gibbs* (voir Annexe B), on peut calculé la température de flamme adiabatique par l'égalité entre

l'enthalpie des réactifs et les produits de combustion. Elle est appelée adiabatique car ne tient pas compte des pertes thermiques et d'états hors équilibre qui existent nécessairement au sein du front de flamme.

Un calcul a été réalisé par *CEA* pour le calcul de la *TFA* dans des conditions de combustion normales, c'est-à-dire (à $T=25^{\circ}\text{C}$, 1bar et à richesse 1), s'avère satisfaisant en le confrontant avec des résultats expérimentaux décrits en [51] (tableau 3.2), cependant, les valeurs mesurées apparaissent logiquement un peu plus faibles car elles englobent les pertes thermiques, notamment par rayonnement et conduction.

8. Influence des conditions de combustion sur la Température de flamme adiabatique :

8.1. Influence du rapport de mélange :

En fonction du rapport de mélange, on observe que la température de flamme atteint une valeur maximale en mélange stoechiométrique ($r \approx 18$) ou légèrement riche et décroît très nettement en mélange pauvre (Figure 3.4), dans le tableau 3.2 on observe un écart de 3% entre la température de flamme adiabatique calculé par *CEA* et celle mesurée donné par [51] dans le point stoechiométrique, ce qui explique la validité de ce code de calcul.

Teneur volumique en azote dans le mélange total (%)	TFA	
	Valeur mesurée (K)	Valeur calculée (K)
52.5	2570	2676
60	2450	2551
70	2145	2286
Condition initiales :25 °C, 1bar et richesse1.00.		

Tableau 3.2 : Comparaison de températures adiabatiques de flamme T_f mesurées et calculées pour un mélange méthane-air dilué dans de l'azote

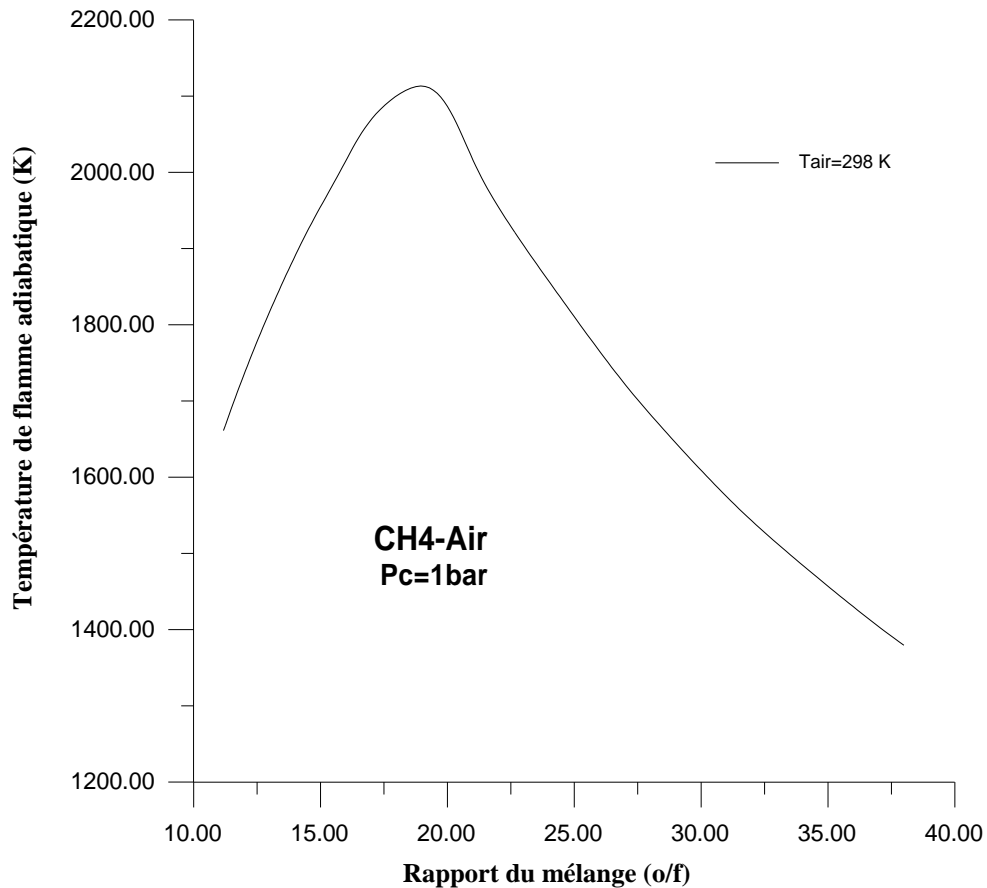


Figure 3.4: Influence du rapport de mélange sur la TFA

La température de flamme adiabatique varie également en fonction des conditions de combustion ; température, pression, dilution de l'oxygène dans l'air.

8.2. Influence de la température de préchauffage :

Dans la Figure 3.5 on observe une élévation de la température des réactifs, dans notre cas, due à la quantité de chaleur récupérée du refroidissement de la matière cuite (clinker) sortante du four, entraîne une augmentation considérable de la température de flamme adiabatique sans affectée sur les limites d'inflammabilité, la variation de la TFA varie de 2,3% lorsque la température de l'air secondaire augmente de 25,5% et le rapport stoechiométrique reste fixe.

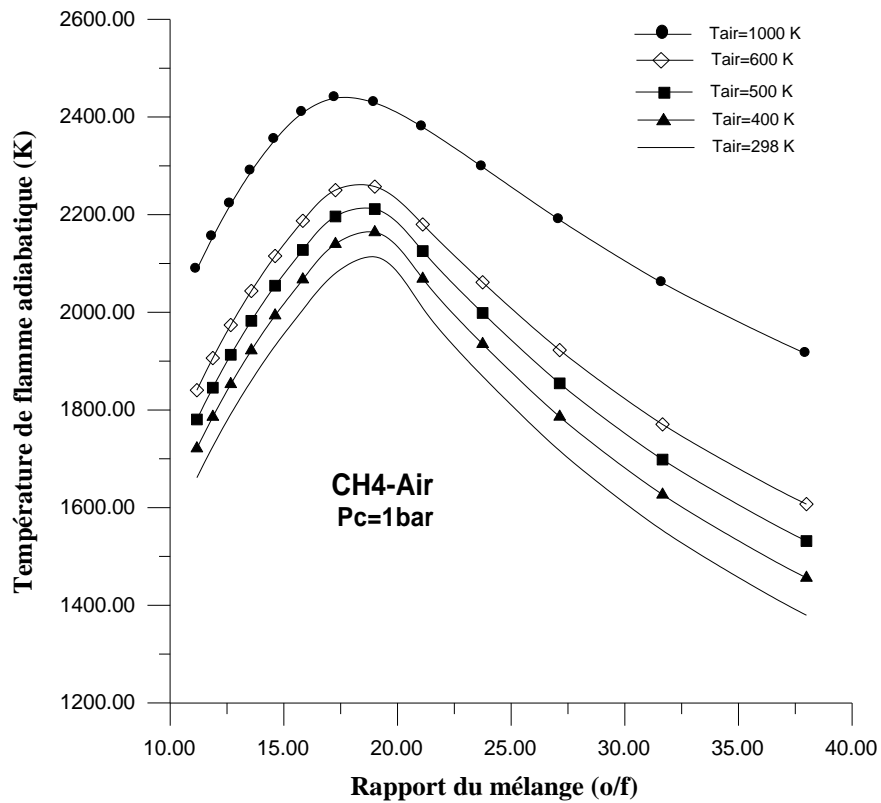


Figure 3.5: Effet de la température de préchauffage de l'air sur la TFA

8.3. Influence de la pression :

L'influence de la pression de combustion est plus complexe et moins important dans le cas d'une combustion avec le méthane. On observe selon la (Figure 3.6), la TFA n'est affectée que dans un intervalle étroit, c'est juste autour de la stoechiométrie et ce n'est que quelques dixièmes de Kelvin de différence entre le cas atmosphérique et celui de soixante (60) bars.

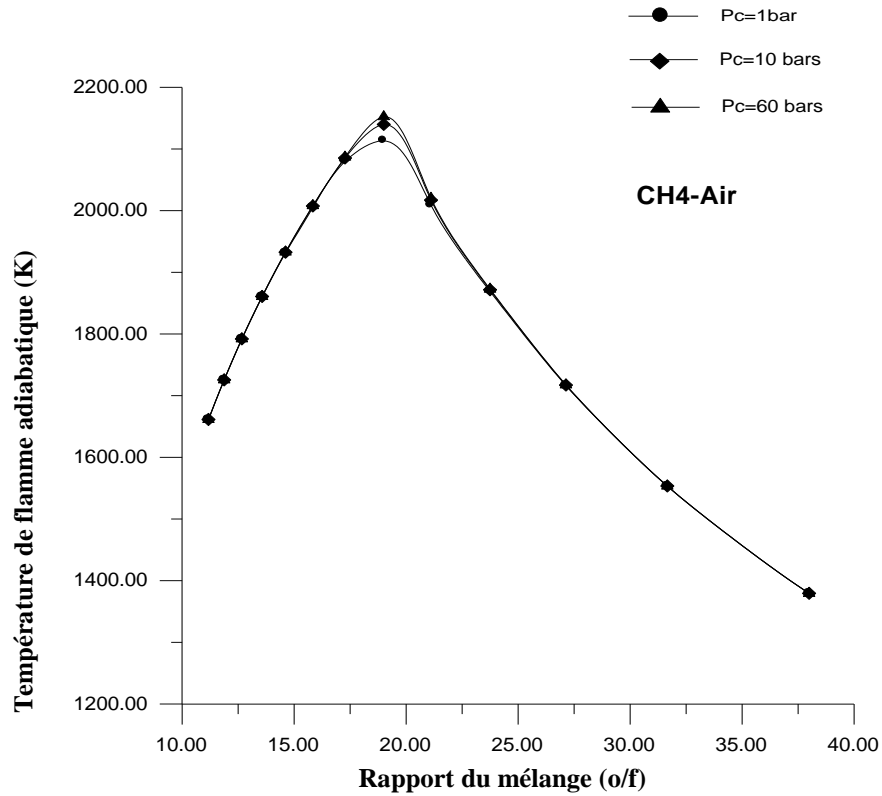


Figure 3.6: Effet de la pression de combustion sur la TFA

8.4. Influence de la dilution de l'oxygène dans l'air :

La dilution de l'oxygène dans l'air contribue toujours à restreindre les possibilités d'inflammation. Cette action se manifeste sur la TFA et la limite supérieure L_s . Pour le méthane, au point stoechiométrique et lorsque l'air contient 09% d' O_2 la TFA est de 1241,84K et L_s exprimée en fonction du rapport du mélange $\approx 26,07$, alors que la TFA augmente de 55,5% et L_s diminue de 82% lorsque l'air contient 50% d' O_2 (Figure 3.7).

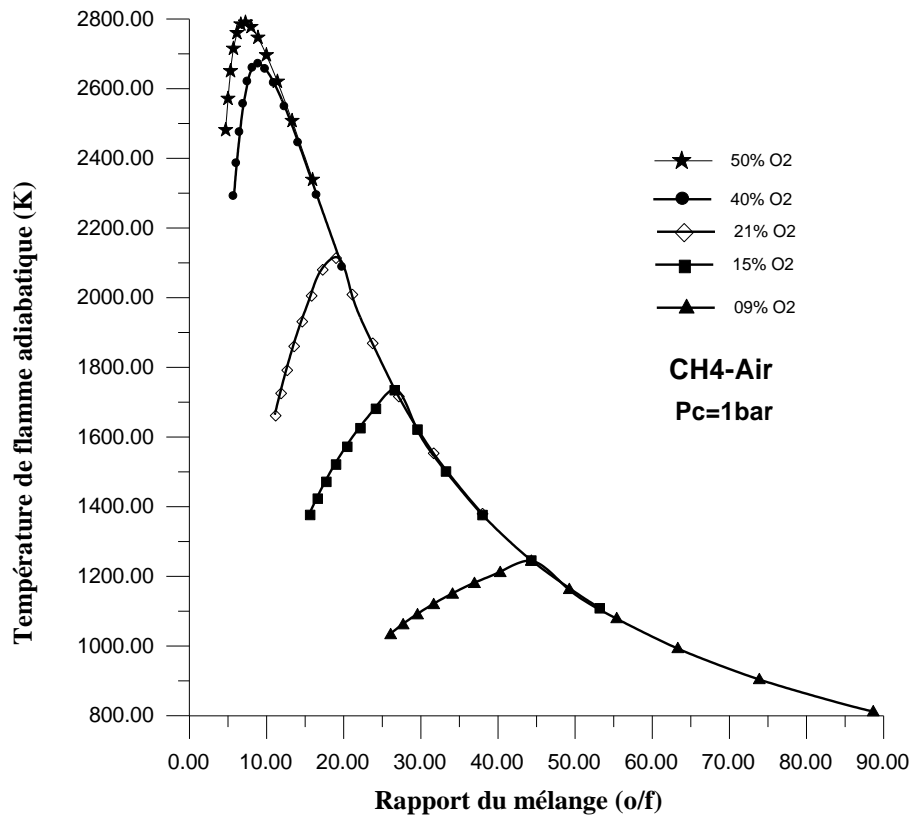


Figure 3.7: Effet de la teneur de l'oxygène dans l'air sur la TFA

9. Le calcul thermochimique avec CEA :

Le but essentiel de notre travail étant de faire une simulation numérique pour prédire les émissions du monoxyde d'azote (NO), nous avons jugé utile d'utiliser le code pré-processeur des équilibres chimiques *CEA* (voir détails sur Annexe B) sous réserve de fournir le type de réactifs, la pression de combustion, et la température à l'injection, et par un modèle d'équilibre chimique utilisant les notions que nous avons développé dans les paragraphes précédents (sous forme de fichier . inp) (Figure 3.8), le *CEA* nous fournit la *TFA*, la proportion des espèces chimiques les plus prépondérantes (pour le rapport de mélange utilisé), et les propriétés de transport du mélange (sous forme de fichier . out) voir (Figure 3.9).

Ces informations seront en fait, utiles pour changer les paramètres par défaut du *Fluent* concernant la viscosité dynamique, la conductivité thermique, le type et le nombre d'espèces à transporter et le pic de la température (*TFA*) qu'on pourra s'attendre à avoir sur la flamme.

Le schéma suivant représente un fichier (.inp) pour le cas de la réaction de l'air et du méthane, en considérant que le fuel (méthane) est injecté à une température de 273K, et l'oxydant l'air qui contenant 21% de O_2 et 79% de N_2 , la pression de combustion étant la

pression ambiante, ainsi que la température d'injection de l'air (600K) sont toutes déterminées en fonction de la richesse par le biais d'un calcul numérique [58].

```

prob
rocket equilibrium phi,eq.ratio=0.5,0.6,0.7,0.8,0.9,1.0,
,1.1,1.2,1.3,1.40,1.5,1.6,1.7 p,bar=1.01325 pi/pe=1.02
react
fuel=CH4 wt=100. t,k=273
oxid=O2 wt=21. t,k=600
oxid=N2 wt=79. t,k=600
output
siunits massf transport
end
    
```

Figure.3.8 : Exemple d'un fichier (.inp)

Un exemple de sortie du CEA peut être consulté (Figure 3.9) avec des coefficients de transport pour le mélange calculés selon l'Annexe B.

```

THEORETICAL ROCKET PERFORMANCE ASSUMING EQUILIBRIUM
COMPOSITION DURING EXPANSION FROM INFINITE AREA COMBUSTOR

Pin = 14.7 PSIA
CASE =

          REACTANT                WT FRACTION          ENERGY          TEMP
          CH4                    (SEE NOTE)          KJ/KG-MOL         K
FUEL      CH4                    1.0000000          -75486.694        273.000
OXIDANT   O2                     0.2100000          9245.049         600.000
OXIDANT   N2                     0.7900000          8894.013         600.000

O/F= 37.99299 %FUEL= 2.564564 R,EQ.RATIO= 0.500000 PHI,EQ.RATIO= 0.500000

          CHAMBER  THROAT  EXIT
Pinf/P    1.0000  1.8263  1.0200
P, BAR    1.0132  0.55481  0.99338
T, K      1607.06  1407.03  1600.16
RHO, KG/CU M  2.1378-1  1.3370-1  2.1049-1
H, KJ/KG   182.83  -84.566  173.46
U, KJ/KG  -291.15  -499.53  -298.48
G, KJ/KG  -14375.0  -12830.4  -14321.8
S, KJ/(KG) (K)  9.0586  9.0586  9.0586

M, (1/n)   28.191  28.192  28.191
(dLV/dLP)t -1.00001 -1.00000 -1.00001
(dLV/dLT)p  1.0006  1.0001  1.0006
Cp, KJ/(KG) (K)  1.3584  1.3166  1.3569
GAMMAS    1.2777  1.2888  1.2781
    
```



```

SON VEL,M/SEC      778.2   731.3   776.7
MACH NUMBER       0.000   1.000   0.176

TRANSPORT PROPERTIES (GASES ONLY)
  CONDUCTIVITY IN UNITS OF MILLIWATTS/(CM) (K)

VISC,MILLIPOISE  0.59808  0.54712  0.59635

  WITH EQUILIBRIUM REACTIONS

Cp, KJ/(KG) (K)   1.3584   1.3166   1.3569
CONDUCTIVITY      1.0907   0.9592   1.0860
PRANDTL NUMBER    0.7449   0.7510   0.7451

  WITH FROZEN REACTIONS

Cp, KJ/(KG) (K)   1.3324   1.3057   1.3316
CONDUCTIVITY      1.0676   0.9509   1.0636
PRANDTL NUMBER    0.7464   0.7513   0.7466

PERFORMANCE PARAMETERS

Ae/At             1.0000   3.3940
CSTAR, M/SEC      1036.3   1036.3
CF                0.7057   0.1321
Ivac, M/SEC       1298.7   3585.1
Isp, M/SEC        731.3   136.9

MASS FRACTIONS

*CO2              0.07035  0.07035  0.07035
H2O               0.05754  0.05759  0.05755
*NO               0.00137  0.00052  0.00133
NO2              0.00001  0.00000  0.00001
*N2              0.76910  0.76950  0.76912
*OH              0.00010  0.00002  0.00010
*O2              0.10152  0.10202  0.10155

```

Figure 3.9 : Exemple du fichier de sortie (.out) du CEA.

L'analyse thermochimique du mélange CH_4/Air sous la pression atmosphérique montre que la température de flamme adiabatique (égale à 2200 K) est atteinte pour un rapport de mélange $r=18$ avec une composition standard d'air (21% O_2 , 79% N_2) dans un point de fonctionnement bien déterminé, tandis que, une diminution importante est notée lorsque la dilution en oxygène atteint 9%, cela est en bon accord avec les caractéristiques des flammes non prémélangées du type *méthane/Air* [51], en plus, la conductivité thermique et la viscosité du mélange sont calculées en utilisant des lois de mélange appropriées [59] avec des techniques d'interpolation [23].

Chapitre 04 : Simulation numérique

La résolution numérique des équations des écoulements turbulents est fréquemment désignée par l'acronyme *CFD* (pour *Computational Fluid dynamics*). Il existe divers logiciels commerciaux de *CFD*, qui se différencient essentiellement par la technique de discrétisation du domaine par, les modèles utilisés pour calculer les différents termes sources des équations de conservations et intégrer les effets de la turbulence, ainsi que par les algorithmes mis en œuvre pour résoudre les équations discrétisées. Au cours de ce travail, la simulation numérique de l'écoulement réactif dans la chambre de combustion cylindrique du four industriel de la cimenterie de *Chlef* sera réalisée à l'aide du code commercial *Fluent*. Le logiciel *Fluent* utilise une méthode de discrétisation aux volumes finis, dans laquelle les nœuds de calcul sont placés au centre des volumes de contrôles (on parle du schéma *cell-centered*) (Annexe A), la résolution des équations discrétisées peut être réalisée de manière couplée c'est-à-dire, toutes les équations sont placées dans une seule matrice globale et *Fluent* utilise alors un solveur dit *couplé*, ou séquentielles (solveur *ségrégé*) (Figure 4.1), où les équations sont résolues dans un ordre déterminé, définis par l'algorithme de résolution. Le caractère non linéaire et couplé des équations nécessite de résoudre le problème de manière itérative, c'est-à-dire par approximations successives à partir de valeurs initiales définies judicieusement, jusqu'à ce qu'une solution suffisamment convergente soit obtenue. La convergence de la solution est évaluée par un critère de convergence, définissant l'écart maximal autorisé, sur l'ensemble des équations de bilan, par rapport à la solution qui vérifie exactement ces équations.

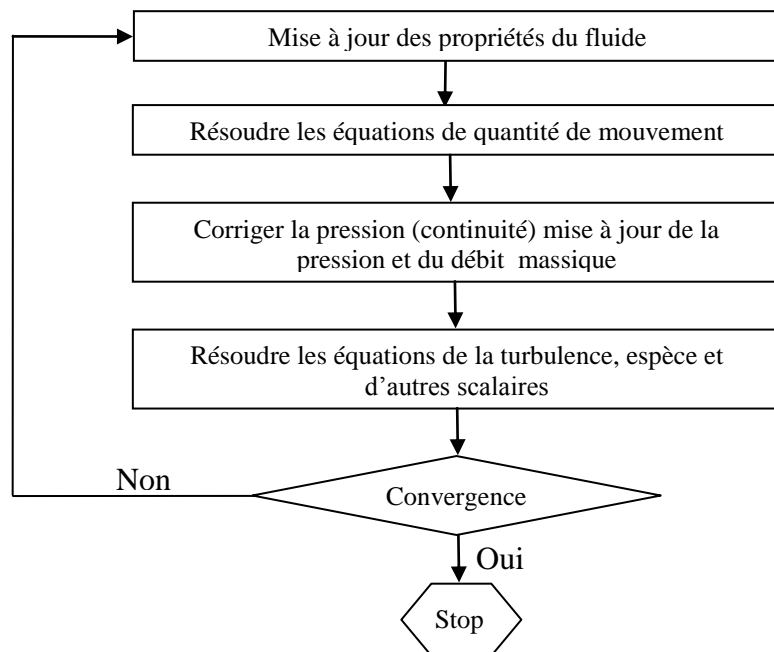


Figure.4.1 : Algorithme de calcul pour le solveur découplé.

1. Procédure de Résolution sous *Fluent* :

Un fichier de données (extension .cas) est créé suite à la lecture du fichier contenant les détails de la géométrie (extension .msh), après vérification du maillage, on passe au type de solveur, pour notre cas, c'est un solveur découplé avec une formulation implicite pour un cas bidimensionnel et un écoulement stationnaire prenant en considération des vitesses absolues. D'autres équations peuvent être ajoutées selon les phénomènes étudiés (transfert de chaleur, combustion, multi phases ...). Les autres étapes du menu "*Define*" sont les choix du fluide, des conditions d'opération (introduction de l'effet de la gravité et de la pression de référence) et l'introduction des conditions aux limites. Le dernier menu utilisé pour entamer le calcul est le menu "*Solve*". On doit choisir les équations à résoudre, les schémas de discrétisation, les facteurs de sous relaxations (Annexe A), les critères de convergence et le calcul doit être initialisé à travers les conditions aux limites pour démarrer la méthode itérative. En fin, après l'aboutissement aux résultats de la simulation de combustion, les NO_x seront calculés en post-traitement en résolvant l'équation de transport pour le NO thermique avec un terme source qui est fonction seulement de la température, ce dernier sera modélisé par une fonction *Pdf* présumé appelée fonction *bêta*.

Le solveur ségrégué a été utilisé au cours de ce travail avec un algorithme *SIMPLEC* (pour *Semi Implicit Method for Pressure Linked Equation Consistent*) de résolution pour le couplage pression-vitesse, cet algorithme est utilisé pour accélérer la convergence de calcul [14], en plus, la discrétisation des équations a été réalisée par un schéma du premier ordre et les facteurs de sous relaxations sont choisis afin de stabiliser la solution et se sont présentés dans l'annexe A, on doit aussi se fixer les erreurs maximales à ne pas dépasser, et pour cela on adapte des tolérances $\varepsilon = 0.001$ pour toutes les *EDP* sauf pour celle de l'énergie (T), du rayonnement (I) et la fraction massique (Y_{NO}) du polluant où $\varepsilon = 10^{-6}$, à cause de l'existence d'une zone de réaction (flamme). L'utilisateur impose un nombre maximal d'itérations pour la simulation (1000 dans notre cas) mais si les résidus dans les calculs des *EDP* sont inférieurs aux tolérances fixées par l'utilisateur ($\varepsilon = 10^{-3}$, $\varepsilon = 10^{-6}$), la simulation s'arrête et les dernières valeurs calculées pour les inconnues de l'écoulement, sont retenues, on aboutit ainsi à la convergence. À l'outil principal de calcul est joint un outil complet de réalisation de maillage hexaédriques, tétraédriques ou mixtes (mailleur *GAMBIT*), qui dispose également des principales fonctionnalités d'un outil de dessin assisté par ordinateur (*DAO*), le meilleur *GAMBIT* a été utilisé dans ce travail pour créer la géométrie du modèle et en réaliser le maillage.

2. Modèle géométrique :

Le four étudié dans ce travail est composé d'un injecteur coaxial CH_4/Air unique lié à une chambre de combustion cylindrique (Figure 4.2). Le jet carburant (méthane) de basse température injecté au centre et entouré par un jet d'air primaire nécessaire pour le développement de la flamme de diffusion, en plus, un air secondaire à haute température (*co-flow*) quasi laminaire récupéré de l'air provenant du refroidissement de la matière (récupéré de la partie refroidisseur) est réinjecté parallèlement à la paroi.

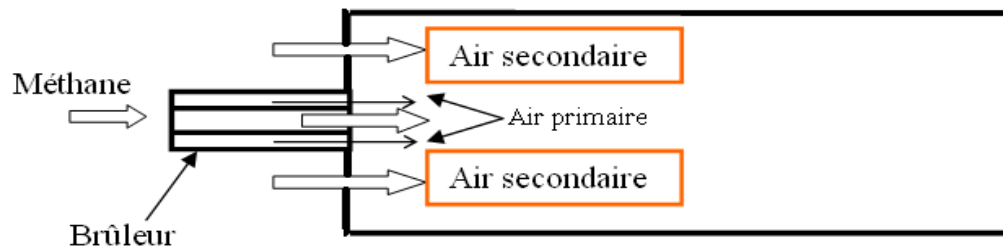


Figure 4.2 : Modèle géométrique du four.

Compte tenu de la symétrie géométrique, un modèle axisymétrique est adopté pour le présent travail (Figure 4.3).

3. Types de conditions aux limites :

Les conditions aux limites du domaine sont différentes selon la nature de la limite considérée : entrée ou sortie du fluide, paroi solide ou condition de symétrie. En outre, pour chaque type de limite, il existe plusieurs variantes de conditions, dont seuls celles qui ont un rapport avec notre simulation sont décrites dans les paragraphes qui suivent et sont schématisées dans la Figure 4.3 :

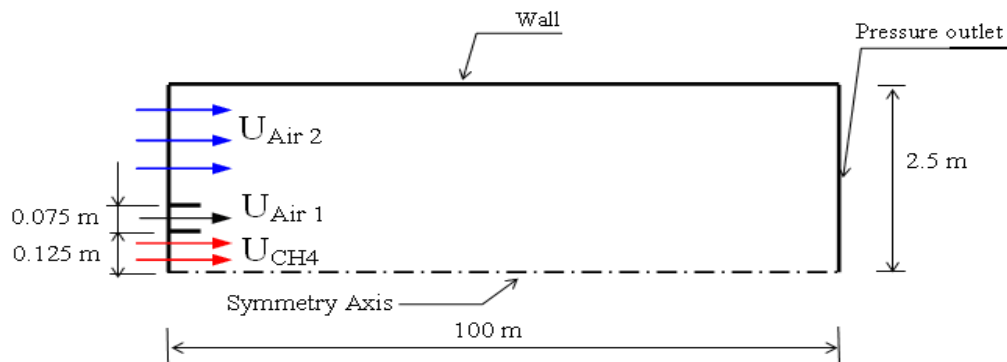


Figure 4.3 : Domaine de calcul et conditions de fonctionnement.

3.1. Entrées de fluide :

Aux entrées de fluide dans le domaine, on a imposé une vitesse absolue du fluide et également sa température, sa composition, ainsi que les caractéristiques de la turbulence en fixant l'intensité de la turbulence I_{tur} et une dimension caractéristique L_{tur} , sur la base de calcul du nombre de Reynolds (Re) de l'air primaire, l'air secondaire et le gaz par utilisation de l'équation (75), on a pu déterminer I_{tur} pour l'oxydant et le carburant (tableau 4.1).

$$I_{tur} = 0,16(Re_{D_{hydr}})^{-1/8} \quad (75)$$

Dans le cas d'une section non circulaire, L_{tur} représentera alors le diamètre hydraulique (D_{hydr}), avec $D_{hydr} = \frac{4S}{P}$, où S et P sont respectivement la surface et le périmètre de la section d'entrée.

3.2. Sortie de fluide :

La sortie du fluide est modélisée par une condition de type *pressure outlet* où son avantage est la prise en compte des propriétés d'une entrée de fluide par le plan de sortie du domaine existe, dans laquelle on impose simplement la pression statique dans le plan de sortie, on y fixe également les valeurs des propriétés scalaires (température, composition et grandeurs de turbulence) du fluide potentiellement entrant dans le domaine par cette limite.

3.4. Parois :

Les parois du four réel appartiennent à trois ensembles distincts ; (voir chapitre 01 paragraphe 2.4.1), une première couche interne, constituée des matières cumulée pendant la clinkérisation, une couche de briques réfractaires recouvertes d'une couche constituée d'une tôle en acier, de ce fait, pendant cette simulation, les parois sont supposées adiabatiques et la vitesse du fluide est supposée nulle par défaut (condition de non glissement). En se plaçant dans le cas le plus défavorable en supposant que toute l'énergie thermique est convectée vers la sortie et aussi transmise par rayonnement et qu'aucun transfert pariétal n'aura lieu.

3.5. Plan de symétrie :

Le plan de symétrie est traité en considérant que le gradient de toutes les variables à travers cette surface est nul.

Les conditions de fonctionnement aérodynamique du four sont récapitulées dans le tableau 4.1 suivant :

Conditions de fonctionnement	Air primaire (Air_1)	Air secondaire (Air_2)	Méthane (CH ₄)
D_{hydr}	0.15	4.6	0.25
Re	3388705.71	83451.1568	900995.02 5
Température (K)	298.15	1316.17	283.15
Vitesse d'entrée (m/s)	330.00	0.265	72.44
Intensité de turbulence à l'entrée (%)	2.443	3.881	2.883
La composition chimique Y_i en fraction massique	$Y_{O_2} = 0.23$ $Y_{N_2} = 1 - Y_{O_2}$	$Y_{O_2} = 0.23$ $Y_{N_2} = 1 - Y_{O_2}$	$Y_{CH_4} = 1.0$

Tableau 4.1 : Tableau récapitulatif d'un point de fonctionnement.

4. Les propriétés physiques du mélange :

Pour que la définition du problème soit complète, il reste à déterminer les propriétés physiques du mélange. Le mélange est un milieu réactif dont ces propriétés sont définies de la manière suivante :

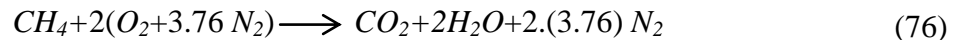
Vu que les pressions sont relativement proches de l'atmosphérique, une loi de type gaz parfait a été adoptée pour le mélange Méthane-air.

Une valeur moyenne et constante est adoptée pour chaque propriété de transport (conductivité thermique et viscosité), elle est issue des calculs thermochimiques effectués par le biais du code *CEA* (Chapitre 03).

La chaleur spécifique des gaz sortants du four est calculée à partir de la somme des chaleurs spécifiques des espèces individuelles pondérée par la fraction massique de celle-ci. Ces propriétés individuelles sont également calculées à partir des lois polynomiales de *JANAF* [17] en fonction de la température.

Pour prendre en considération les pertes par radiation on a introduit un modèle radiatif qui nécessite le calcul de son émissivité, le modèle *WSGGM*, décrit dans le deuxième chapitre, permet le calcul de la valeur de l'émissivité des gaz en fonction de leurs température et composition.

Le modèle à combustion complète du méthane dans l'air a été adopté, il est décrit par la réaction stoechiométrique :



Cette réaction fortement exothermique est sensée communiquer son énergie à la flamme de diffusion, le monoxyde d'azote (*NO*) constituera une conséquence de l'oxydation de l'azote moléculaire (*N₂*) avec l'oxygène de l'air (*O₂*) selon la fameux mécanisme de *Zeldovich* (chapitre 02), ces réactions ne contribuent pas à la modification de l'énergie de la flamme et ne figureront qu'après convergence des calculs en combustion complète (*NO* sera calculé en post-traitement). Le taux de production net de la réaction (76) est influé par la turbulence de l'écoulement, la description de cette dépendance est faite par le modèle algébrique de *Magnussen*, avec des constantes empiriques *A* et *B* dont les valeurs par défaut sont retenues.

5. Maillages:

Le maillage structuré a été construit par le biais du mailleur automatique *GAMBIT* [60], l'opération consiste à créer la structure grossière en définissant des points de contrôle (généralement les bords des arrêtes), en reliant ces points par des courbe (droites dans ce cas), et en construisant des surfaces qui s'appuient sur ces arrêtes, la logique de construction est donc descendante-Ascendante (down-top) [61].

Après définition de la surface, on utilise un critère de taille nominale à ne pas dépasser pour les éléments du maillage (element size = 0.08 pour notre cas), dont on précisera aussi le type (quadrilatères ou triangulaires). En fin, le mailleur construit lui-même les éléments et nous fournit leurs nombres ainsi que celui des nœuds.

Fluent traite plusieurs types de maillages très compliqués qui sont en général importés directement d'autres logiciels de génération de maillage (*GAMBIT*, *GMSH*, *TGrid*,...), cependant, pour notre cas, deux choix principaux du maillage se sont posés à nous, en l'occurrence, un maillage soit à base de cellules quadrilatères, soit à base de cellules triangulaires, l'utilisation d'un maillage triangulaire induirait un surplus du nombre de cellules par rapport aux cellules quadrilatères, d'où le besoin de plus de ressources et de temps de calcul, cependant, notre géométrie est assez simple où l'écoulement suit pratiquement la forme de la géométrie, ce qui fait qu'on va retenir les cellules quadrilatérales.

Le maillage structuré, présenté en coupe longitudinale (Figure 4.4), est composé de 40032 noeuds et 38750 éléments de maillage, c'est celui qui a été retenu initialement pour la simulation.

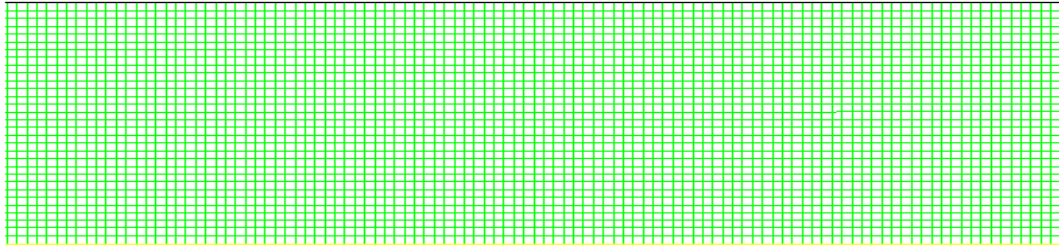


Figure 4.4: Le maillage structuré de la chambre de combustion étudiée

Une technique de raffinement adaptative (Figure 4.5), basée sur le gradient de température, a été utilisée en post-traitement, celle-ci montre que les zones à forts gradients de température sont celles proches du front de la flamme et de la zone de recirculation pariétale, des éléments supplémentaires y sont créés par subdivisions locales, ce qui a pour effet d'augmenter le nombre de cellules, et par conséquent, le nombre de nœuds, le maillage final qui sera retenu, est celui pour lequel la qualité qui nous intéresse, à savoir le taux du NO thermique au niveau du plan de sortie du four, demeure, quasi-stationnaire. .

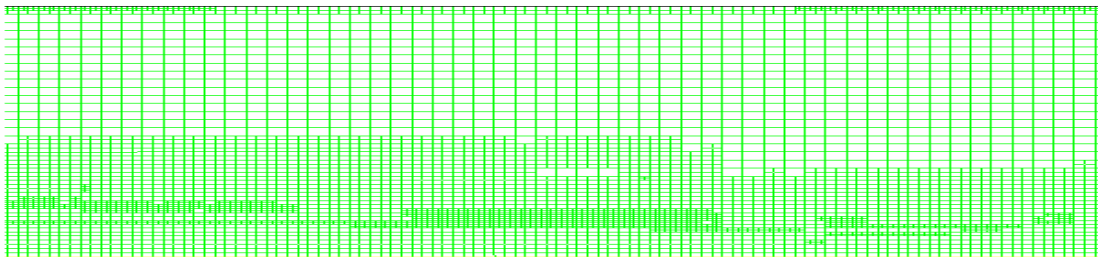


Figure 4.5 : Maillage raffiné après adaptation.

Plusieurs essais numériques sur des maillages plus fins ont été récapitulés dans le tableau 4.1, le maillage final a donné une erreur relative n'excédant pas 7‰ sur le taux du NO ppm moyen en sortie du four (tableau 4.2), ceci montre clairement la validité de ce maillage, puisque la solution devient indépendante du nombre du noeuds.

	Maillage 1	Maillage 2	Maillage 3	Maillage 4	Maillage 5	Maillage 6	Maillage 7
Nombre d'éléments	38750	41522	45707	52415	56831	58826	59714
Nombre de noeuds	40032	43301	48262	55715	60475	62429	63355
$\frac{\Delta NO_{ppm}}{NO_{ppm}}$ (‰)	-	60,36	90,2	73,67	23,06	6,24	6,70

Tableau 4.2 : Erreur relative entre les différents maillages après adaptation.

Dans ce qui suivre, la simulation numérique de la flamme de diffusion Méthane/Air par le biais du code commercial *Fluent*, portera sur la détermination du champ de température statique, et de la valeur moyenne du *NO thermique* au niveau du foyer et au plan de sortie de la chambre de combustion, les autres variables tels que vitesse, production de l'énergie de turbulence, densité,...etc. peuvent être visualisées mais ne constituent pas les facteurs important dans la production de la pollution.

On s'intéressera aussi à un facteur appelé *OTDF (Overall Temperature Distribution Factor)* qui mesure l'efficacité de la combustion au plan de sortie de la chambre de combustion, ce facteur est exprimé par :

$$OTDF = \frac{T_{sortie}^{\max} - \langle T \rangle_{entrée}}{\langle T \rangle_{sortie} - \langle T \rangle_{entrée}} \quad (77)$$

où :

T_{sortie}^{\max} : La température max au plan de sortie du foyer

$\langle T \rangle_{entrée}$: La température moyenne du mélange des réactifs à l'entrée

$\langle T \rangle_{sortie}$: La température moyenne des gaz produits au plan de sortie du four.

6. Résultats et discussion :

En raison de l'absence des moyens de mesure locale à la flamme dans la chambre de combustion du four étudié, nous avons jugé intéressant de valider nos résultats par rapport aux données thermochimiques (analytique), par rapport à la longueur de flamme visible (30÷45m) [5] et aux mesures du *NO ppm* effectuées au plan de sortie du four par l'analyseur (décrit en chapitre 01) placé en une position centrale du plan de sortie.

En prenant en compte de la température réelle des réactifs (Tableau 4.2) dans le calcul thermochimique réalisé par *CEA*, la température de flamme adiabatique (*TFA*) atteint son maximum au point stoechiométrique (combustion complète) (Figure 4.6).

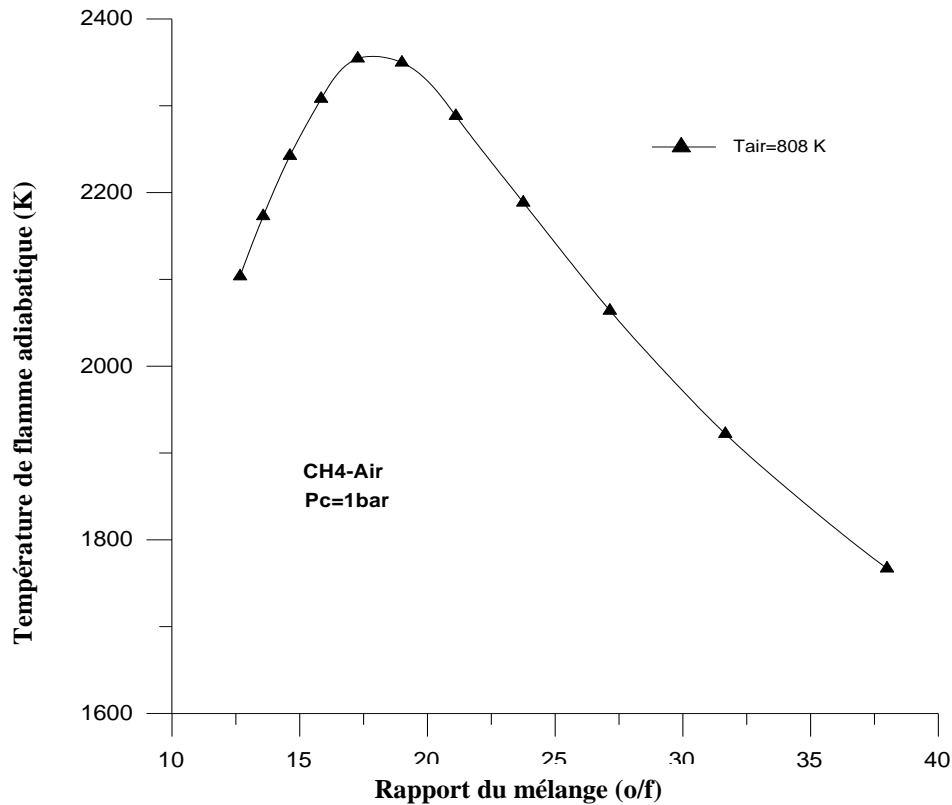


Figure 4.6 : Variation de la TFA en fonction du rapport de mélange.

Initialement, la simulation a été réalisée en maquette froide, ce type d'écoulements (cold flow en anglais) peut être vu comme un simple problème de mélange entre réactifs sous l'effet de la diffusion moléculaire et turbulente, la simulation en cold flow permet de découpler le mélange de la combustion, elle est donc utile lorsqu'on voudrait valider un modèle de turbulence sans avoir à considérer l'effet de la réaction, de là, la correction de Pope est obtenue pour prendre en compte le taux d'épanouissement du jet pour la constante du modèle C_2 égale à 1,91, le taux d'épanouissement améliore le mélange turbulent et par conséquent la qualité du mélange frais.

En raison du caractère fortement non linéaire du taux de réaction \widetilde{W}_i qui figure comme un terme source dans l'équation de transport (chapitre 02, équation.12), le système d'équations à résoudre est souvent très mal conditionné (de type Stiff), la solution est souvent sensible aux valeurs initiales des inconnues de la thermochimie, pour atteindre une solution convergente stable dans le calcul d'écoulement réactif, il est utile de procéder à une solution à deux étapes où la solution en maquette froide fournit des valeurs initiales pour la simulation de la combustion [23].

Puisque la combustion est entièrement contrôlée par le mélange turbulent, la flamme se dirige vers la région du coté supérieur du four (Figure 4.7) et se propage là où l'oxygène est piégé.

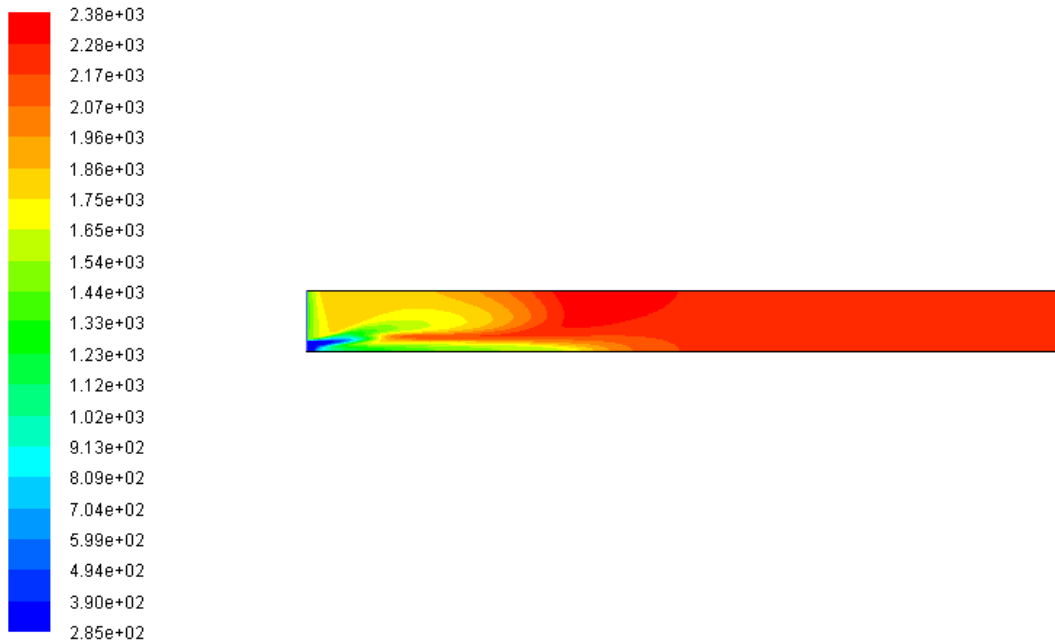


Figure 4.7: Champ de température moyen dans la chambre de combustion (sans rayonnement).

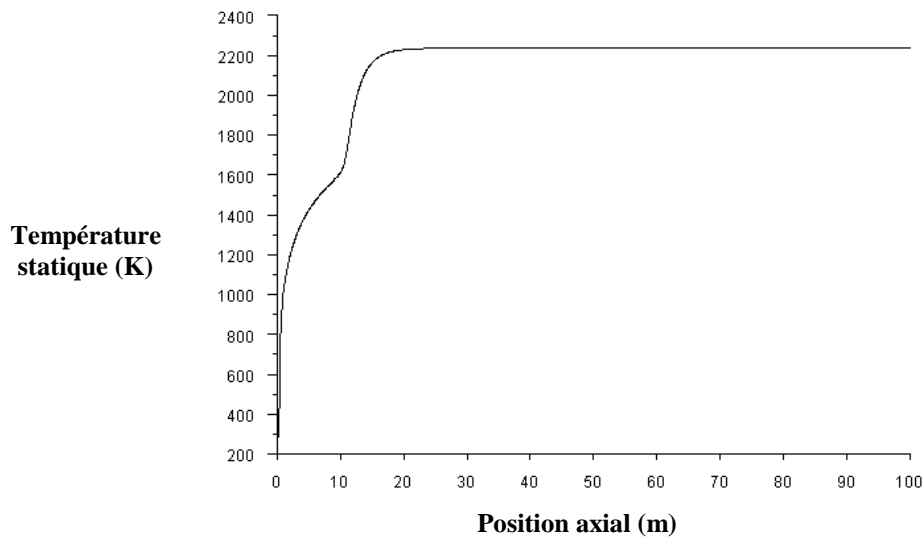


Figure 4.8: Profil de la température axiale du four (sans rayonnement).

La distribution de la température moyenne avec le modèle $k - \varepsilon$ standard (Figure 4.7) est acceptable, une surestimation de 1.3% (30K) est remarquée sur la valeur maximale de la température de flamme adiabatique par rapport à celle calculée par CEA (2349 K), traduisant clairement la non prise en compte des pertes par radiation, cependant, la longueur de flamme

visible, d'après la position axiale du pic de température (Figure 4.8), est sous-estimée ($\cong 22\text{m}$) par rapport aux données techniques [5].

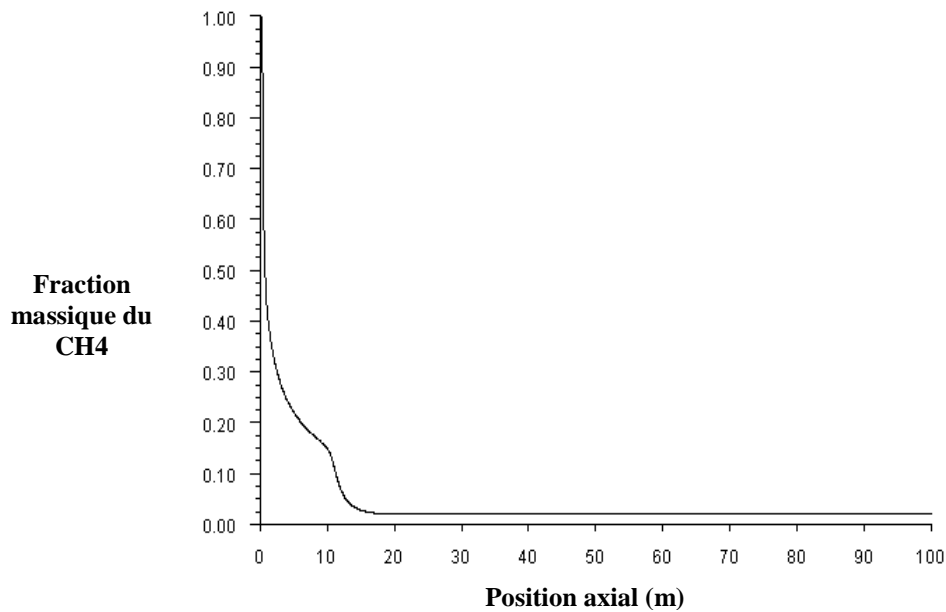


Figure 4.9: La fraction massique du CH_4 selon l'axe du four (sans rayonnement).

Le profil axial du méthane (Figure 4.9) montre une consommation quasi-complète du méthane dans la zone de flamme ($\cong 22\text{m}$) et représente des fractions négligeables sur le reste du l'axe du four et ces dernières, au cas où leurs présence soit en excès, peuvent favoriser d'autres réactions, donc cela explique que la combustion se déroulera dans un milieu où la validité du modèle de combustion à une étape est assurée.

Puisque les NO_x présentent avec une très faible concentration (de l'ordre de 10^{-5} en fraction massique), leurs quantités massiques seront exprimées en partie par million (*ppm*) par l'équation suivante :

$$\text{NO ppm} = \frac{\text{fraction molaire NO} \times 10^6}{1 - \text{fraction molaire H}_2\text{O}} \quad (78)$$

où :

$$\text{fraction molaire NO} = \frac{\text{fraction massique NO} \times \text{PM mélange}}{30} \quad (79)$$

et le poids moléculaire du mélange est :

$$\text{PM mélange} = \frac{1}{\sum_i \frac{\text{fraction masique}_i}{\text{PM}_i}} \quad (80)$$

avec PM_i est le poids moléculaire de l'espèce i .

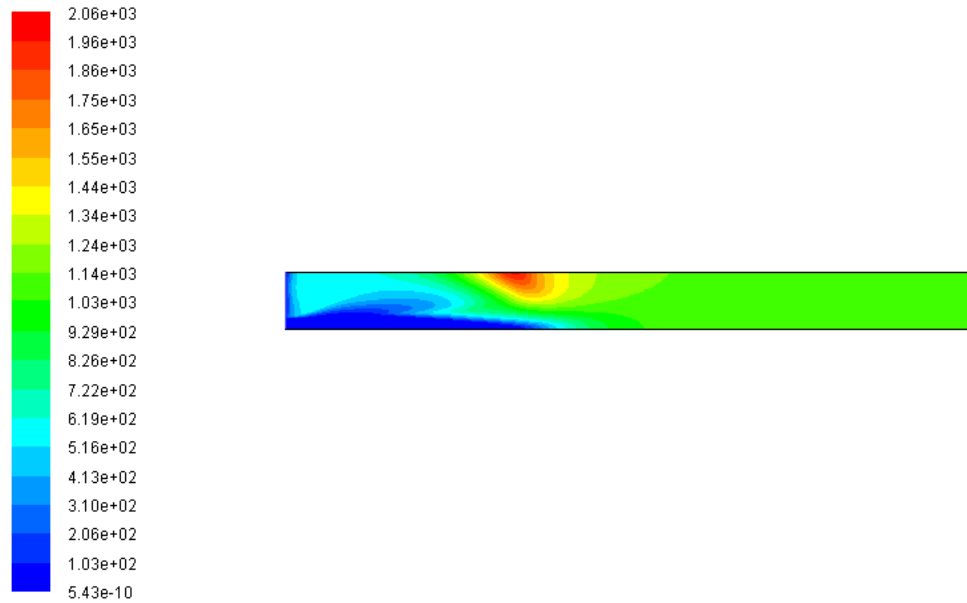


Figure 4.10: Contours du *NO* thermique exprimé en *ppm* dans le four (sans rayonnement).

Le contour du *NO* thermique ((Figure 4.10) indique une valeur maximale de 2060 *ppm* dans le front du flamme, ceci est attribuée grâce aux valeurs élevées de température à ces endroits, les valeurs du *NO* thermique diminue vers la sortie du four et dans le plan de sortie, représente des valeurs moyennes qui vaut 1106 *ppm* (tableau4.3).

Toutes les quantités physique moyennes (\tilde{g}) mentionnées dans cette simulation sont pondérés par la masse volumique et se calculent par :

$$\tilde{g} = \frac{\int g\rho|vdA|}{\int \rho|vdA|} = \frac{\sum_{i=1}^n g_i\rho_i|v_iA_i|}{\sum_{i=1}^n \rho_i|v_iA_i|} \quad (81)$$

où :

ρ_i est la masse volumique du constituant *i*,

$|v_iA_i|$ la valeur absolu du débit volumique élémentaire *i*.

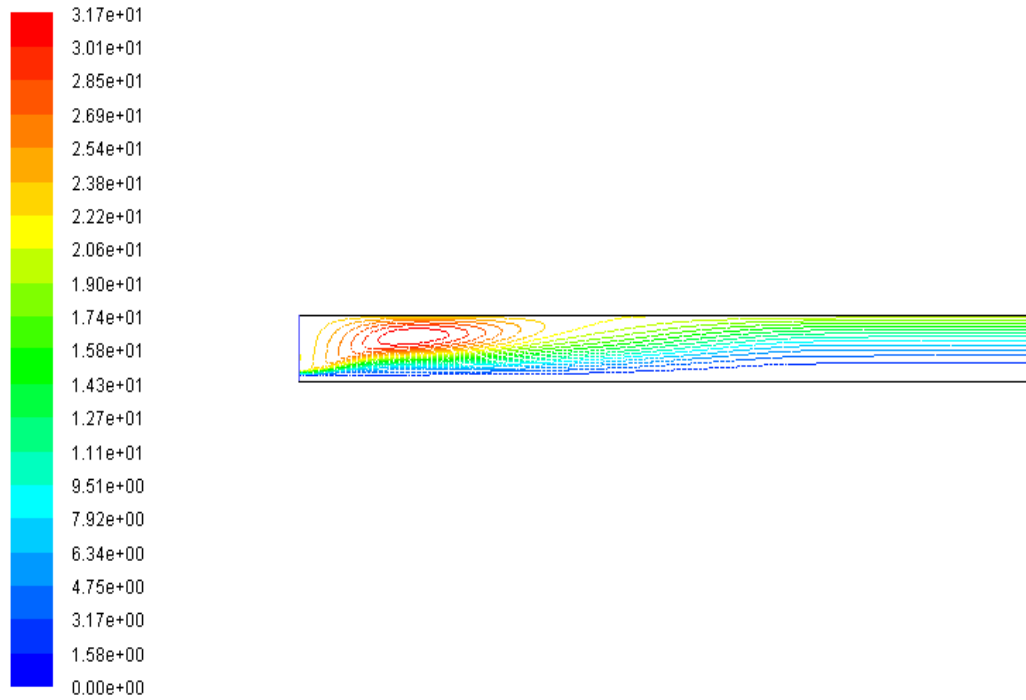


Figure 4.11: Contour de la Fonction de courant (sans rayonnement).

L'allure de la fonction de courant (Figure 4.11) montre l'existence d'une importante zone de recirculation dans la partie supérieure près de la paroi du four d'une taille de 13 m de longueur, c'est en fait la même zone que des instabilités aérodynamiques causant la chute du revêtement pariétal ont été détectées [37].

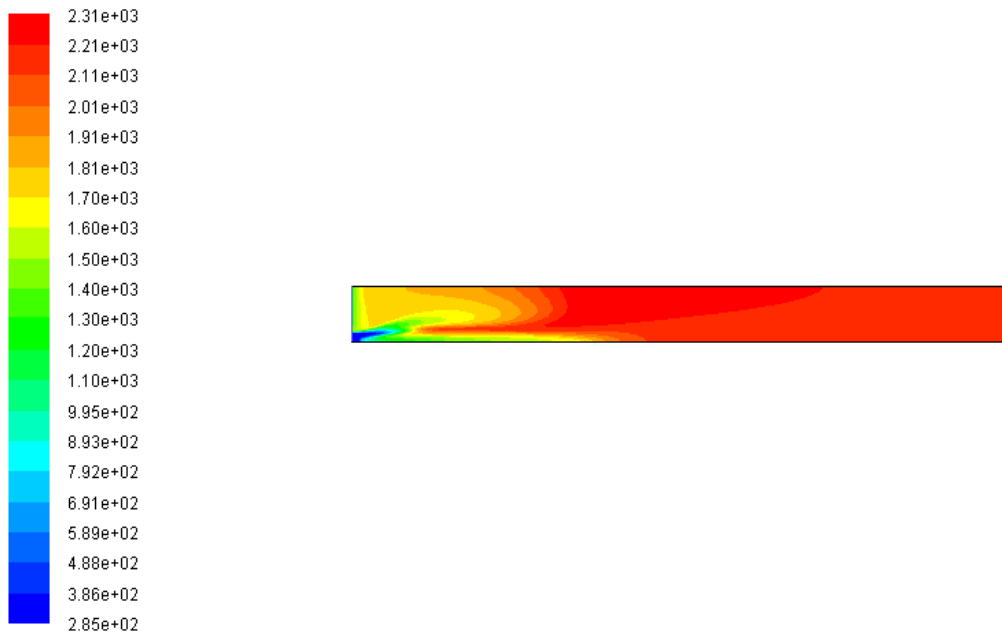


Figure 4.12: Contours de la température moyenne (avec rayonnement).

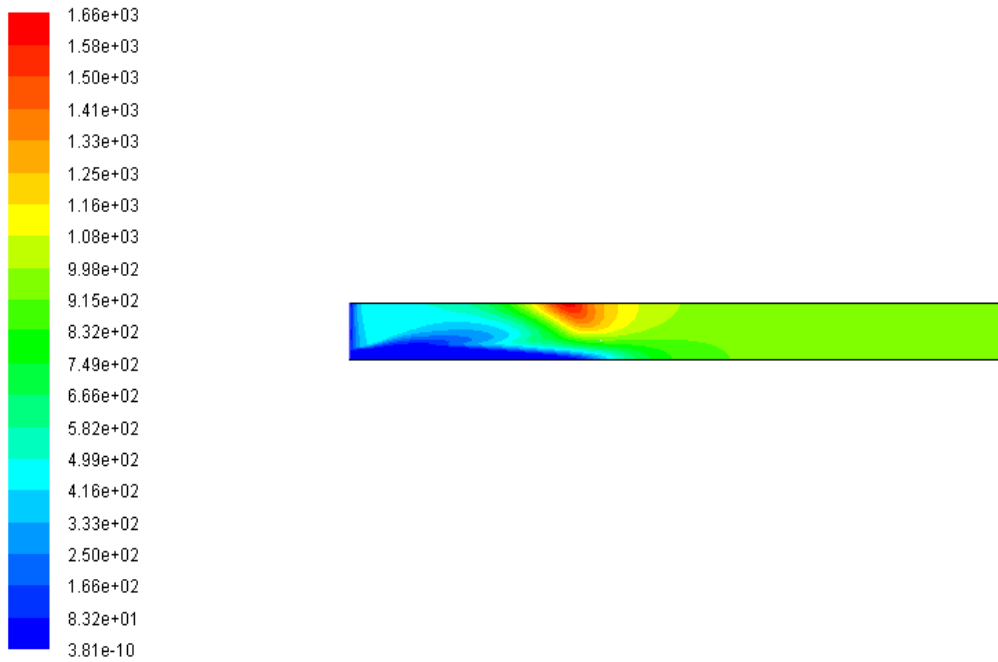


Figure 4.13: Contour du *NO* en *ppm* (avec rayonnement).

En considérant l'effet des pertes par radiation, on remarque une diminution du pic de la température statique de 67 K (Figure 4.12), ce qui correspond à une sous estimation de 3% par rapport à a valeur calculée sans rayonnement, aussi, le niveau du *NO ppm* au plan de sortie du four se voit diminuée de 164 *ppm* (tableau 4.3).

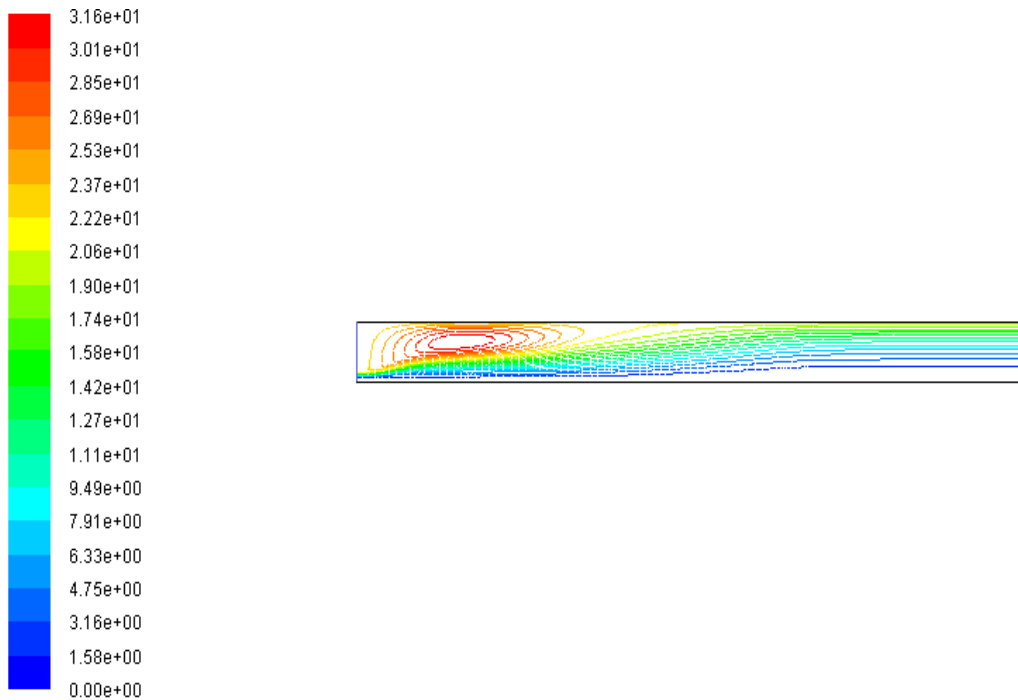


Figure 4.14: Contour de la Fonction de courant (avec rayonnement).

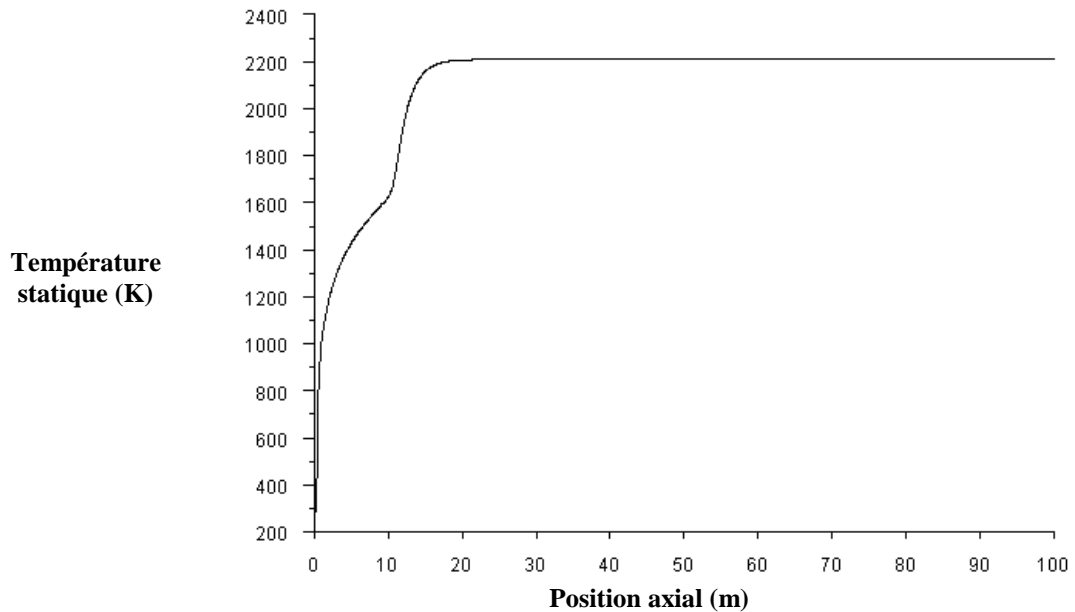


Figure 4.15: Profil de la température axiale du four (avec rayonnement).

L'allure de la fonction de courant et la longueur de flamme visible (Figure 4.14 et Figure 4.15) demeurent non affectées par l'effet du rayonnement, ceci est évident parce que ce dernier intervient dans le bilan thermique seulement et non pas sur la dynamique de l'écoulement.

D'après ce qui a été présenté, on note que les résultats des concentrations des NO_x obtenues par le modèle $k-\varepsilon$ standard sont sous estimés par rapport aux données expérimentales de l'ECDE avec un écart intolérable de 740 ppm, en fait, les hypothèses du modèle considérant la turbulence homogène isotrope dans le cas des conditions de fonctionnement données sont faibles et le problème principale est engendré par le temps caractéristiques de turbulence (k/ε) important de la turbulence où la production de l'énergie cinétique est beaucoup plus importante que sont taux de dissipation, ce qui pousse à recourir à des modèles de turbulence bien adaptés à ce type de problème, tel est le cas du modèle $k-\omega$ standard utilisé dans la simulation suivante, qui tient en compte de cette spécificité, en transportant le k/ε appelé "taux de dissipation spécifique" [26].

L'utilisation du modèle de turbulence $k-\omega$ standard donne des résultats relativement encourageants, en effet, en l'absence de l'effet des radiations, le modèle prévoit une température maximale avoisinant 2400 K (Figure 4.16) positionnée en une zone lointaine située à 35 mètre de l'entrée du four, c'est en cette même zone, que le taux du NO thermique

est important (Figure 4.17), on observe un écart de 1500 *ppm* par rapport aux calculs par le modèle $k - \varepsilon$ standard sans rayonnement.

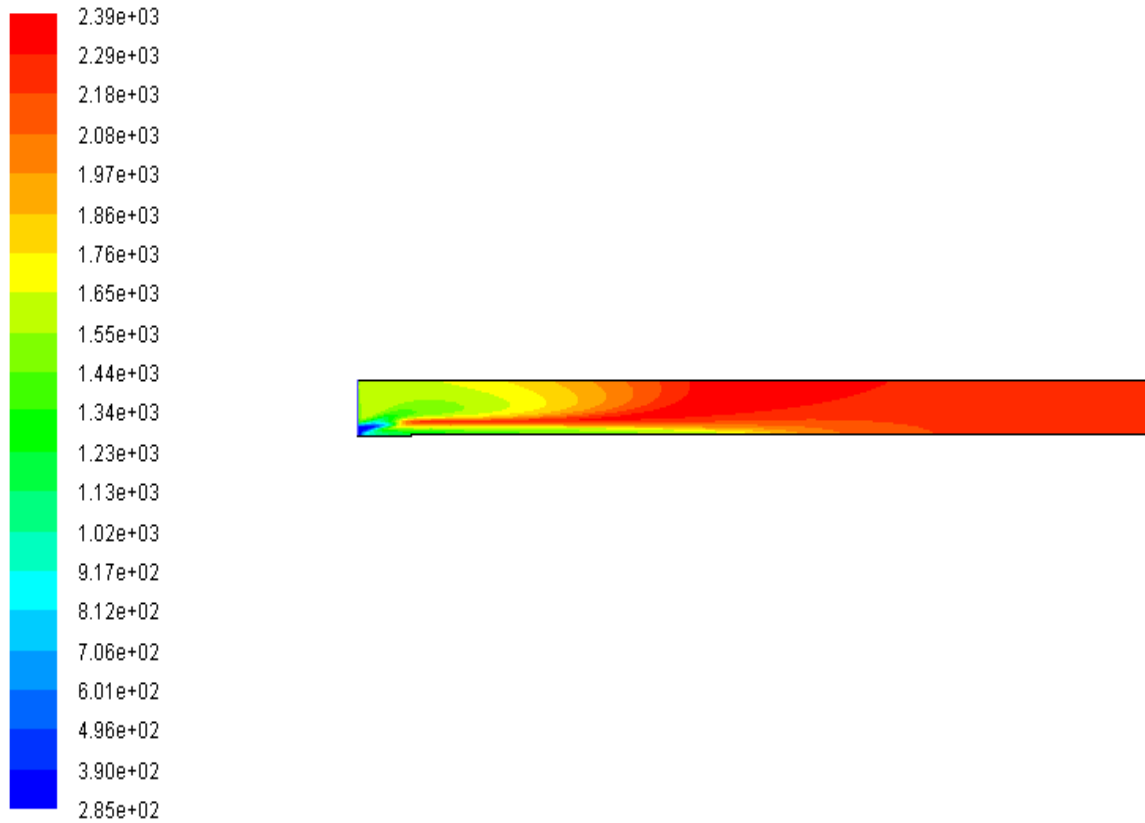


Figure 4.16: Contour de la température statique moyenne (sans rayonnement).

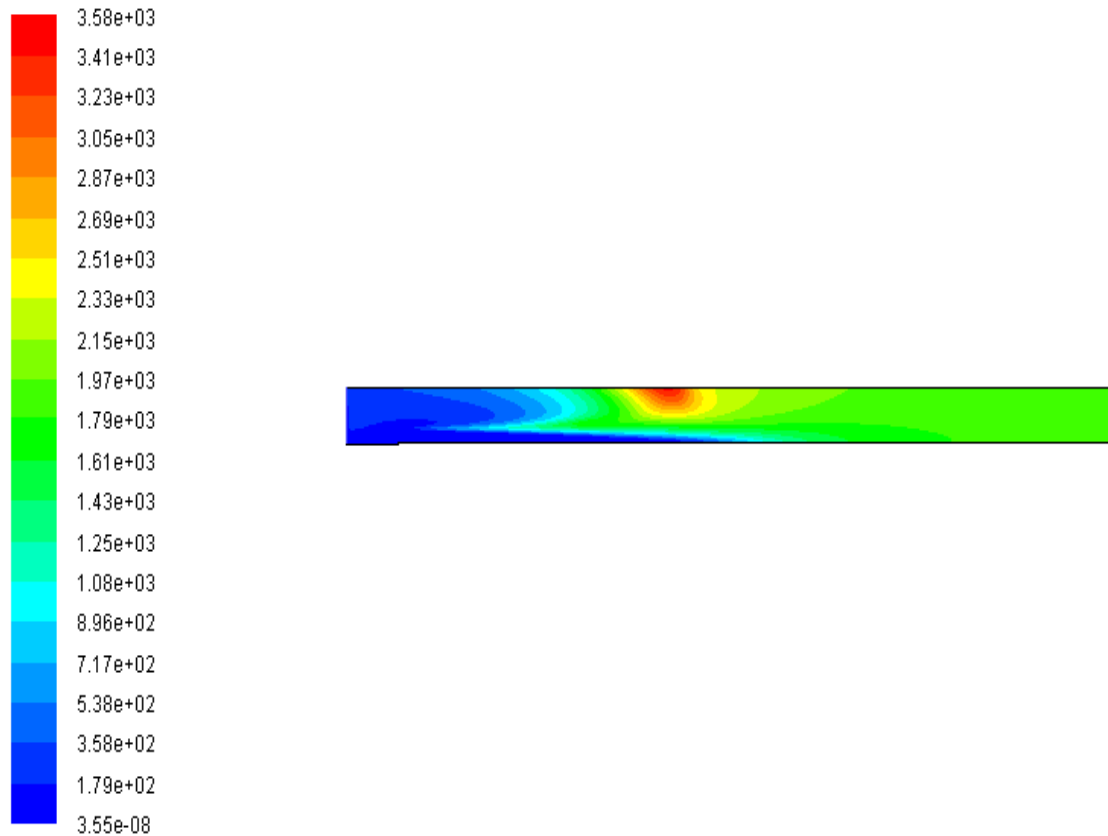


Figure 4.17: Contour du *NO ppm* (sans rayonnement).

Au niveau de la sortie du four (tableau 4.3) le taux du *NO ppm* (1855) présente seulement un écart de 170 *ppm* par rapport aux mesures sur site de l'*ECDE*, la longueur visible de la flamme et la taille de la zone de recirculation (Figure 4.18, 4.19) sont bien captées.

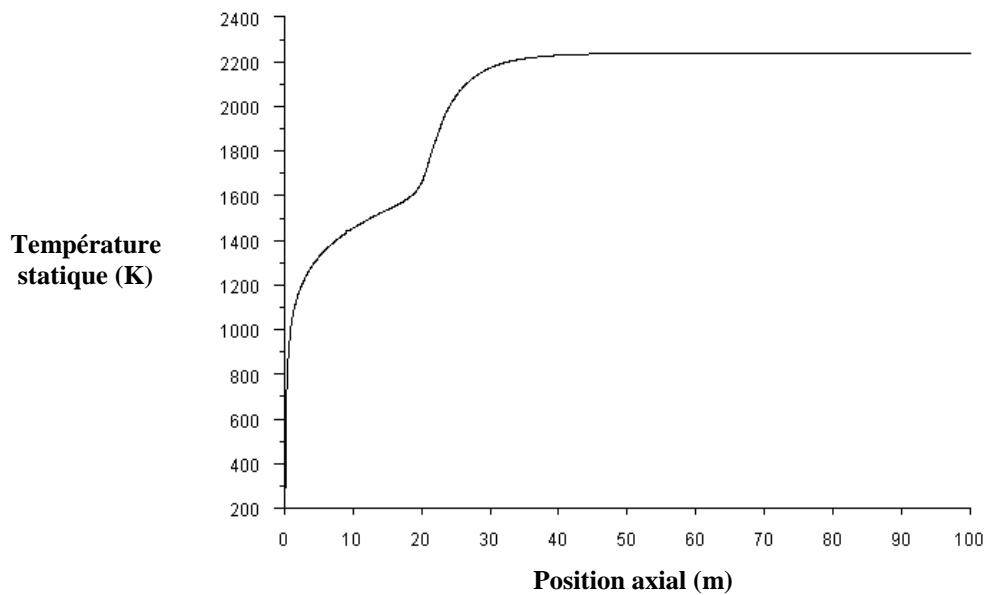


Figure 4.18: Profil de la température axiale dans le four (sans rayonnement).

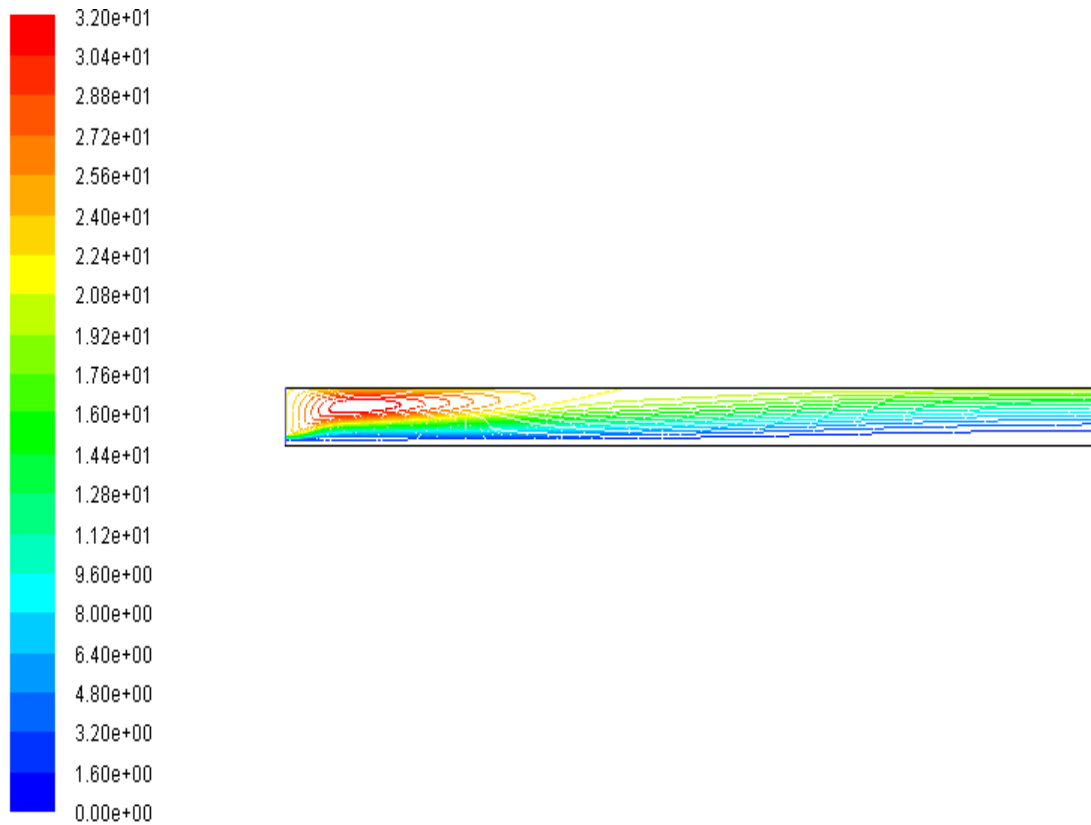


Figure 4.19: Contour de la fonction de courant (sans rayonnement).

En prenant en considération l'effet du rayonnement dans l'équation de l'énergie, et par utilisation du modèle de turbulence $k-\omega$ standard, le maximum de température coïncide pratiquement (Figure 4.20) avec la valeur trouvées analytiquement par le biais de *CEA*, aussi, la surestimation du *NO ppm* en sortie (tableau 4.3) devient plus faible.

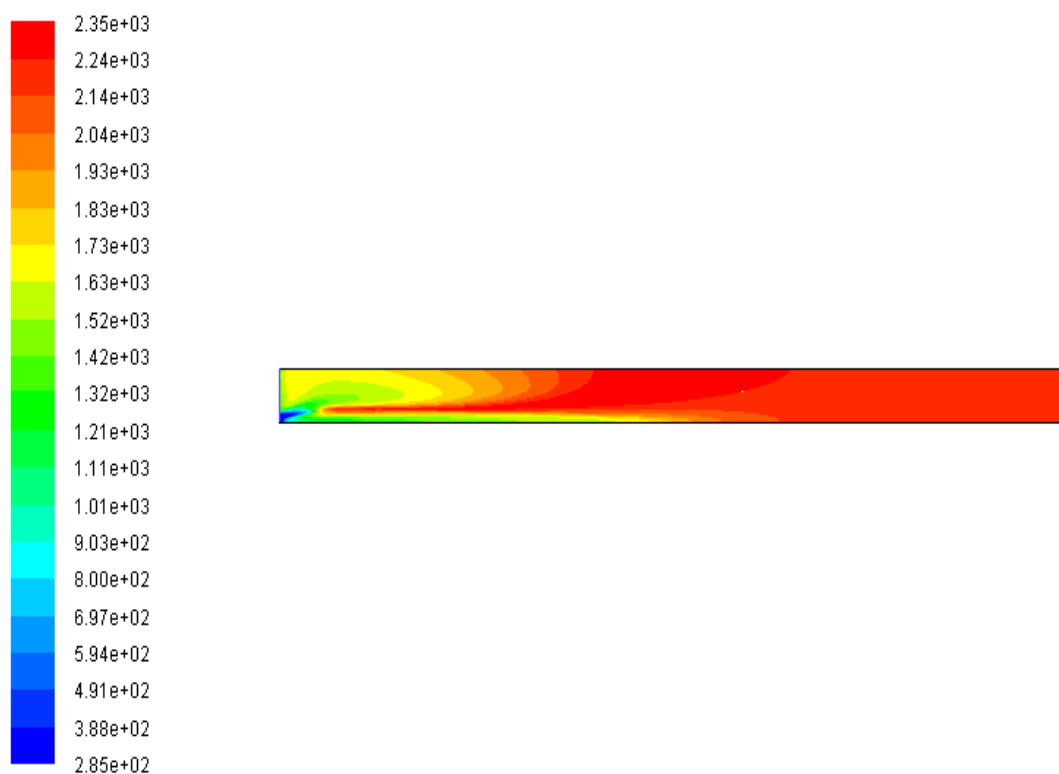


Figure 4.20: Contour de la température statique moyenne (avec rayonnement).

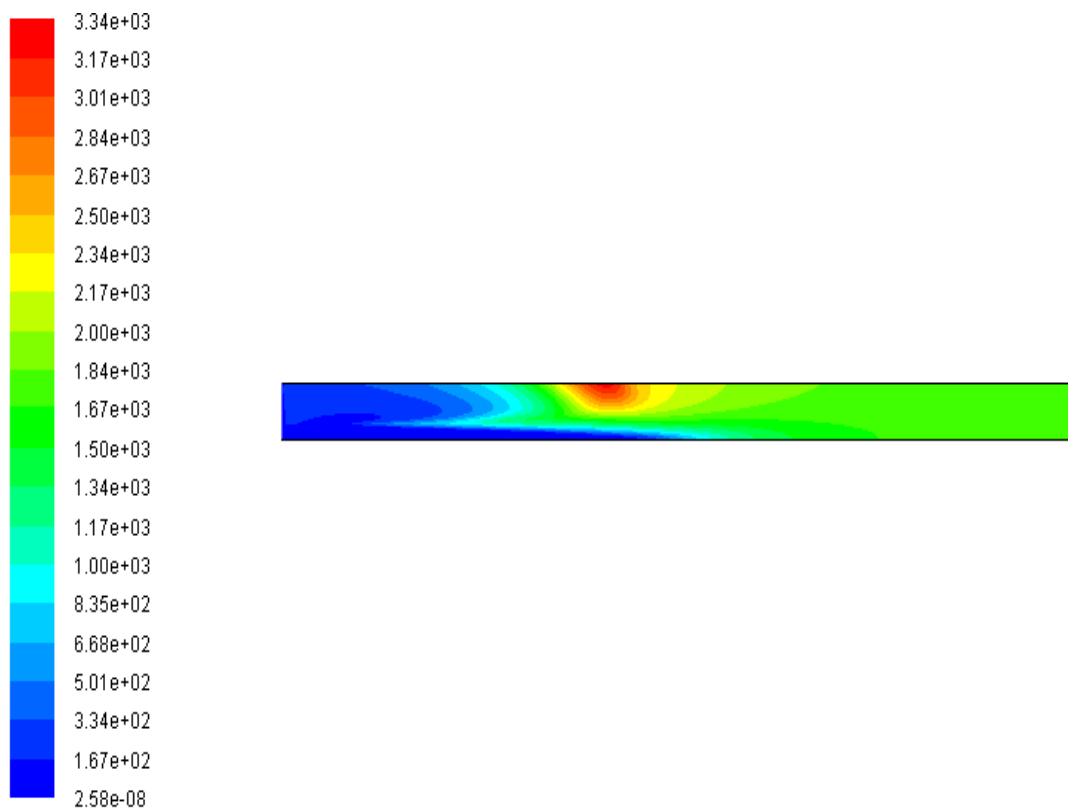


Figure 4.21 : Contour du *NO ppm* (avec rayonnement).

Il est évident que la température de l'air récupéré du refroidisseur (air secondaire, noté Air-2) varie quand l'écoulement est réinjectée en aval du four (coté brûleur) en fonction du débit et la qualité de la matière cuite (clinker) qui stocke de l'énergie calorifique, et pour cette raison, plusieurs simulations ont été effectuées pour divers températures de l'air secondaire, afin d'analyser cet effet de préchauffage sur l'efficacité de la combustion, déterminée par le facteur *OTDF*, et sur le taux de pollution en *NO*, ainsi, il est remarqué (Figure 4.22) un comportement antagoniste entre les deux quantités citées, ceci traduit clairement le compromis qui existe pour une combustion efficace et propre.

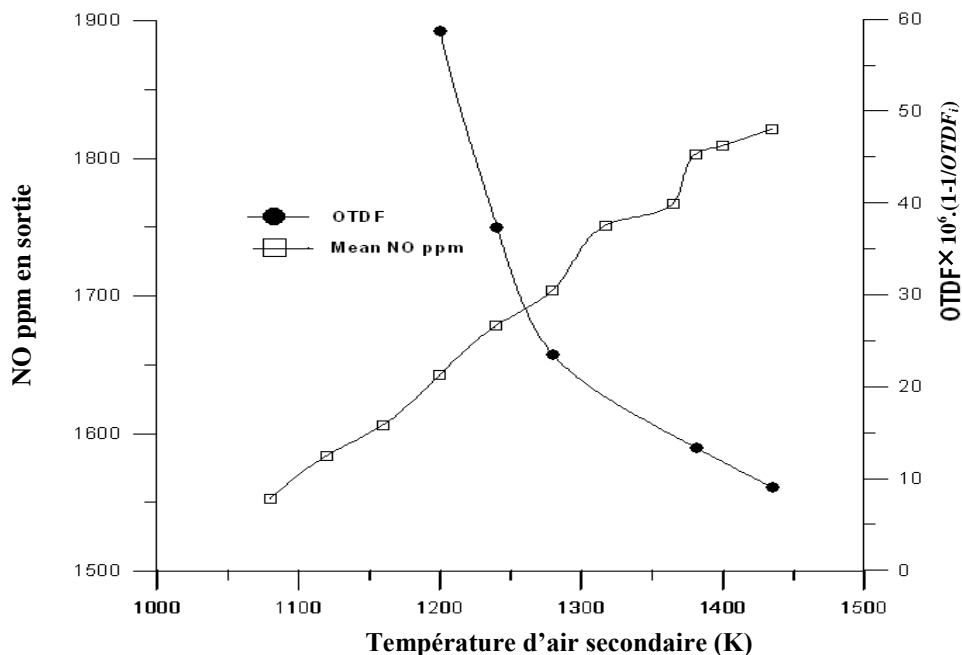


Figure 4.22: Effet de la température de l'air secondaire sur le *OTDF* et le taux du *NO* (avec rayonnement).

Seulement un point de fonctionnement optimal qu'on a pu dégager [27] lors des simulations, correspondant à un taux de 1550 *ppm* en sortie du four, avec une efficacité proche de l'unité (100%) sous condition d'assurer une température de 1080 *K* pour l'air secondaire, ce qui est pratiquement aisé à obtenir.

L'analyse paramétrique a montrée [27] qu'on pouvait arriver à un niveau de 400 *ppm* (niveau équivalent à un four européen) si les parois internes du four pourraient être maintenues à 600 *K*, cependant, ce processus exige des équipements additionnels et du matériel coûteux (refroidisseurs, échangeurs, régulateurs, sondes....) et par conséquent, représente un défi technologique pour les concepteurs de fours.

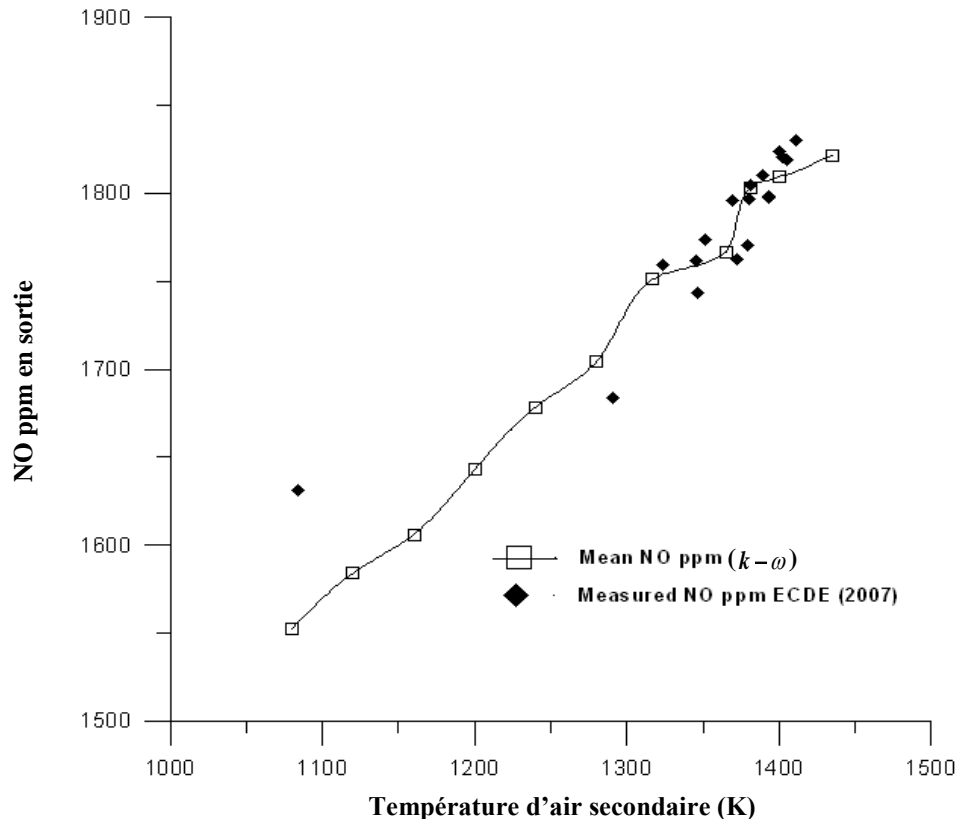


Figure 4.23: Comparaison entre les résultats de la simulation et les valeurs mesurées à l'ECDE pour le NO ppm (avec rayonnement).

L'examen des résultats de la simulation numérique vis-à-vis des mesures relevées du site de la cimenterie de *Chlef* (Figure 4.23), montre qu'un bon accord est obtenu quand au taux du NO en sortie du four, l'écart noté devient plus faible lorsque la température de l'air secondaire augmente. On pense que cet écart, induisant une surestimation de 4% dans les calculs numériques, et d'une part dû au caractère complet du modèle de combustion (chimie à une étape), et à la non prise en compte des pertes par conduction notées sur les parois du four, en effet, les parois du four sont constituées de trois couches différentes de bonne isolation thermique, et d'autre part, la matière première est préchauffée et entre dans le four avec une température élevée varie entre (800 ÷ 1000 K) qui compense généralement ces pertes.

Afin de récapituler les résultats obtenus, nous présentons dans le tableau qui suit une confrontation entre les résultats de la simulation et les mesures effectuées au niveau du four de la cimenterie de *Chlef*

	Calculs par CEA	Données ECDE	Modèle $k-\varepsilon$		Ecart relatif $k-\varepsilon$ (%)		Modèle $k-\omega$		Ecart relatif $k-\omega$ (%)	
			Avec rayonnement	Sans rayonnement	Avec rayonnement	Sans rayonnement	Avec rayonnement	Sans rayonnement	Avec rayonnement	Sans rayonnement
T_{max} (K)	2349	-	2312.7	2380	1.55	1.3	2346.5	2391.6	0.1	1.78
NO_{max} (ppm)	-	-	1664	2064.2	-	-	3339.8	3584.3	-	-
NO moyen en sortie (ppm)	-	1681	942	1106.1	-44	-34.2	1751.1	1854.9	4	9.38
Longueur de flamme ($\cong m$)	-	30 ÷ 45	22	22	Sous estimé	Sous estimé	39	39	Bien estimé	Bien estimé
Taille Z.R ($\cong m$)	-	15 ÷ 25	13	13	Sous estimé	Sous estimé	18	18	Bien estimé	Bien estimé

Tableau 4.3 : Confrontation entre les résultats de la simulation et les données réels de l'ECDE.

Il est remarqué qu'une bonne prédiction du taux du NO en sortie du four est obtenue pour le cas du modèle de turbulence $k-\omega$ standard, pour une chimie à une étape, et par adoption du modèle DO pour le rayonnement. Cette concordance acceptable avec les données réels du four, est assurée pour plusieurs températures de l'air secondaire, les autres paramètres étant fixés, en conséquence, on pourra dans l'avenir, et sous réserve d'analyser les effets de tout les paramètres (pression d'injection des réactifs, température d'injection du gaz) significatifs, nous pourrons développer un outil numérique prévisionnel du taux d'émissions polluantes pour le cas des fours de cimenteries.

Conclusion et perspectives

Les rejets des polluants de type NO_x issus des systèmes de combustion sont strictement réglementés, les industriels doivent introduire le paramètre environnemental dans leur politique de production. Une bonne et rigoureuse analyse de l'écoulement réactif du mélange méthane/air, peut permettre une meilleure prédiction du niveau des rejets polluants (NO_x essentiellement) et par conséquent, contribue au développement des techniques de réduction. Ces mêmes techniques, bien que classique dans la plupart des cas, ne sont réellement appliquées qu'à des phases d'avant projets ou de premiers montages, en effet, appliquer une technique de dépollution quelconque, peut affecter généralement la qualité du ciment, et nécessite parfois l'interruption du processus de production, en conséquence, les techniques de réduction doivent avant tout être simulées numériquement ou expérimentalement.

Un travail de *CFD* est appliqué pour étudier le comportement des écoulements réactifs dans le four et de prédire le taux de NO produit par la combustion d'une flamme non-prémélangée Méthane/Air d'un brûleur de four industriel destiné pour la production du ciment.

Dans ce travail, on s'intéresse à la combustion turbulente d'une flamme non-prémélangée (de diffusion) simulée avec ; une chimie à une étape, deux modèles standard ($k - \varepsilon$ et $k - \omega$) de turbulence, un modèle d'interaction chimie turbulence avec une fonction *Bêta* et pour être plus réaliste on a pris en compte les pertes par radiation dans le bilan thermique global avec le modèle des ordonnées discrète (*DO*).

On s'intéresse aussi; à la longueur de flamme visible pour un rapport de mélange donné, au control de la distribution de la température à la sortie du four et au taux de production du *NO thermique* donné par le mécanisme de *Zeldovich* et leur relation avec l'efficacité de la combustion.

La simulation montre que la longueur de flamme visible et la distribution de la température sont fortement dépendantes des caractéristiques de la turbulence où elles sont bien captées par le modèle $k - \omega$ standard et sous estimées par le modèle $k - \varepsilon$ standard, cependant, la

combustion sous les conditions de fonctionnement, présente un niveau élevée d'émission du NO qui peut être réduit par l'addition des équipements de refroidissement pour l'air réinjecté (l'air secondaire) et les parois intérieur du four.

Comme perspectives à notre modeste contribution, nous comptons instaurer une technique de réduction des NO_x dans nos modèles numériques ; celle-ci doit évidemment être compatible et aisément implantable sur le site de la cimenterie de Chlef, en gardant dans notre esprit, que le facteur "qualité de production" est d'une importance vitale pour l'entreprise, et que le paramètre "taux de pollution" l'est aussi, notre bût essentiel étant d'aboutir à une production de ciment propre et efficace.

Références bibliographiques :

- [1] Tomlin, A.S., 2007 Can combustion technologies reduce our impact on both the global climate and local air quality, In proceeding of the third European combustion meeting, Crete, Greece.
- [2] CEMBUREAU, Association Européenne du Ciment, 1999 Le changement climatique, publication par CEMBUREAU, N° Editeur: D/1998/5457, Bruxelles.
- [3] Noui, S., 2006 Etude numérique de la combustion des gaz dans un four de cimenterie, Mémoire de magister en physique énérgitique, Université Hadj-Lakhdar, Batna, Algérie.
- [4] Bureau européen IPPC, 1999 Bref du ciment et de la chaux, World Trade Center, Isla de la Cartuja s/n, E-41092 Séville, Espagne.
- [5] Contrôle du four et enregistrement des résultats, 1982 Rapport technique, Kawasaki heavy industries, Kobe, Japan.
- [6] Environment Agency, 1996 Étude technique et économique des procédés concernant le ciment et la chaux, Rapport britannique, The United Kingdom.
- [7] Julie, G., Clothilde, R., 1999 Méthodes spectrométriques d'analyse et de caractérisation, Dossier instrumentation et Mesure Les oxydes d'azote, ENSM, Saint-Etienne Cedex, France.
- [8] Siemens, 2004 ULTRAMAT 23 Analyseurs de gaz NDIR un à trois canaux IR et oxygène, Catalogue, D-76181 KARLSRUHE, Allemagne.
- [9] British Cement Association, 1997 Prevention and abatement of NOx emissions, International Cement Review, p. 51-59.
- [10] Ministère du Logement, de l'aménagement de l'espace et de l'environnement, 1997 Dutch Notes on BAT for the Production of Cement Clinker, Rapport néerlandais, Pays-Bas.
- [11] Zheng, M., Reader, G.T., Hawley, J.G., 2004 Diesl engine exhaust gas recirculation – A review on advanced and novel concepts, Energy Conversion and Management, Vol.45, pp. 883-990.
- [12] Belhachemi, A., 2004 Dimensionnement d'un statoréacteur avec effet de refroidissement, mémoire de Magistère en énérgitique, Université Mohamed Boudiaf, Oran, Algérie.
- [13] Joseph, D., 2004 Modélisation des transferts radiatifs en combustion par méthode aux ordonnées discrètes sur des maillages non structurés tridimensionnels, thèse de Doctorat en énérgitique et transferts, INPT, Toulouse, France.
- [14] Doris, L., 2005 Introduction à la simulation des écoulements turbulents, Cours destiné aux élèves d'ingénieurs, PSA Peugeot Citroën Direction de la recherche et de l'innovation Automobile, France.
- [15] Denis, V., 2001 Modélisation et simulation numérique de la combustion turbulente, rapport, Centre de Recherche sur la Combustion Turbulente Laboratoire E.M2.C., C.N.R.S. Ecole Centrale de Paris 92295 Châtenay Malabry CEDEX, France.

- [16] Borghi, R., 2003 la combustion turbulente, Technique de l'ingénieur, Section Mécanique, Vol.B8, pp.325.
- [17] Thermochemical Tables JANAF (Joint ArmyNavy Air Force). 2e éd. D.R. Stull, H. Prophet, project directors US Dept. of Commerce -National Bureau of Standards (1971).
- [18] Hinze, J. O., 1975 Turbulence, McGraw-Hill Publishing Co., New York.
- [19] Pesenti, B., 2006 caractérisation numérique et expérimentale d'un brûleur à gaz à swirl variable, these de Doctorat en sciences appliquées, Polytech, MONS, Bruxelles, Belgique.
- [20] Launder, B. E., Spalding, D. B., 1972 Lectures in Mathematical Models of Turbulence. Academic Press, London, England.
- [21] Fang, D., Majdalani, J., Chiaverini, M.J., 2003 Simulation of the cold wall swirl driven combustion chamber, AIAA Paper, 2003-5055.
- [22] Pope, S.B., 1978 An explanation of the turbulent round-jet / plane-jet anomaly, AIAA Journal, Vol.16, No.3, pp. 279-281.
- [23] Benarous, A., Liazid, A., Karmed, D., H₂/O₂ 2007 Combustion under supercritical conditions, In proceeding of the third European combustion meeting, Crete, Greece.
- [24] Fluent V6.3, 2006 The software Package, Fluent Inc, New Hampshire, USA.
- [25] Yakhot, V., Orszag, S. A., Renormalization Group Analysis of Turbulence: I. Basic Theory. Journal of Scientific Computing, 1(1):1-51, 1986.
- [26] Fluent Inc, Fluent 6.3 User's Guide, Chapter 12, 2006 Modeling turbulence, Lebanon, New Hampshire, USA.
- [27] Mokhtar didouche, A., Benarous, A., Loukarfi, L., Nial, M., 2007 Numerical investigation of the NO production in an industrial Furnace, Conférence internationale sur l'énergétique et la pollution, Constantine, Algérie.
- [28] Wilcox, D. C., 1998 Turbulence Modeling for CFD, DCW Industries, Inc., La Canada, California.
- [29] Rullaud, M., 2004 Modélisation de la combustion turbulente via une méthode de tabulation de la cinétique chimique détaillée couplée à des fonctions densités de probabilité, thèse de Doctorat en Energétique, INSA, ROUEN, France.
- [30] Poinot, T., 2006 La combustion, polycopié de cours destiné aux Etudiants de Master, IMFT, Toulouse, France.
- [31] Soete, G.D., 1997 Kinetics of combustion and combustion related nitrogen chemistry, Cours de DEA, université de Rouen, France.
- [32] Magnussen, B. F., Hjertager, B. H., 1976 On mathematical models of turbulent combustion with special emphasis on soot formation and combustion, In 16th Symp. (Int'l.) on Combustion, The Combustion Institute.
- [33] Fluent Inc, Fluent 6.3 User's Guide, Chapter 14, 2006 Modeling Species Transport and Finite-Rate Chemistry, Lebanon, New Hampshire, USA.
- [34] Daniel, G., 2007 Equations thermomécaniques, Cours de Master, ONERA, France.
- [35] Cuenot, B., 2002 Introduction à la modélisation de la combustion turbulente, polycopié de cours, CERFACS, Toulouse, France,

- [36] Spalding, D. B., 1970 Mixing and chemical reaction in steady confined turbulent flames. In 13th Symp. (Int'l.) on Combustion. The Combustion Institute.
- [37] Nial, M., 2007 Caractérisation des paramètres de stabilisation d'une flamme de brûleur industriel : applications aux fours de cimenteries, Mémoire de magister, Département de Mécanique, UHB, Chlef, Algérie.
- [38] Williams, F.A., 1985 Combustion theory, Addison-Wesley.
- [39] Hanson, R. K., Salimian, S., 1984 Survey of Rate Constants in H/N/O Systems. In W. C. Gardiner, editor, Combustion Chemistry, page 361.
- [40] Fluent Inc, Fluent 6.3 User's Guide, Chapter 20, 2006 Modeling Pollutant formation, Lebanon, New Hampshire, USA.
- [41] Lipatnikov, A.N., Nazarov, I.P., Prostov, V.N., 1988 Nitrogen oxide formation in flame at slight deviations from equilibrium, Combustion explosion and shock waves, Vol.24, No.4, pp.407-409.
- [42] Jiang, B., Liang, H., Huang, G., Li, X., 2006 Study on NO_x Formation in CH₄/Air Jet Combustion, Chinese J. Chem. Eng., Vol.14, No.6, pp.723-728.
- [43] Fenimore, C. P., 1971 Formation of Nitric Oxide in Premixed Hydrocarbon Flames. In 13th Symp. (Int'l.) on Combustion, page 373. The Combustion Institute.
- [44] Miller, J. A., Bowman, C. T., 1989 Mechanism and Modeling of Nitrogen Chemistry in Combustion. Prog. in Energy and Comb. Sci., 15:287-338.
- [45] Lataillade, A., 2001 Modélisation détaillée des transferts radiatifs et couplage avec la cinétique chimique dans les systèmes en combustion, these de Doctorat, Le Laboratoire de Météorologie Dynamique à Jussieu PARIS, Le Laboratoire d'Etude des Systèmes et de l'Environnement Thermique de l'Homme - Université Paul Sabatier TOULOUSE, et Le centre Energétique-Environnement - Ecole des Mines ALBI, France.
- [46] Fluent Inc, Fluent 6.3 User's Guide, Chapter 13, 2006 Modeling Heat Transfer, Lebanon, New Hampshire, USA.
- [47] Chui, E.H., Raithby, G. D., 1993 Computation of Radiant Heat Transfer on a Non-Orthogonal Mesh Using the Finite-Volume Method. Numerical Heat Transfer, Part B, 23:269-288.
- [48] Modest, M. F., 1991 The Weighted-Sum-of-Gray-Gases Model for Arbitrary Solution Methods in Radiative Transfer. J. Heat Transfer, 113:650-656.
- [49] Gordon, S., McBride, B., 1996 Computer program for calculation of complex chemical equilibrium compositions and applications (CEA), the Software Package, NASA Reference Publication 1311, Ohio, USA .
- [50] Sous Direction des Techniques Distribution Gaz, 2002 Guide Technique Distribution Gaz, SONELGAZ, Chlef, Algérie.
- [51] Guibet, J.C., 2004 Les carburants et la combustion, Technique de l'ingénieur, Section Mécanique, Vol.B2, pp.520.
- [52] Dagaut, Ph., 2004 Formation et Réduction des Polluants en Combustion, Communication présentée lors de l'école de combustion, Oléron, France.

- [53] Bernardo, M., 2002 Contribution à l'étude Numérique des écoulements turbulents inertes et réactifs stabilisés en aval d'un élargissement brusque symétrique, thèse de Doctorat en sciences pour l'ingénieur, ENSMA, Poitiers, France.
- [54] Hautman, D.J., Dryer, F.L., Schug, K.P., Glassman, I., 1981 Combustion Sciences and Technologies, pp.25- 219.
- [55] Edelman, R.B., Fortune, O.F., 1969 A.I.A.A., Paper 69-86.
- [56] Edelman, R.B., Harsha, P.T., 1978 Progr. En. Comb. Sci., 4, 1.
- [57] Duterque, J., Borghi, R., Tichtinsky, H., 1981 Combustion Science and Technology, 26,1.
- [58] Benarous, A., Liazid, A., 2005 Une approche thermochimique pour le calcul des performances des turboréacteurs, Journées de Mécanique, Université de Ouargla, Ouargla, Algérie.
- [59] Gordon, S., McBride, B., Zeleznik, F.J., 1984 Computer program for calculation of complex chemical equilibrium compositions and applications. Supplement transport properties, NASA Reference Publication No.86885.
- [60] Gambit : A CFD Preprocessor, Gambit 2.0 User's guide, Vol.2, Canterra, Lebanon, 2002, New Hampshire, USA.
- [61] George, P.L., 1991 Génération automatique de maillage et application, Collection R.M.A, Masson Editions, Paris, France.
- [62] Patankar, S.V., 1980 Numerical heat transfer and fluid flow, Hemisphere, Washington, D.C. PP 115-120.
- [63] Azzi, A., 2003 Introduction à la méthode des volumes finis, Polycopié du cours destiné aux étudiants de 1er année magister en mécanique, U.S.T.M.B, Oran, Algérie.
- [64] Paillard, C., 2004 Thermochimie Appliquée à la Combustion, Cours destiné aux élèves d'ingénieurs, CNRS et GFC, Oléron, France.

Annexes

Annexe A

A.1. Méthode des volumes finis [62]

A.1.1. Problème de diffusion :

Considérons un problème de transport de la variable ϕ par diffusion.

$$\text{div}(\Gamma \text{grad} \phi) + S_\phi = 0 \quad (\text{B-1})$$

La clé de la méthode des volumes finis réside dans l'application du théorème de la divergence ou théorème d'Ostrogradski [63], qui permet de changer une intégrale de volume en intégrale de surface.

$$\int_{CV} \text{div}(\Gamma \text{grad} \phi) dv + \int_{CV} S_\phi dv = \int_A n \cdot (\Gamma \text{grad} \phi) dA + \int_{CV} S_\phi dv = 0 \quad (\text{B-2})$$

A : surface enveloppant le volume de contrôle CV.

n : vecteur unitaire.

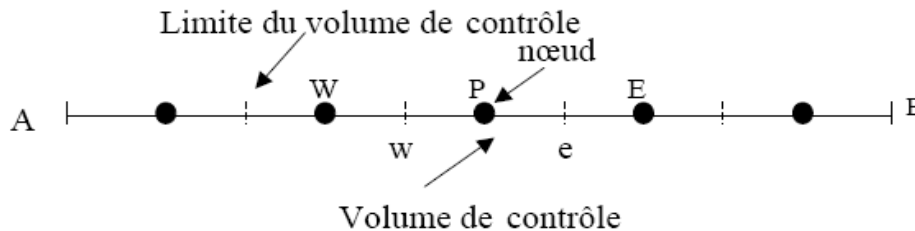
L'équation (B-1) en 1D prend la forme suivante :

$$\frac{d}{dx} \left(\Gamma \frac{d\phi}{dx} \right) + S = 0 \quad (\text{B-3})$$

Γ : Coefficient de diffusion.

S : Terme source.

Etape 1 : maillage

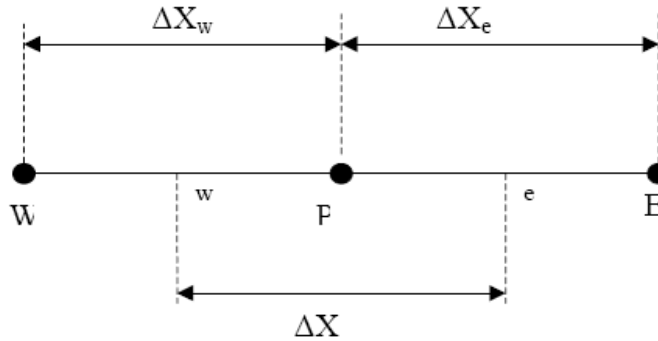


La valeur de ϕ aux frontières A et B est maintenue constante.

La première étape dans cette méthode consiste à diviser le domaine de calcul en un nombre fini et discret de volume de contrôle, on dit qu'on génère un maillage. L'opération consiste à subdiviser le domaine de calcul (Ligne AB) en un certain nombre de segments (Volume de contrôle). Le centre de chaque volume est placé exactement au milieu du segment correspondant.

Il est commode de s'arranger pour que les facettes des noeuds de frontières coïncident exactement avec les frontières du domaine de calcul. Dans le cas de la figure ci-dessous le domaine de calcul est divisé en cinq volumes de contrôles.

Système de notation :



Étape 2 : discrétisation

L'intégration de l'équation (B-3) sur le volume de contrôle de centre P donne :

$$\int_{\Delta V} \frac{d}{dx} \left(\Gamma \frac{d\phi}{dx} \right) dv + \int_{\Delta V} S dv = \left(\Gamma A \frac{d\phi}{dx} \right)_e - \left(\Gamma A \frac{d\phi}{dx} \right)_w + \bar{S} \Delta V = 0 \quad (B-4)$$

Interprétation : (principe de conservation)

- Flux diffusif de ϕ sortant de la facette e
- Flux diffusif de ϕ entrant par la facette w
- = production de ϕ dans le CV

Dans le cas général où le coefficient de diffusivité n'est pas constant ses valeurs sur les facettes "w" et "e" du volume de contrôle CV seront exprimées en fonction des valeurs aux points nœuds P,W et E par :

$$\Gamma_e = \frac{\Gamma_E + \Gamma_P}{2} ; \quad \Gamma_w = \frac{\Gamma_P + \Gamma_W}{2} \quad (B-5)$$

Pour simplifier l'exposé nous allons utiliser un maillage uniforme ($\Delta X_e = \Delta X_w = \Delta X$) et appliquer un schéma centré d'ordre deux pour remplacer les dérivés premières sur les facettes du volume de contrôle.

$$\left(\Gamma A \frac{d\phi}{dx} \right)_e = \Gamma_e A_e \left(\frac{\phi_E - \phi_P}{\Delta X} \right) \quad (B-6)$$

$$\left(\Gamma A \frac{d\phi}{dx} \right)_w = \Gamma_w A_w \left(\frac{\phi_P - \phi_w}{\Delta X} \right) \quad (\text{B-7})$$

Généralement le terme source S peut aussi dépendre de la fonction ϕ elle-même. Dans une telle situation nous écrivons :

$$\bar{S}\Delta V = S_u + S_P\phi_P \quad (\text{B-8})$$

En substituant les équations (B-5), (B-6), (B-7), (B-8) et (B-9) dans (B-4), nous obtenons :

$$\left(\Gamma_e A_e \frac{\phi_E - \phi_P}{\Delta X} \right) - \left(\Gamma_w A_w \frac{\phi_P - \phi_w}{\Delta X} \right) + (S_u + S_P\phi_P) = 0 \quad (\text{B-9})$$

et après arrangement :

$$a_P\phi_P = a_W\phi_W + a_E\phi_E + S_u \quad (\text{B-10})$$

avec :

$$a_W = \frac{\Gamma_w}{\Delta X} A_w, \quad a_E = \frac{\Gamma_e}{\Delta X} A_e, \quad a_P = a_W + a_E - S_P \quad (\text{B-11})$$

L'équation (B-11) sera construite pour tous les volumes de contrôles du domaine de calcul. En vue d'incorporer les conditions aux limites, un traitement spécial sera réservé aux volumes de frontières. Le système d'équations résultant sera un système d'équations algébriques linéaires comportant autant d'inconnus que d'équations. La distribution discrète de la variable ϕ sur le domaine de calcul peut être obtenue par inversion de la matrice du système d'équations. Cependant, cette méthode n'est quasiment jamais utilisée pour la simple raison qu'elle est très coûteuse en mémoire de stockage. Les méthodes itératives (par exemple : *Gauss-Seidel*) sont plus efficaces dans ce cas. Dans un calcul itératif il faut aussi définir un critère de convergence pour pouvoir arrêter les calculs à un moment donné.

Critère de convergence :

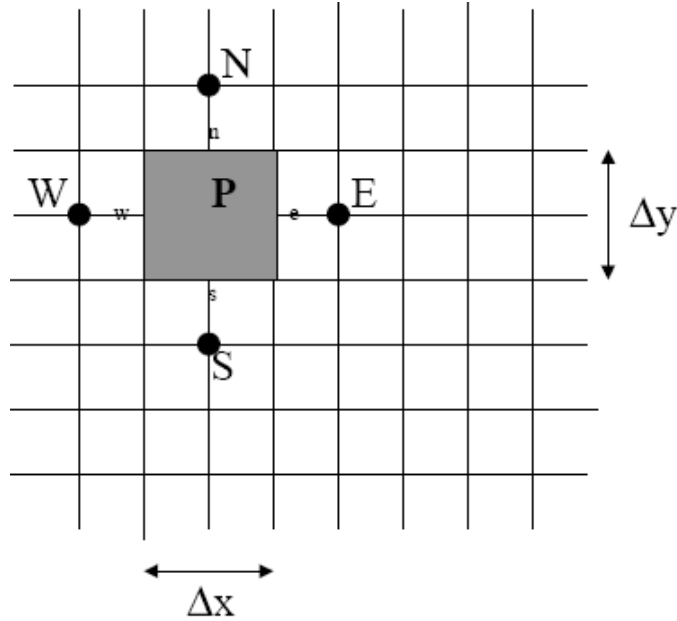
A partir de l'équation (B-10) nous pouvons écrire une expression du résidu pour estimer la satisfaction éventuelle de l'équation :

$$R = \sum_{\text{l'ensemble des volumes}} |a_W\phi_W + a_E\phi_E + S_u - a_P\phi_P| \quad (\text{B-12})$$

R représente le résidu des calculs et possède par conséquent l'unité de l'équation différentielle intégrée. Dans notre cas c'est le flux de chaleur (Joule par second). Pour avoir une idée précise

sur la convergence des calculs, il faut contrôler la valeur normalisée du résidu $R/F \leq \varepsilon$ où F représente le flux total.

A.1.2. Problème de diffusion à deux dimensions



La méthode utilisée précédemment peut facilement être appliquée au cas de phénomènes de transport à deux dimensions :

Soit l'équation suivante :

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) + S = 0 \quad (\text{B-13})$$

L'intégration de l'équation précédente autour du volume de contrôle de centre P donne :

$$\int_{\Delta V} \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) dx dy + \int_{\Delta V} \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) dx dy + \int_{\Delta V} S_{\phi} dV = 0 \quad (\text{B-14})$$

On utilisant les égalités suivantes : $A_e = A_w = \Delta y$ et $A_n = A_s = \Delta x$, nous obtenons :

$$\left[\Gamma_e \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e - \Gamma_w \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_w \right] \Delta y + \left[\Gamma_n \left(\frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_n - \Gamma_s \left(\frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_s \right] \Delta x + \bar{S} \Delta V = 0 \quad (\text{B-15})$$

Comme précédemment cette équation traduit un principe de conservation.

En utilisant les mêmes approximations centrées utilisées dans le paragraphe précédent nous posons :

$$\text{Le flux à travers la face ouest} = \Gamma_w \frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_w = \Gamma_w \frac{(\phi_P - \phi_w)}{\Delta x^-} \quad (\text{B-16})$$

$$\text{Le flux à travers la face est} = \Gamma_e \frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_e = \Gamma_e \frac{(\phi_E - \phi_P)}{\Delta x^+} \quad (\text{B-17})$$

$$\text{Le flux à travers la face nord} = \Gamma_n \frac{\partial \phi}{\partial y} \Big|_n = \Gamma_n \frac{(\phi_N - \phi_P)}{\Delta y^+} \quad (\text{B-18})$$

$$\text{Le flux à travers la face sud} = \Gamma_s \frac{\partial \phi}{\partial y} \Big|_s = \Gamma_s \frac{(\phi_P - \phi_S)}{\Delta y^-} \quad (\text{B-19})$$

Et l'équation (B-14) devient :

$$\Gamma_e \Delta y \frac{(\phi_E - \phi_P)}{\Delta x} - \Gamma_w \Delta y \frac{(\phi_P - \phi_W)}{\Delta x} + \Gamma_n \Delta x \frac{(\phi_N - \phi_P)}{\Delta y} - \Gamma_s \Delta x \frac{(\phi_P - \phi_S)}{\Delta y} + \bar{S} \Delta V = 0 \quad (\text{B-20})$$

en linéarisation le terme source comme précédemment et en arrangeant l'équation, nous obtenons la forme suivante:

$$a_P \phi_P = a_W \phi_W + a_E \phi_E + a_S \phi_S + a_N \phi_N + S_u \quad (\text{B-21})$$

$$a_W = \frac{\Gamma_w}{\Delta x} \Delta y, \quad a_E = \frac{\Gamma_e}{\Delta x} \Delta y \quad (\text{B-22})$$

$$a_S = \frac{\Gamma_s}{\Delta y} \Delta x, \quad a_N = \frac{\Gamma_n}{\Delta y} \Delta x \quad (\text{B-23})$$

$$a_P = a_W + a_E + a_S + a_N - S_P \quad (\text{B-24})$$

A.2. Algorithme de calcul pour le couplage pression-vitesse :

Le problème principal des équations de Navier Stokes en incompressibles est qu'il n'existe pas d'équation pour la pression, séparée de celle de la quantité de mouvement [14]. De plus la vérification de l'équation de continuité n'est pas garantie pour un champ de vitesse qui vérifie l'équation de quantité de mouvement.

Pour les solutions stationnaires, on utilise souvent une méthode instationnaire avec un pas de temps élevé pour obtenir une solution stationnaire. On utilise en général des méthodes implicites, c'est-à-dire pour lesquelles le champ de vitesse u_i^{n+1} est une fonction à la fois de données au temps n et de données au temps $n + 1$. Elles sont plus rapides que les méthodes explicites.

L'algorithme couramment utilisé pour effectuer l'avancement en temps est appelé *SIMPLE* (*Semi-Implicit Method for Pressure Linked Equation*, en 1984). Il ne s'agit pas d'une méthode implicite pure qui consiste à effectuer des inversions de matrices, mais d'une méthode de projection-correction, dans laquelle on estime la solution par des quantités intermédiaires, puis on les corrige

afin qu'elles vérifient bien la divergence nulle, et ainsi de suite jusqu'à ce que les corrections appliquées tendent vers zéro. Il s'agit d'un traitement pseudo-stationnaire des équations pour converger vers une solution stationnaire. Les étapes sont les suivantes : au départ on connaît u_i^n et p_n au temps t_n .

1. on résout de manière itérative les équations de quantité de mouvement linéarisées et on obtient un champ intermédiaire u_i^{m*} . La correction de vitesse est définie par $u_i^m = u_i^{m*} + u'$.
2. on introduit une correction de pression telle que $p^m = p^{m-1} + p'$. On résout l'équation pour de correction de pression p'
3. on corrige la pression p_m et la vitesse u_i^m , qui satisfait la continuité
4. on retourne à l'étape 1 et on effectue la sous itération $m + 1$, ainsi de suite jusqu'à ce que p' et u' soient négligeables.
5. alors on obtient $u_i^{n+1} = u^m$ et $p^{n+1} = p^m$.

Pour les problèmes instationnaires, le pas de temps choisi est choisi afin de reproduire la physique des fréquences souhaitées. Les itérations se poursuivent jusqu'à obtenir une bonne précision à chaque pas de temps. Pour les problèmes stationnaires, on choisit un pas de temps plus grand et on continue les itérations jusqu'à obtenir un état stationnaire.

Des améliorations de rapidité de convergence pour l'algorithme *SIMPLE* ont été apportées par la suite : il s'agit de *SIMPLEC* (pour *SIMPLE Consistant*, en 1984), de *SIMPLER* (pour *SIMPLE Révisé*, en 1980). *PISO* (*Pressure Implicit with Splitting of Operators*) (1966) est un autre algorithme adapté aux écoulements transitoires. Dans ces algorithmes la relation entre p' et u' est légèrement modifiée, ce qui accélère la convergence. *SIMPLEC* est le plus rapide.

A.3. Facteur de relaxation :

Afin de contrôler et réduire le changement produit durant chaque itération d'une variable (*pression, température, densité, k, ε, y, \dots*) de l'écoulement ϕ , *Fluent* permet d'agir sur les facteurs de relaxation assignés à un nombre de variables comme suite :

$$\begin{cases} \phi = \phi_{old} + \alpha \Delta\phi \\ \Delta\phi = \phi_{comp} - \phi_{old} \end{cases} \quad (\text{B-25})$$

où :

ϕ_{old} : Ancienne valeur de ϕ .

$\Delta\phi$: Changement dans la valeur de ϕ .

ϕ_{comp} : Valeur de relaxation.

α : Facteur de relaxation.

Le code de calcul offre les meilleurs des facteurs de relaxation pour une large gamme d'écoulements, néanmoins, si on voit qu'au cours du calcul les résidus commencent à s'amplifier, il est préférable de réduire ces derniers, par contre, si on observe une convergence très lente mais sûre, là on pourra les augmenter prudemment, surtout le facteur de relaxation lié à l'équation de continuité.

Les paramètres de sous relaxations des équations qui ont été utilisés dans la simulation sont données dans le tableau qui suit :

	Pression	Quantité de mouvement	k	ε	CH_4	O_2	H_2O	CO_2	Energie	Rayonmt	NO
Facteur de sous relaxation	0.3	0.7	0.8	0.8	0.95	0.95	0.95	0.95	1	1	1

Tableau A.1 : Facteurs de sous relaxation utilisés dans la simulation.

A.4. Critère de précision :

La résolution se fait sur la base d'un critère de précision, puisqu'on fixe pour chaque équation, un résidu (erreur max) à ne pas dépasser, l'utilisateur entre le nombre d'itérations maximales à ne pas dépasser si la précision n'est pas atteinte.

L'initialisation est un étape très importante, on donne ainsi des valeurs initiales aux inconnues puisque la résolution est itérative (ou commence par ϕ_0 , pour trouvé ϕ_1, \dots).