



Application de la réduction systematique de schemas cinetiques au calcul de flammes landnaires etirees de premelanges airpropane

E. Djavdan, N. Darabiha, V. Giovangigli, S. Candel

► To cite this version:

E. Djavdan, N. Darabiha, V. Giovangigli, S. Candel. Application de la réduction systematique de schemas cinetiques au calcul de flammes landnaires etirees de premelanges airpropane. Journal de Physique III, 1991, 1 (4), pp.651-666. 10.1051/jp3:1991146 . jpa-00248607

HAL Id: jpa-00248607

<https://hal.science/jpa-00248607>

Submitted on 4 Feb 2008

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Classification
Physics Abstracts
82.20

Application de la réduction systématique de schémas cinétiques au calcul de flammes laminaires étirées de prémélanges air-propane

E. Djavdan⁽¹⁾, N. Darabiha⁽¹⁾, V. Giovangigli⁽²⁾ et S.M. Candel⁽¹⁾

⁽¹⁾ Laboratoire E.M2.C du CNRS et de l'ECP, Ecole Centrale Paris, 92295 Chatenay-Malabry Cedex, France

⁽²⁾ Centre de Mathématiques Appliquées, U.A. CNRS 756, Ecole Polytechnique, 91128 Palaiseau Cedex, France

(Reçu le 23 février 1990, révisé le 22 octobre 1990, accepté le 12 décembre 1990)

Résumé. — L'étude des flammes laminaires étirées est importante sur le plan fondamental et elle présente aussi un intérêt considérable pour la modélisation de la combustion turbulente. Le calcul est généralement effectué avec des modèles chimiques très simplifiés ou avec des mécanismes cinétiques détaillés. Une nouvelle approche basée sur une réduction systématique des schémas cinétiques a été proposée par Peters. Notre objectif est d'évaluer cette méthode dans l'analyse des flammes de prémélange air-propane à la pression atmosphérique. Un schéma réduit amélioré à 9 espèces et 6 réactions est proposé. Tous les calculs sont comparés à ceux d'un schéma complexe de référence dû à Warnatz. Les résultats obtenus sont généralement satisfaisants. Il apparaît que les différences entre les calculs en chimie complexe et réduite, en ce qui concerne la position de la flamme, varient avec les paramètres de la flamme tels que la richesse, alors que les structures de flammes sont toujours bien décrites. Enfin, le schéma réduit reproduit correctement le phénomène d'extinction et les valeurs du taux d'étirement et de la richesse à l'extinction sont obtenues avec une précision raisonnable.

Abstract. — The study of strained laminar flames is of fundamental importance and it is also of great interest for turbulent combustion modeling. The calculations are usually performed either with extremely simple global kinetic schemes or with elementary and complex detailed chemistry. A new approach based on the systematic reduction of kinetic schemes has been recently proposed by Peters. Our goal is to evaluate this method in the context of an atmospheric premixed propane-air flame. An augmented reduced scheme involving 9 species and 6 reactions is proposed. All the computations are compared with those of a reference scheme due to Warnatz. The results obtained are generally satisfactory. It appears that the differences between the reduced and complex schemes concerning the flame position vary with the flame parameters such as the equivalence ratio, while flames structures are always well predicted. The extinction phenomenon is correctly reproduced by the reduced mechanism and the critical values of the strain rate and the chemical composition at extinction are determined with reasonable accuracy.

1. Introduction.

Les analyses de structures de flammes laminaires occupent une place importante en théorie de la combustion. Ces études ont aussi conduit plus récemment au développement de modèles de flammelettes pour la combustion turbulente (voir par exemple Marble et Broadwell [13], Libby *et al.* [12], Peters [15] et Darabiha *et al.* [4]). La flamme turbulente est décrite dans ces modèles comme une collection de flammes laminaires soumises aux taux de déformation imposés par les fluctuations turbulentes. Les propriétés de ces éléments de flamme comme les taux de dégagement de chaleur par unité de surface de flamme, les taux de consommation par unité de surface, les caractéristiques d'extinction sont utilisés pour établir le bilan de surface de flamme et pour déterminer les termes de source volumétriques.

De nombreuses études théoriques ont été effectuées au cours des dernières années sur la structure des flammes laminaires étirées (voir par exemple Law [11] pour un article de revue, Buckmaster et Ludford [1] pour des analyses asymptotiques, Giovangigli *et al.* [7,8], Darabiha *et al.* [4] pour des calculs en chimie complexe). L'étude numérique de ces flammes est basée sur la résolution des équations classiques de la mécanique des fluides associées à un mécanisme chimique de combustion. L'évolution des ordinateurs et des progrès accomplis en algorithmique ont permis de prendre en compte de façon détaillée les propriétés de transport, les grandeurs thermodynamiques et des cinétiques complexes. Parallèlement, grâce aux résultats obtenus dans la description des mécanismes élémentaires de combustion des hydrocarbures, des schémas cinétiques de plus en plus détaillés contenant des dizaines d'espèces et des centaines de réactions ont pu être utilisés dans ces calculs.

Les résultats obtenus sont évidemment d'une grande précision et permettent d'analyser finement la structure des flammes. Cependant, ces études nécessitent des calculs très longs et entraînent donc des coûts élevés. Dans les applications industrielles notamment, une connaissance aussi fine du comportement des flammes n'est pas nécessaire, d'autant plus que les modèles de combustion turbulente ne sont pas toujours capables de traduire les phénomènes physiques avec un niveau de précision équivalent.

Le temps nécessaire au calcul d'une flamme laminaire est typiquement proportionnel au carré du nombre d'espèces intervenant dans le schéma réactionnel. Pour cette raison de nombreux efforts ont été déployés afin d'établir des mécanismes cinétiques mettant en jeu moins d'espèces et un nombre de réactions plus réduit mais capables cependant de traduire la réalité physique avec une précision raisonnable. De tels mécanismes sont présentés par exemple par Coffee *et al.* [3], Westbrook *et al.* [21], Reitz *et al.* [18], Duterque *et al.* [6], Hautman *et al.* [9] et Kiehn *et al.* [10]. Les méthodes utilisées par ces divers auteurs sont essentiellement empiriques.

Peters *et al.* [16,17] ont proposé plus récemment une méthode de réduction systématique particulièrement élégante basée sur l'hypothèse de quasi-stationnarité de certaines espèces intermédiaires. Les résultats obtenus par cette approche pour la combustion du méthane et du méthanol sont très intéressants. La méthode a aussi été appliquée à la combustion air-propane mais ce cas n'a pas été étudié extensivement. La démarche proposée par Peters est explorée ici afin d'établir un schéma réactionnel à 9 espèces et 6 réactions pour des flammes air-propane. Ce schéma réduit est appliqué au calcul de flammes laminaires à point d'arrêt. Cette configuration permet d'analyser le mécanisme d'extinction par étirement. On peut aussi comparer le comportement de flammes décrites par des schémas complet et réduit et voir si l'extinction est correctement représentée par le schéma réduit.

Les détails de la réduction sont présentés à la section 2. La modélisation et le traitement numérique des flammes laminaires sont décrits à la section 3. Enfin, les résultats numériques obtenus avec le schéma réduit sont comparés dans la section 4 aux calculs effectués avec une cinétique complexe.

2. Application de la réduction systématique de schémas cinétiques à la combustion du propane.

Dans cette partie nous décrivons brièvement la méthode de réduction systématique de schémas cinétiques. Les détails de cette méthode sont présentés en particulier dans les publications de Peters *et al.* [16,17].

2.1 FORMULATION GÉNÉRALE. — Soit un problème stationnaire d'écoulement réactif associé à un mécanisme chimique à K espèces et I réactions. Les équations de conservation des espèces s'écrivent :

$$L \left(\frac{Y_k}{M_k} \right) = \sum_{i=1}^I v_{ki} w_i \quad k = 1, \dots, K \quad (1)$$

où Y_k est la fraction massique de l'espèce k , M_k la masse molaire de l'espèce k , v_{ki} le coefficient stoechiométrique de l'espèce k dans la réaction i et w_i la vitesse molaire de la réaction i . Enfin, $L(Y_k/M_k)$ est un opérateur convectif-diffusif que nous expliciterons au paragraphe 3 pour une flamme laminaire étirée au voisinage d'un point d'arrêt.

2.1.1 Hypothèse de quasi-stationnarité. — Une espèce k_{qs} sera considérée comme quasi-stationnaire si sa vitesse de réaction est négligeable devant celle des autres espèces. Pour cette espèce, on peut écrire :

$$L \left(\frac{Y_{k_{qs}}}{M_{k_{qs}}} \right) = \sum_{i=1}^I v_{k_{qs},i} w_i = 0 \quad (2)$$

2.1.2 Equations du schéma réduit. — Si parmi les K espèces du mécanisme considéré, K_q sont quasi-stationnaires, le système différentiel (1) peut être remplacé par le système algèbre-différentiel :

$$L \left(\frac{Y_k}{M_k} \right) = \sum_{i=1}^I v_{ki} w_i \quad k = 1, \dots, (K - K_q) \quad (3)$$

$$\sum_{i=1}^I v_{ki} w_i = 0 \quad k = (K - K_q + 1), \dots, K \quad (4)$$

2.1.3 Représentation stoechiométrique du schéma réduit. — Les équations (4) permettent d'éliminer I_q vitesses de réaction dans l'équation (3). Il est à noter que I_q est inférieur ou égal au nombre K_q d'espèces quasi-stationnaires.

Le sous-système différentiel (3) peut donc être exprimé en fonction de $I - I_q$ vitesse de réaction

$$L \left(\frac{Y_k}{M_k} \right) = \sum_{i=1}^{I-I_q} v'_{ki} w_i \quad k = 1, \dots, (K - K_q) \quad (5)$$

Considérons à présent la matrice $M(K - K_q, I - I_q)$ dont les coefficients sont $M(k, i) = v'_{ki}$. Si I_s désigne le rang de cette matrice, il est possible de trouver I_s combinaisons linéaires indépendantes des vitesses de réaction w_i

$$\bar{\omega}_I = \sum_{i=1}^{I-I_q} \alpha_{Ii} w_i \quad I = 1, \dots, I_s$$

telles que le système d'équations (3) puisse être remplacée par

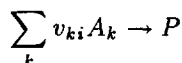
$$L \left(\frac{Y_k}{M_k} \right) = \sum_{I=1}^{Is} v''_{kI} \bar{\omega}_I \quad k = 1, \dots, (K - K_q) \quad (6)$$

La matrice des coefficients v''_{kI} est cette fois injective.

Le système (6) représente alors les relations de conservation des espèces associées à un mécanisme à $K - K_q$ espèces et Is réactions dont les vitesses sont données par les $\bar{\omega}_I$. La représentation stoechiométrique de ces réactions est fournie par les coefficients v''_{ki} .

La dernière étape de la réduction consiste maintenant à exprimer les $\bar{\omega}_I$ (ou les vitesses de réaction élémentaire w_i) en fonction des $K - K_q$ espèces principales (non quasi-stationnaires).

Pour une réaction élémentaire



où les A_k représentent les réactifs et P les produits, la vitesse peut être exprimée par la formule d'Arrhénius :

$$w_i = C \prod_k [A_k]^{v_{ki}}$$

où $[A_k]$ est la concentration molaire de l'espèce k et C est la constante de la réaction donnée par

$$C = AT^\beta \exp(-E/RT)$$

Dans cette dernière expression, R désigne la constante universelle des gaz parfaits, A est la constante pré-exponentielle, β est l'exposant de la température et E est l'énergie d'activation.

Si l'on substitue ces expressions de w_i dans le système algébrique (4), les concentrations des K_q espèces quasi-stationnaires peuvent s'exprimer en fonction des $K - K_q$ espèces principales. En effet, le système (4) devient alors un système polynomial à K_q équations. Sous certaines conditions, en particulier lorsque le schéma élémentaire initial n'est pas trop complexe, ce système peut être inversé analytiquement. Ainsi on obtient les expressions des concentrations des espèces quasi-stationnaires en fonction des $K - K_q$ espèces principales. Ces expressions peuvent alors être utilisées pour le calcul des vitesses de réaction $\bar{\omega}_I$ qui deviendront des fonctions explicites des concentrations des espèces principales, de la température et des constantes d'Arrhenius des vitesses de réactions élémentaires.

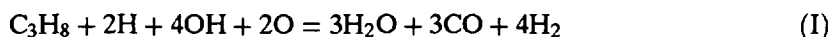
Dans la section suivante, nous appliquerons la réduction systématique de schémas cinétiques à la combustion du propane. Une analyse systématique des différentes étapes de réduction dans le cas du propane est effectuée par ailleurs [5].

2.2 APPLICATION A LA COMBUSTION DU PROPANE. — Pour étudier la combustion du propane, nous disposons d'un mécanisme élémentaire (noté désormais CM) à 31 espèces et 123 réactions dû à Warnatz [20]. Ce mécanisme est déjà utilisé pour des calculs de flammes laminaires étirées par Darabiha *et al.* [4] et Giovangigli *et al.* [7] [8]. Les résultats obtenus avec ce mécanisme seront pris comme référence auxquelles nous comparerons les résultats du schéma réduit. Il ne s'agit évidemment pas ici de validation de mécanismes cinétiques par rapport à des données expérimentales (qui sont d'ailleurs rares pour la configuration étudiée) mais de comparaison entre différents mécanismes. Cependant, l'application de la réduction systématique au mécanisme CM aboutit à des expressions trop complexes des vitesses de réaction. Une simplification préalable basée sur des calculs de sensibilité ou d'ordre de grandeur des vitesses de réaction est nécessaire.

Le schéma semi-détaillé que nous proposons (noté désormais ASM) contient 29 espèces et 69 réactions (Tab. I). Mises à part les réactions 65 à 69 qui sont ajoutées afin de mieux représenter les équilibres H_2/O_2 et CO/CO_2 , ce mécanisme est semblable à celui proposé par Paczko *et al.* [14].

Par ailleurs, nous supposons que toutes les espèces sauf C_3H_8 , H , H_2O , O_2 , CO , H_2 , N_2 , CO_2 , OH et O sont quasi-stationnaires. Paczko *et al.* [14] classent également OH et O parmi les espèces quasi-stationnaires et utilisent des relations de quasi-stationnarité tronquées pour déterminer leurs concentrations mais nos calculs indiquent que ces hypothèses peuvent entraîner des erreurs importantes.

Finalement, le schéma (ARM) auquel nous aboutissons, en partant du schéma (ASM) et en suivant la démarche décrite au paragraphe précédent peut être représenté par les équations suivantes [5] :



Les vitesses de réaction correspondantes peuvent être obtenues par la résolution du système linéaire des relations de quasi-stationnarité en suivant la démarche décrite plus haut :

$$\bar{w}_I = w_{51} + w_{52} + w_{53} + w_{54} - w_{55} - w_{56}$$

$$\bar{w}_{II} = w_{10} + w_{40} + w_{68} + w_{69}$$

$$\begin{aligned} \bar{w}_{III} = & w_6 + w_7 + w_8 + w_9 + w_{14} + w_{16} - w_{21} - w_{22} + w_{27} - w_{36} - w_{38} - 2w_{39} - w_{40} \\ & - w_{41} - w_{51} - w_{52} - w_{53} - w_{54} + 2w_{55} + 2w_{56} + w_{57} \\ & + w_{65} + w_{66} + w_{67} + w_{68} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \bar{w}_{IV} = & w_3 + w_4 + w_8 + w_9 + w_{12} + w_{18} + w_{20} - w_{24} + w_{27} + 2w_{31} + 2w_{32} + 2w_{36} + w_{37} \\ & + 2w_{38} + 2w_{39} + w_{47} + w_{49} - 2w_{51} - w_{52} - 2w_{53} - w_{54} + 2w_{55} + 2w_{56} - 2w_{57} \\ & - w_{63} + w_{66} \end{aligned}$$

$$\bar{w}_V = w_1 + w_6 + w_8 + w_{31} - w_{35} + w_{38} + w_{39} + w_{40} + w_{41} + w_{43} - w_{67} + w_{69}$$

$$\begin{aligned} \bar{w}_{VI} = & w_2 - w_4 + w_6 - w_{14} - w_{15} - w_{31} - w_{32} + w_{33} + w_{35} - w_{36} - 2w_{38} - w_{39} + w_{40} \\ & + w_{41} - w_{46} - w_{47} + w_{57} + w_{67} + w_{68} \end{aligned}$$

Dans ces expressions les indices correspondent aux réactions du tableau I.

Les concentrations des espèces quasi-stationnaires nécessaires au calcul des vitesses de réaction sont données par :

$$[n - C_3H_7] = (w_{51} + w_{52}) / (k_{55}[H] + k_{57} + k_{58} + k_{59}[O_2])$$

$$[i - C_3H_7] = (w_{53} + w_{54}) / (k_{56}[H] + k_{60} + k_{61}[O_2])$$

$$Z_{33} = k_{33}[H] / (k_{33}[H] + k_{34}[OH])$$

$$Z_{27} = k_{27}[H] / (k_{26} + k_{27}[H] + k_{28}[O_2])$$

$$Z_{44} = k_{44}[O_2] / (k_{44}[O_2] + k_{45}[H_2])$$

$$Z_{30b} = k_{30b}[H] / (k_{30b}[H] + (k_{35} + k_{36})[O] + k_{37}[OH]Z_{44})$$

$$Z_{32} = k_{32}[O] / (k_{30f}(1 - Z_{30b}) + k_{31}[O_2] + k_{32}[O])$$

$$\text{NCH}_3 = 2k_{23}(1 - Z_{27})(1 - Z_{32}Z_{33}/2)$$

$$[\text{CH}_3] = \sqrt{\frac{b'^2}{4} + c'} - \frac{b'}{2}$$

$$\begin{aligned} \text{où } b' &= (k_{13}[\text{O}] + (k_{14} + k_{15} + k_{16})[\text{OH}] + k_{46}[\text{H}]) / \text{NCH}_3 \\ c' &= (w_{57} + 2w_{58} + 2w_{59} + 2w_{60} + 2w_{61}) / \text{NCH}_3 \end{aligned}$$

$$[\text{C}_2\text{H}_5] = w_{23} / (k_{26} + k_{27}[\text{H}] + k_{28}[\text{O}_2])$$

$$[\text{C}_2\text{H}_3] = (w_{26} + w_{28} + w_{57}) / (k_{30f}(1 - Z_{30b}) + k_{31}[\text{O}_2] + k_{32}[\text{O}])$$

$$[\text{C}_2\text{H}_2] = w_{30f} / (k_{30b}[\text{H}] + (k_{35} + k_{36})[\text{O}] + Z_{44}k_{37}[\text{OH}])$$

$$[\text{C}_2\text{H}] = w_{37} / (k_{44}[\text{O}_2] + k_{45}[\text{H}_2])$$

$$[\text{CH}_2\text{CO}] = w_{32} / (k_{33}[\text{H}] + k_{34}[\text{OH}])$$

$$[\text{C}_2\text{HO}] = (w_{35} + w_{44}) / (k_{38}[\text{H}] + k_{39}[\text{O}])$$

$$Z_{42b} = k_{42b}[\text{H}_2] / (k_{42b}[\text{H}_2] + k_{43}[\text{O}_2] + k_{50}[\text{OH}])$$

$$\text{NCH}_2 = (k_{40} + k_{41})[\text{O}_2] + k_{42f}[\text{H}](1 - Z_{42b}) + k_{48}[\text{OH}] + k_{49}[\text{OH}](1 - Z_{42b})$$

$$[\text{CH}_2] = (w_{36} + w_{38} + w_{46} + w_{47}) / \text{NCH}_2$$

$$[\text{CH}] = (w_{42f} + w_{49}) / (k_{42b}[\text{H}_2] + k_{43}[\text{O}_2] + k_{50}[\text{OH}])$$

$$\text{NCHO} = k_{19}[\text{H}] + k_{20}[\text{OH}] + k_{21}[\text{O}_2] + k_{22}[M']$$

$$[\text{CHO}] = (w_{13} + w_{14} + w_{15} + 2w_{31} + 2w_{34} + w_{43} + w_{48} + w_{50}) / \text{NCHO}$$

$$[\text{HO}_2] = (w_5 + w_{21} + w_{28} + w_{59} + w_{61}) / ((k_6 + k_7 + k_8)[\text{H}] + k_9[\text{OH}])$$

$$[\text{CH}_4] = (w_{16} + w_{11b}) / (k_{11f}[\text{H}] + k_{12}[\text{OH}])$$

$$[\text{CH}_2\text{O}] = (w_{13} + w_{14} + w_{15} + w_{31} + w_{34} + w_{48}) / (k_{17}[\text{H}] + k_{18}[\text{OH}])$$

$$[\text{C}_2\text{H}_6] = w_{23} / (k_{24}[\text{H}] + k_{25}[\text{OH}])$$

$$[\text{CH}_3\text{CO}] = (w_{58} + w_{59} + w_{60} + w_{61}) / (k_{63}[\text{H}] + k_{64}[\text{OH}])$$

Dans les expressions précédentes les indices "f" et "b" sont respectivement relatifs aux réactions directe et inverse. Les expressions précédentes déterminent complètement les vitesses de réactions $\bar{\omega}_I$ à $\bar{\omega}_{VI}$.

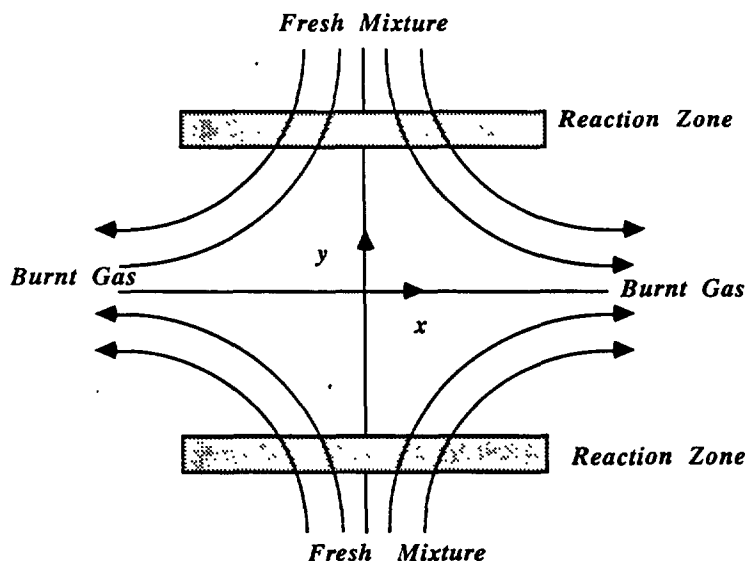


Fig. 1. — Configuration de la flamme.
[Flame configuration.]

3. Modélisation et traitement numérique d'une flamme laminaire étirée.

La configuration étudiée est celle d'une double flamme symétrique à point d'arrêt formée par deux écoulements à contre-courant de gaz frais (cf Fig.1).

Les gaz frais sont constitués d'un mélange d'air et de propane à la température $T_f = 300$ K. La géométrie est bidimensionnelle (infinie suivant le troisième axe). Une démarche classique pour l'étude de ce type de flammes (voir par exemple [7]) consiste à chercher a priori des solutions similaires. Dans ce cas, les équations de conservation de la masse, de la quantité de mouvement, des espèces, de l'énergie et l'équation d'état s'écrivent respectivement :

$$\frac{dV}{dy} + \varepsilon_s \rho f' = 0 \quad (7)$$

$$\frac{d\left(\mu \frac{df'}{dy}\right)}{dy} - V \frac{df'}{dy} + \varepsilon_s (\rho_0 - \rho(f')^2) = 0 \quad (8)$$

$$-\frac{d(\rho Y_k V_{ky})}{dy} - V \frac{dY_k}{dy} + w_k M_k = 0 \quad k = 1, \dots, K \quad (9)$$

$$\frac{d\left(\lambda \frac{dT}{dy}\right)}{dy} - C_p V \frac{dT}{dy} - \sum_{k=1}^K \rho Y_k V_{ky} C_{pk} \frac{dT}{dy} - \sum_{k=1}^K w_k M_k h_k = 0 \quad (10)$$

$$p = \frac{\rho RT}{M} \quad (11)$$

Dans ces équations $f(y)$ est une fonction de courant modifiée

$$f' = u(x, y)/u(x, \infty)$$

où u est la composante de vitesse suivant x ; V est défini par :

$$V = \rho \nu$$

où ρ est la masse volumique et ν la composante de la vitesse suivant y ; ρ_0 est la densité des gaz frais ; ε_s est le taux d'étirement tel que :

$$u(x, \infty) = \varepsilon_s x.$$

Les variables p , T , Y_k sont respectivement la pression, la température et la fraction massique de l'espèce k ; μ , λ , C_p , C_{pk} , M , M_k représentent la viscosité, la conductivité thermique, la chaleur massique à pression constante du mélange, la chaleur massique à pression constante de l'espèce k , la masse molaire du mélange et la masse molaire de l'espèce k . Enfin V_{ky} est la vitesse de diffusion de l'espèce k dans la direction y , w_k est le taux de production molaire de l'espèce k et h_k est l'enthalpie massique de l'espèce k .

Les conditions aux limites s'écrivent :

$$\begin{aligned} T(\infty) &= T_f ; & f'(\infty) &= 1 ; & Y_k(\infty) &= Y_{k0} & k &= 1, \dots, K \\ dT/dy(0) &= 0 ; & df'/dy(0) &= 0 ; & dY_k/dy(0) &= 0 & k &= 1, \dots, K \\ V(0) &= 0. \end{aligned}$$

La résolution du système (7) à (11) utilise une méthode développée par Giovangigli et Smooke [8] et combinant des techniques de continuation, des itérations de Newton et des grilles adaptatives.

Le système (7) à (11) est d'abord discrétisé en remplaçant les opérateurs différentiels par des différences finies. Le problème consiste alors à résoudre un système $F(\mathbf{U}, \alpha) = 0$ où $\mathbf{U}$ représente la solution discrétisée sur une grille M et α est un paramètre (dans notre cas le taux d'étirement ou la richesse des gaz frais). Suivant les procédures classiques de continuation, les branches de solution $[\mathbf{U}(\alpha), \alpha]$ sont reparamétrisées en $[\mathbf{U}(s), \alpha(s)]$ où s est une approximation de l'abscisse curviligne de l'arc des solutions $[\mathbf{U}, \alpha]$ dans un espace de phase adéquat. On introduit ainsi une nouvelle inconnue $\mathbf{Y} = [\mathbf{Y}, \alpha]$ qui est solution d'un système d'équations

$$\begin{aligned} F(\mathbf{U}, \alpha) &= 0 \\ N(\mathbf{U}, \alpha, s) &= 0 \end{aligned}$$

Un choix convenable de l'équation de normalisation N permet ainsi d'éviter les singularités de la matrice jacobienne aux points de retournement [7,8]. On peut ainsi calculer complètement la réponse d'une flamme en fonction de l'étirement ou de la richesse et déterminer les conditions correspondant à l'extinction.

4. Résultats numériques.

Dans cette partie nous présentons les résultats de calculs pour la configuration représentée (Fig.1). Les figures 2a et 2b représentent les profils de température d'une flamme symétrique

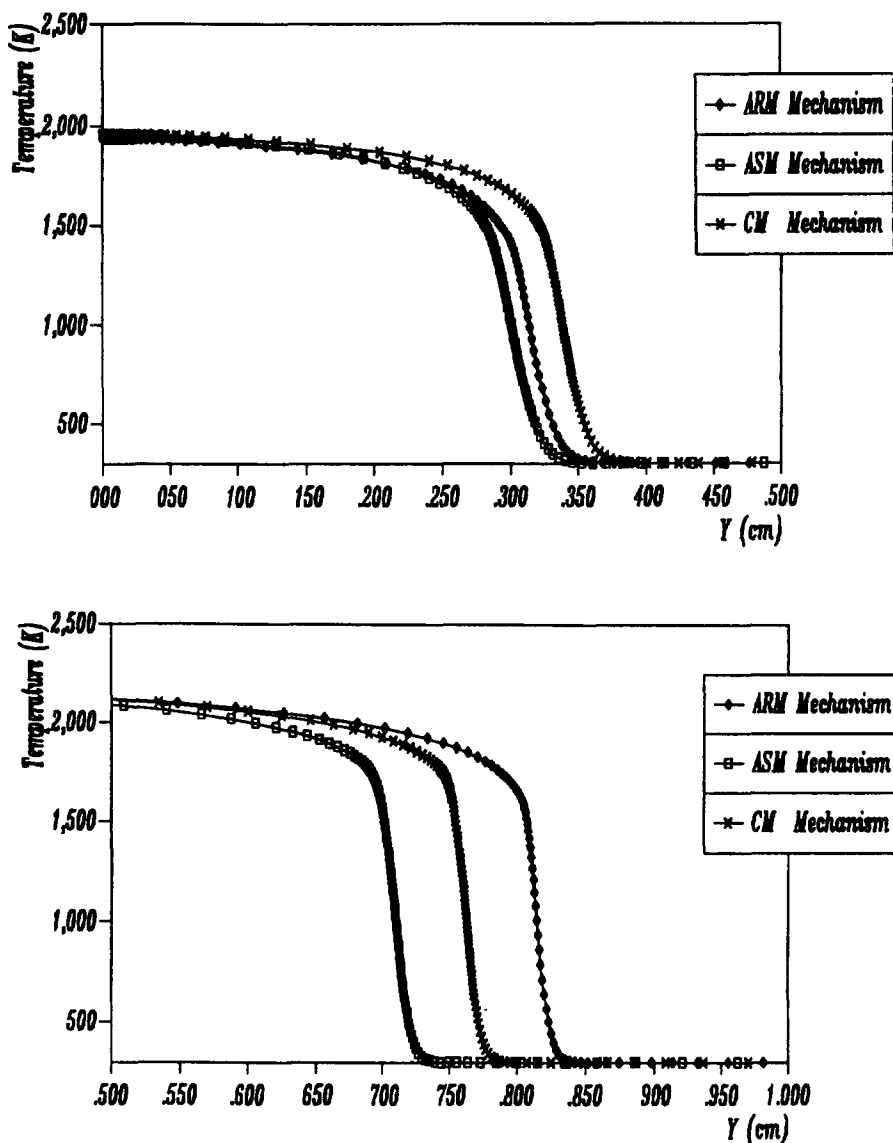


Fig. 2. — Profils de température en chimie complexe (CM et ASM) et réduite (ARM), $p = 1 \text{ atm}$, $\epsilon_s = 310 \text{ 1/s}$, (a) $\Phi = 0,75$ (b) $\Phi = 1,1$.
[Temperature profiles with complex (CM and ASM) and reduced (ARM) mechanisms].

à la pression atmosphérique, un étirement $\epsilon_s = 310 \text{ 1/s}$ et pour tous les mécanismes précités, respectivement à une richesse de 0,75 et une richesse de 1,1.

On constate d'abord que les allures des courbes sont les mêmes pour les différents mécanismes. Il apparaît cependant des différences en ce qui concerne les positions de la flamme. A la richesse de 0,75 (Fig. 2a), la simplification préliminaire qui permet de passer du mécanisme détaillé CM au mécanisme semi-détaillé ASM a pour effet de rapprocher le front de flamme du point de stagnation, alors que la réduction systématique proprement dite de ASM en ARM a un effet con-

traire. Les mêmes observations peuvent être faites pour la flamme à une richesse de 1,1 (Fig. 2b). Ces résultats montrent que les opérations de simplification préliminaire et de réduction systématique modifient les temps caractéristiques chimiques des mécanismes cinétiques. Dans les deux cas considérés précédemment (Fig. 2a et 2b), la simplification préliminaire augmente ce temps caractéristique, alors que la réduction systématique le diminue.

Afin de déterminer la précision et les limites de validité du mécanisme réduit ARM que nous proposons, nous allons maintenant comparer les résultats obtenus avec ce mécanisme avec ceux obtenus avec un mécanisme a priori fiable, i.e. le schéma complexe CM. Les profils de température correspondant sont représentés sur la figure 3 dans le cas d'une flamme symétrique à la pression atmosphérique et pour un étirement $\varepsilon_s = 310$ 1/s à différentes richesses. Les calculs sont effectués en chimie complexe (CM) et réduite (ARM). Il apparaît clairement que les deux mécanismes donnent des résultats semblables. Le profil de température calculé par le schéma réduit est cependant légèrement déplacé vers le point d'arrêt pour $\Phi = 0,65$ et $0,75$, alors que les deux courbes sont pratiquement confondues à $\Phi = 0,95$. Les figures 4a et 4b montrent les profils de fraction massique des espèces minoritaires, autrement dit les espèces les plus sensibles à la cinétique, obtenue respectivement à l'aide de la cinétique complexe et de la cinétique réduite dans les conditions suivantes : $p = 1$ atm, $\varepsilon_s = 310$ 1/s et $\Phi = 0,75$. On peut remarquer l'excellent accord entre les deux résultats bien qu'une différence existe pour la détermination de la position de flamme à ce régime (cf. Fig. 3).

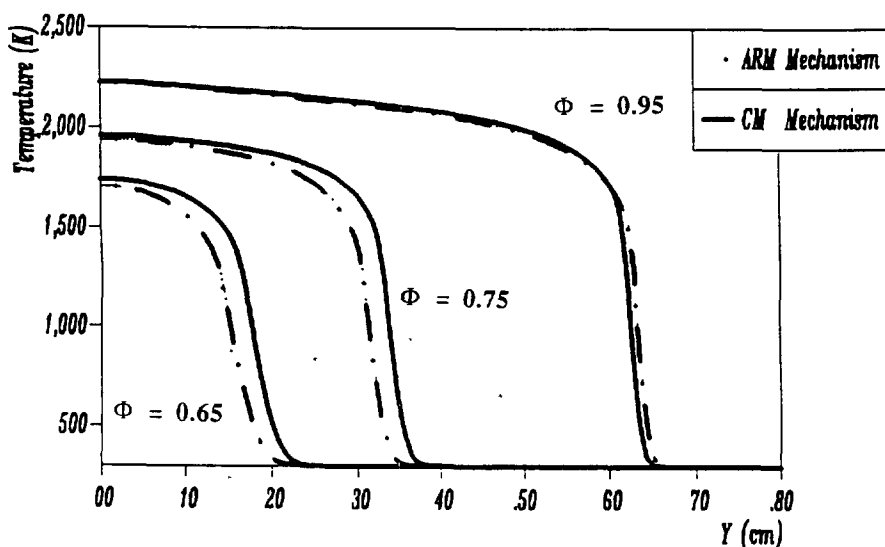


Fig. 3. — Profils de température en chimie complexe et réduite, $p = 1$ atm, $\varepsilon_s = 310$ 1/s.
[Temperature profiles with complex and reduced mechanisms.]

Pour étudier l'influence du taux d'étirement sur la flamme, nous avons tracé sur les figures 5a et 5b respectivement la température au point d'arrêt et la position de la flamme en fonction du taux d'étirement. Nous avons adopté ici comme définition de la position de flamme le point de l'espace où le gradient de température est maximum. Ces calculs correspondent à une flamme à la pression atmosphérique et à une richesse $\Phi = 0,75$. On voit que les courbes correspondant aux calculs en

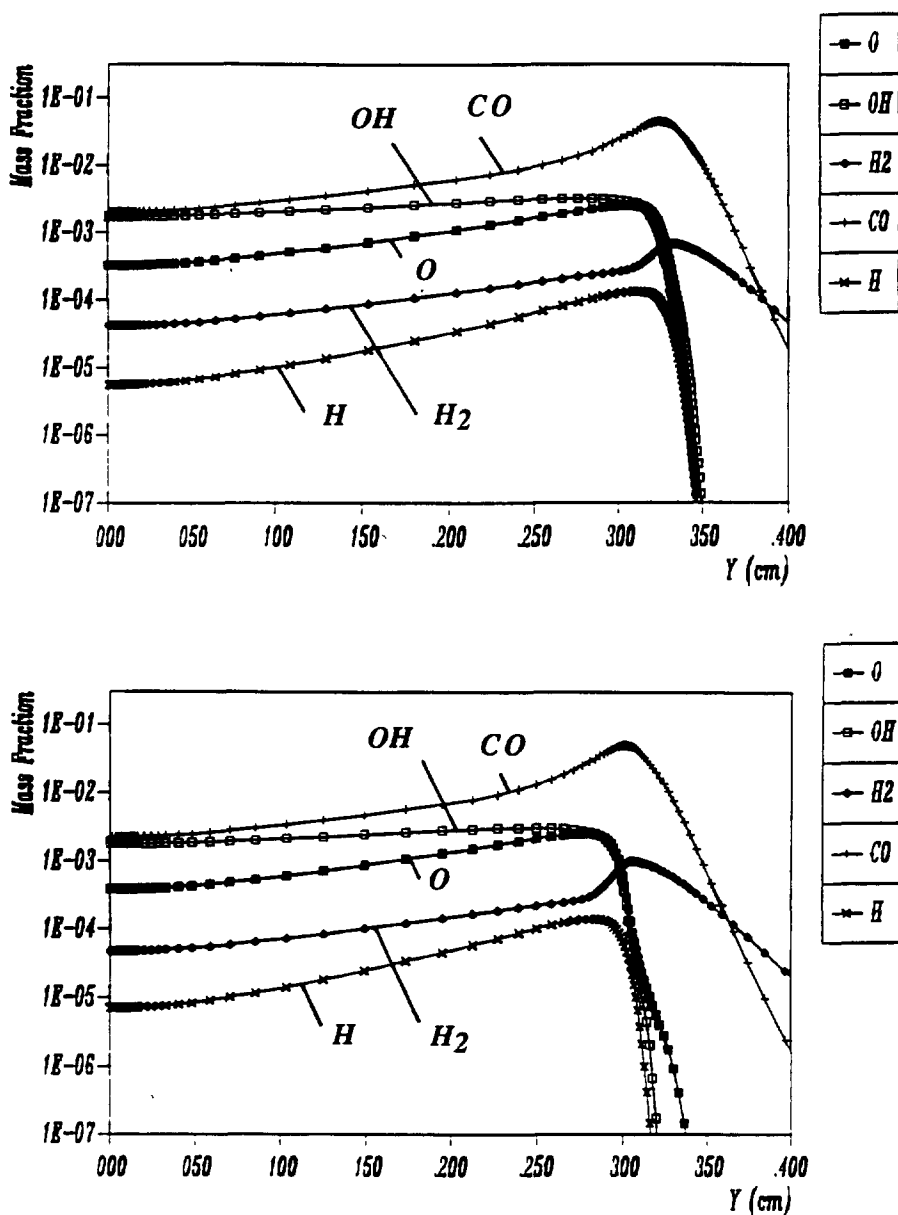


Fig. 4. — Profils des fractions massiques des espèces minoritaires, $p = 1 \text{ atm}$, $\varepsilon_s = 310 \text{ l/s}$, $\Phi = 0,75$, (a) Mécanisme complexe (b) Mécanisme réduit.

[Mass fraction profiles of minor species (a) Complex mechanism (b) Reduced mechanism.]

chimie complexe et réduite sont d'allures très voisines. L'extinction de la flamme par étirement, représentée par le point de retournement, est en particulier bien retrouvée par le schéma réduit. L'erreur relative commise sur la valeur du taux d'étirement à l'extinction ne dépasse pas 6%.

Nous avons vu sur la figure 3 que, pour $\Phi = 0,75$, la chimie réduite reproduisait un front de flamme plus proche du point d'arrêt que la flamme calculée par le mécanisme élémentaire. Il n'est

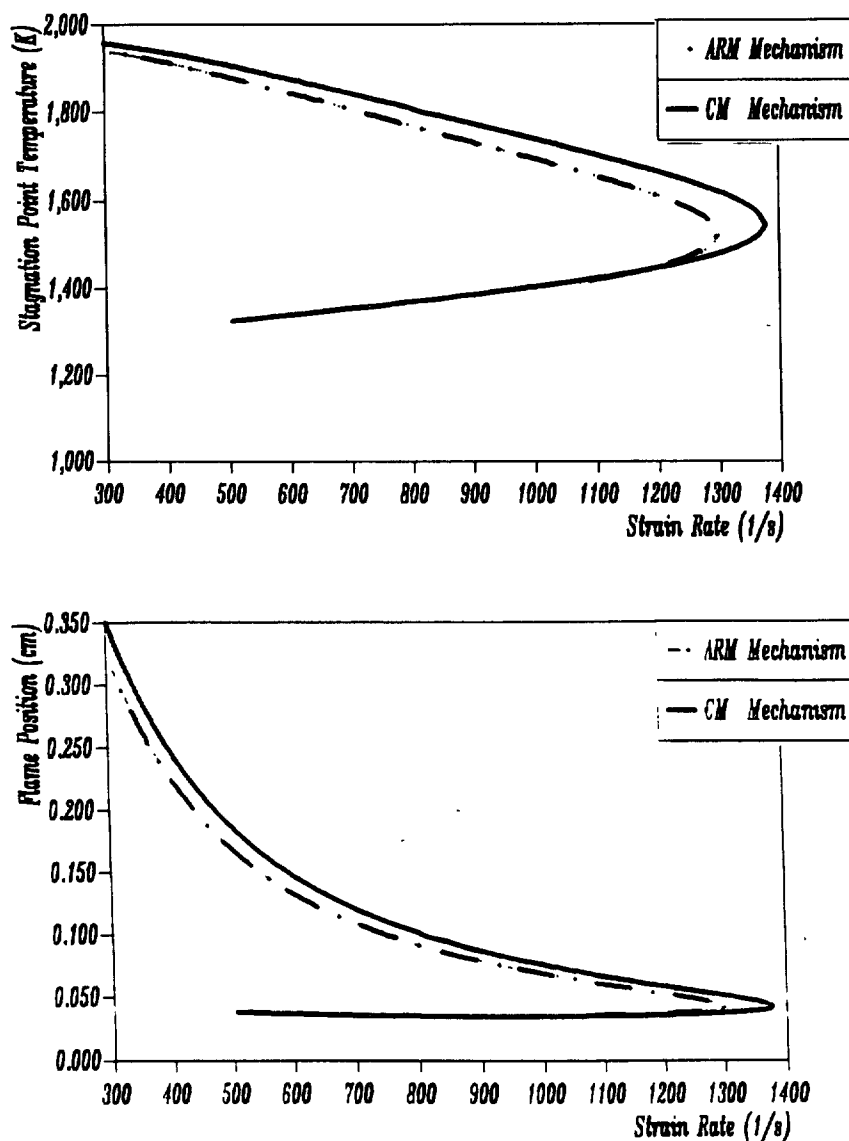


Fig. 5. — Calculs de continuation en chimie complexe et réduite, $p = 1$ atm, $\Phi = 0,75$, (a) Température au point de stagnation en fonction du taux d'étirement (b) Position de la flamme en fonction du taux d'étirement.

[Continuation calculations with complex and reduced mechanism (a) Stagnation point temperature versus strain rate (b) Flame position versus strain rate.]

donc pas étonnant de trouver une valeur du taux d'étirement à l'extinction plus faible en chimie réduite. En effet, comme l'ont déjà remarqué d'autres auteurs (cf. par exemple Rogg[19]), l'extinction de la flamme se produit lorsque le front de flamme arrive à une distance critique du point

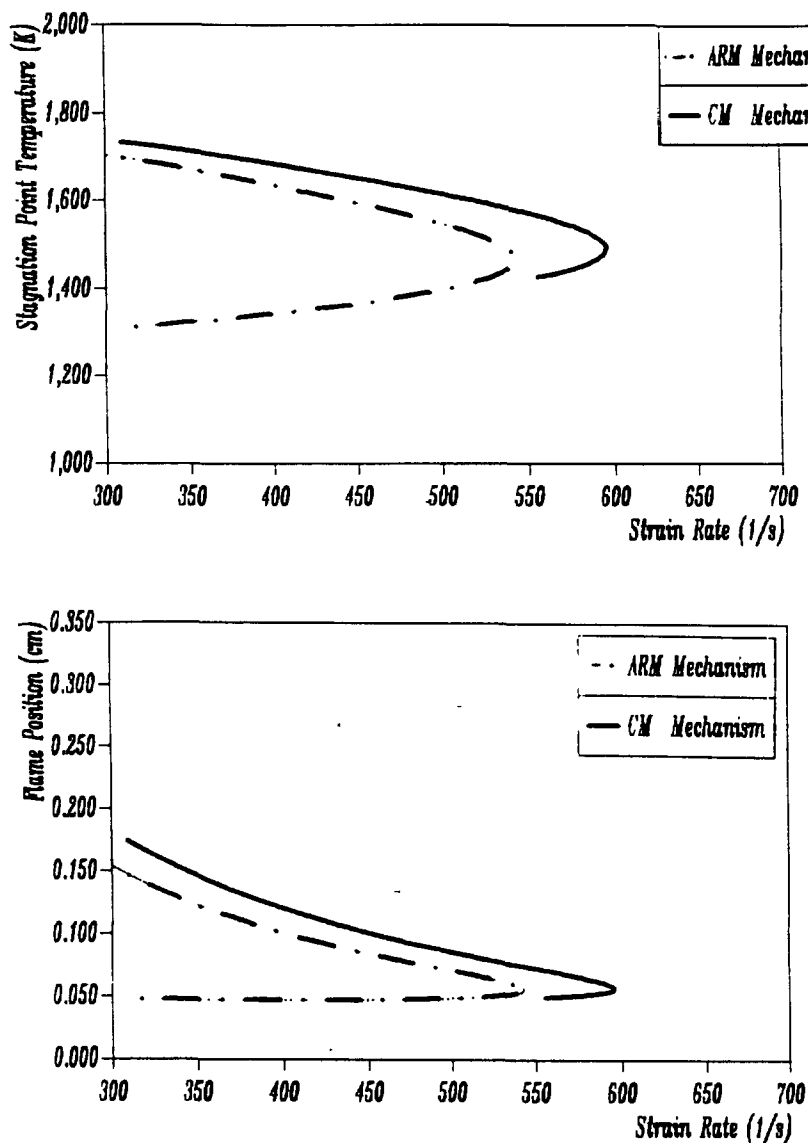


Fig. 6. — Calculs de continuation en chimie complexe et réduite, $p = 1 \text{ atm}$, $\Phi = 0,65$, (a) Température au point de stagnation en fonction du taux d'étirement (b) Position de la flamme en fonction du taux d'étirement.

[Continuation calculations with complex and reduced mechanism (a) Stagnation point temperature *versus* strain rate (b) Flame position *versus* strain rate.]

d'arrêt. D'après la figure 5b, cette distance critique est indépendante de la chimie considérée.

Les figures 6a et 6b représentent respectivement la température au point de stagnation et la distance de flamme en fonction du taux d'étirement pour une richesse de $\Phi = 0,65$ ($\varepsilon_s = 310 \text{ 1/s}$).

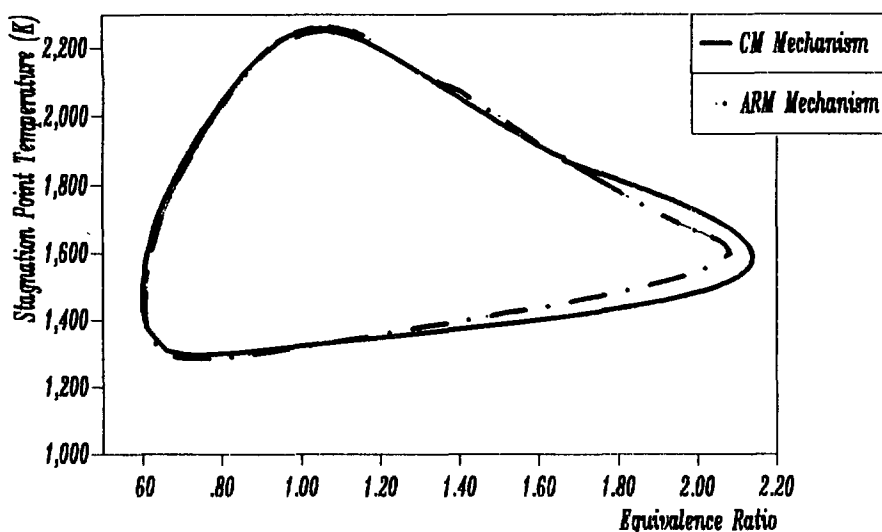


Fig. 7. — Calculs de continuation en chimie complexe et réduite. Température au point de stagnation en fonction de la richesse, $p = 1$ atm, $\varepsilon_s = 310$ 1/s.
[Continuation calculations with complex and reduced mechanism. Stagnation point temperature *versus* equivalence ratio.]

Pour ce régime, l'erreur relative commise sur les valeurs du taux d'étirement à l'extinction est plus importante que pour $\Phi = 0,75$.

Enfin, la figure 7 donne l'évolution de la température du point d'arrêt en fonction de la richesse des gaz frais dans les conditions suivantes : $p = 1$ atm et $\varepsilon_s = 310$ 1/s. On constate que les extinctions pauvre et riche sont correctement retrouvées par le schéma réduit. Une différence apparaît cependant pour les mélanges très riches ($\Phi > 1,7$). Pour ces régimes, les hydrocarbures intermédiaires sont présents en quantité non négligeables et l'hypothèse de quasi-stationnarité pour ces espèces est moins valable.

5. Conclusion.

La méthode de réduction systématique de schémas cinétiques proposée par Peters a été appliquée à la combustion du propane. Un schéma réduit à 9 espèces et 6 réactions a été établi. Ce schéma se distingue de celui donné par Paczko *et al.* par l'introduction d'espèces principales supplémentaires (OH et O) et par une prise en considération plus complète des réactions d'équilibre H_2/O_2 et CO/CO_2 .

Ce schéma réduit est utilisé pour des calculs d'une flamme laminaire étirée à la pression atmosphérique. Les résultats sont généralement très satisfaisants. Les structures de flamme sont correctement reproduites et les caractéristiques principales telles que l'extinction sont convenablement représentées par ce mécanisme réduit.

En ce qui concerne les temps de calcul, on pouvait espérer obtenir un facteur de division proche de 10 en passant d'un schéma à 31 espèces à un schéma à 9 espèces. Néanmoins, comme les expressions des vitesses de réaction du schéma réduit ont des formes complexes, les possibilités de

vectorisation du programme de calcul sont diminuées et le gain en temps calcul est effectivement de l'ordre de 5, ce qui peut tout de même être considéré comme très satisfaisant.

Remerciements.

Cette étude a été réalisée dans le cadre de contrats avec la DRET et la SNECMA. Les calculs sont effectués sur le VP200 du Circe. Nous tenons à remercier le Professeur Norbert Peters pour ses nombreuses suggestions.

Bibliographie

- [1] BUCKMASTER J.D. and LUDFORD J.S., *Theory of Laminar Flames*, (Cambridge U. Press, Cambridge) 1982.
- [2] CANDEL S.M., DARABIHA N. and ESPOSITO E., Models for a Turbulent, Premixed Dump Combustor. AIAA paper 82-1261 (18th Joint Propulsion Conference, Cleveland) 1982.
- [3] COFFEE T.P., KOTLAR A.J. and MILLER M.S., The overall Reaction Concept in Premixed, Steady-State Flames. I. Stoichiometries *Comb. Flame* **54** (1983) 155-169.
- [4] DARABIHA N., GIOVANGIGLI V., CANDEL S.M. and SMOOKE M.D., Extinction of Strained Premixed Propane-Air Flames with Complex Chemistry, *Comb. Sci. Tech.* **60** (1988) 267-285.
- [5] DIAVDAN E., DARABIHA N., GIOVANGIGLI V. and CANDEL S.M., Strained Propane-air Flames with Detailed and Reduced Kinetic Schemes, *Accepted for Publication Comb. Sci. Tech.*, January 1990.
- [6] DUTERQUE J., BORCHI R. and TICHITSKY H., Study of Quasi-Global Schemes for Hydrocarbon Combustion, *Comb. Sci. Tech.* **26** (1981) 1-15.
- [7] GIOVANGIGLI V., Structure et Extinction de Flamme Laminaires Prémélangées, Thèse de Doctorat d'Etat, Université P. et M. Curie (1988).
- [8] GIOVANGIGLI V. and SMOOKE M.D., Extinction of strained Premixed Laminar Flames with Complex Chemistry, *Comb. Sci. Tech.* **53** (1987) 23-49.
- [9] HAUTMAN D.J., DRYER F.L., SCHUG K.P. and GLASSMAN I., A multiple-Step Overall Kinetic Mechanism for the oxidation of Hydrocarbons, *Comb. Sci. Tech.* **25** (1981) 219-235.
- [10] KIEHNE T.M., MATTHEWS R.D. and WILSON D.E., An Eight-Step Kinetics Mechanism for High Temperature Propane Flames, *Comb. Sci. Tech.* **54** (1987) 1-23.
- [11] LAW C.K., Dynamics of Stretched Flames, Twenty-second Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute, Pittsburgh (1988), pp. 1381-1402.
- [12] LIBBY P.A. and WILLIAMS F.A., Structure of Laminar Flamelets in Premixed Turbulent Flames. *Comb. Flame* **44** (1982) 287-303.
- [13] MARBLE F.E. and BROADWELL J.E., The Coherent Flame Model for Turbulent Chemical Reactions. Project Squid Technical Report (1977) Report TRW-9-PU.
- [14] PACZKO G., LEFDAL P.M. and PETERS N., Reduced Reaction Schemes for Methane, Methanol and Propane Flames, 21st Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute, Pittsburgh.
- [15] PETERS N., Laminar Diffusion Flamelets Models in non-Premixed Turbulent Combustion, *Prog. Eng. Comb. Sci.* **10** (1984) 319.
- [16] PETERS N., Numerical and Asymptotic Analysis of Systematically Reduced Reaction Schemes for Hydrocarbon Flames, Lecture Notes in Physics (1985) 90-109.
- [17] PETERS N. and KEE R.J., The Computation of Stretched Laminar Methane-Air Diffusion Flames Using a Reduced Four-Step Mechanism, *Comb. Flame* **68** (1987) 17-30.
- [18] REITZ R.D. and BRACCO F.V., Global kinetics Models and Lack of Thermodynamic Equilibrium, *Comb. Flame* **53** (1983) 141-143.
- [19] ROGG B., Response and Flamelet Structure of Stretched Premixed Methane-Air Flames. *Comb. Flame* **73** (1988) 45-65.
- [20] WARNATZ J., The Mechanism of High Temperature Combustion of Propane and Butane, *Comb. Sci. Tech.* **34** (1983) 144-200.

[21] WESTBROOK C.K. and DRYER F.L., Simplified Reaction Mechanisms for the Oxidation of Hydrocarbon Fuels in Flames, *Comb. Sci. Tech.* 27 (1981) 31-43.

Table 1. — Mécanisme réactionnel (ASM) pour la combustion du propane dans l'air. Constantes de réaction sous la forme: $k_f = AT^\beta \exp(-E/RT)$; unités: mol, cm, s, K et kJ/mol; coefficients du troisième corps M' : $\alpha(O_2) = 0,4$; $\alpha(N_2) = 0,4$, $\alpha(CO) = 0,75$, $\alpha(CO_2) = 1,5$; $\alpha(H_2O) = 6,5$, $\alpha(C_3H_8) = 3$.

REACTION	A	β	E
1. $O_2 + H \rightleftharpoons OH + O$	2.000E14	0.0	70.7
2. $H_2 + O \rightleftharpoons OH + H$	5.060E04	2.67	26.4
3. $H_2 + OH \rightleftharpoons H_2O + H$	1.000E08	1.6	13.9
4. $OH + OH \rightleftharpoons H_2O + O$	1.500E09	1.14	0.42
5. $H + O_2 + M' \rightarrow HO_2 + M'$	2.300E18	-0.8	0.
6. $HO_2 + H \rightarrow OH + OH$	1.500E14	0.0	4.20
7. $HO_2 + H \rightarrow H_2 + O_2$	2.500E13	0.0	2.90
8. $HO_2 + H \rightarrow H_2O + O$	3.000E13	0.0	7.23
9. $HO_2 + OH \rightarrow H_2O + O_2$	6.000E13	0.0	0.
10. $CO + OH \rightleftharpoons CO_2 + H$	4.400E06	1.5	-3.11
11. $CH_4 + H \rightleftharpoons H_2 + CH_3$	2.200E04	3.0	36.81
12. $CH_4 + OH \rightarrow H_2O + CH_3$	1.600E06	2.1	10.34
13. $CH_3 + O \rightarrow CH_2O + H$	7.000E13	0.0	0.
14. $CH_3 + OH \rightarrow CH_2O + H + H$	9.000E14	0.0	65.13
15. $CH_3 + OH \rightarrow CH_2O + H_2$	8.000E12	0.0	0.
16. $CH_3 + H \rightarrow CH_4$	1.900E36	-7.0	38.07
17. $CH_2O + H \rightarrow CHO + H_2$	2.500E13	0.0	16.81
18. $CH_2O + OH \rightarrow CHO + H_2O$	3.000E13	0.0	5.04
19. $CHO + H \rightarrow CO + H_2$	2.000E14	0.0	0.
20. $CHO + OH \rightarrow CO + H_2O$	1.000E14	0.0	0.
21. $CHO + O_2 \rightarrow CO + HO_2$	3.000E12	0.0	0.
22. $CHO + M' \rightarrow CO + H + M'$	7.100E14	0.0	70.67
23. $CH_3 + CH_3 \rightarrow C_2H_6$	7.470E52	11.9	80.63
24. $C_2H_6 + H \rightarrow H_2 + C_2H_5$	5.400E02	3.5	21.91
25. $C_2H_6 + OH \rightarrow H_2O + C_2H_5$	6.300E06	2.0	2.71
26. $C_2H_6 \rightarrow C_2H_4 + H_2$	1.300E19	-2.0	174.3
27. $C_2H_5 + H \rightarrow CH_3 + CH_3$	3.000E13	0.0	0.
28. $C_2H_5 + O_2 \rightarrow HO_2 + C_2H_4$	2.000E12	0.0	21.0
29. $C_2H_5 + OH \rightarrow C_2H_4 + H_2O$	3.000E13	0.0	12.6
30. $C_2H_5 \rightleftharpoons C_2H_3 + H$	1.600E32	-5.5	194.5
31. $C_2H_5 + O_2 \rightarrow CH_2O + CHO$	1.500E12	0.0	0.
32. $C_2H_5 + O \rightarrow CH_3CO + H$	3.000E13	0.0	0.
33. $CH_3CO + H \rightarrow CH_3 + CO$	7.000E12	0.0	12.6
34. $CH_3CO + OH \rightarrow CH_2O + CHO$	1.000E13	0.0	0.
35. $C_2H_2 + O \rightarrow C_2HO + H$	4.300E14	0.0	51.0
36. $C_2H_2 + O \rightarrow CH_2 + CO$	4.100E08	1.5	7.14
37. $C_2H_2 + OH \rightarrow H_2O + C_2H$	1.000E13	0.0	29.41
38. $C_2HO + H \rightarrow CH_3 + CO$	3.000E13	0.0	0.
39. $C_2HO + O \rightarrow CO + CO + H$	1.000E14	0.0	0.
40. $CH_2 + O_2 \rightarrow CO_2 + H + H$	6.500E12	0.0	6.30
41. $CH_2 + O_2 \rightarrow CO + OH + H$	6.500E12	0.0	6.30
42. $CH_2 + H \rightarrow CH + H_2$	4.000E13	0.0	0.
43. $CH + O_2 \rightarrow CHO + O$	3.000E13	0.0	0.
44. $C_2H + O_2 \rightarrow C_2HO + O$	5.000E13	0.0	6.30
45. $C_2H + H_2 \rightarrow C_2H_2 + H$	1.100E13	0.0	12.06
46. $CH_3 + H \rightarrow CH_2 + H_2$	1.800E14	0.0	63.32
47. $CH_3 + OH \rightarrow CH_2 + H_2O$	1.500E13	0.0	21.0
48. $CH_2 + OH \rightarrow CH_2O + H$	2.500E13	0.0	0.
49. $CH_2 + OH \rightarrow CH + H_2O$	4.500E13	0.0	12.60
50. $CH + OH \rightarrow CHO + H$	3.000E13	0.0	0.
51. $C_3H_8 + H \rightarrow N \cdot C_3H_7 + H_2$	1.300E14	0.0	40.80
52. $C_3H_8 + OH \rightarrow N \cdot C_3H_7 + H_2O$	6.300E06	2.0	2.71
53. $C_3H_8 + H \rightarrow I \cdot C_3H_7 + H_2$	1.000E14	0.0	35.08
54. $C_3H_8 + OH \rightarrow I \cdot C_3H_7 + H_2O$	1.200E08	1.46	0.798
55. $N \cdot C_3H_7 + H \rightarrow C_3H_8$	2.000E13	0.0	0.
56. $I \cdot C_3H_7 + H \rightarrow C_3H_8$	2.000E13	0.0	0.
57. $N \cdot C_3H_7 \rightarrow C_3H_6 + CH_3$	3.000E14	0.0	139.71
58. $N \cdot C_3H_7 \rightarrow C_3H_6 + H$	1.000E14	0.0	156.89
59. $N \cdot C_3H_7 + O_2 \rightarrow C_3H_6 + HO_2$	1.000E12	0.0	21.01
60. $I \cdot C_3H_7 \rightarrow C_3H_6 + H$	2.000E14	0.0	162.73
61. $I \cdot C_3H_7 + O_2 \rightarrow C_3H_6 + HO_2$	1.000E12	0.0	12.56
62. $C_3H_8 + OH \rightarrow CH_3CHO + CH_3$	1.000E13	0.0	0.
63. $CH_3CHO + H \rightarrow CH_3 + CO + H_2$	4.000E13	0.0	17.65
64. $CH_3CHO + OH \rightarrow CH_3 + CO + H_2O$	1.000E13	0.0	0.
65. $H + H + M' \rightleftharpoons H_2 + M'$	1.800E18	1.0	0.
66. $H + OH + M' \rightleftharpoons H_2O + M'$	2.200E22	2.0	0.
67. $O + O + M' \rightleftharpoons O_2 + M'$	2.900E17	-1.0	0.
68. $CO + O + M' \rightleftharpoons CO_2 + M'$	7.100E13	0.0	-19.10
69. $CO + O_2 \rightleftharpoons CO_2 + O$	2.500E12	0.0	201.0

Third body efficiencies for M' : $\alpha(O_2) = 0.4$, $\alpha(N_2) = 0.4$, $\alpha(CO) = 0.75$, $\alpha(CO_2) = 1.5$, $\alpha(H_2O) = 6.5$, $\alpha(C_3H_8) = 3$.