UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

MODÉLISATION PAR VOLUMES FINIS DE LA COMBUSTION DANS UN INCINÉRATEUR RÉGÉNÉRATIF

MARC TREMBLAY
DÉPARTEMENT DE GÉNIE MÉCANIQUE
ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

MÉMOIRE PRÉSENTÉ EN VUE DE L'OBTENTION
DU DIPLÔME DE MAÎTRISE ÈS SCIENCES APPLIQUÉES
(GÉNIE MÉCANIQUE)
MAI 1998

© Marc Tremblay, 1998.

National Library of Canada
Bibliothèque nationale du Canada

Acquisitions and Bibliographic Services
Acquisitions et services bibliographiques

395 Wellington Street
Ottawa ON K1A 0N4
Canada

395, rue Wellington
Ottawa ON K1A 0N4
Canada

Your file Votre référence

Our file Notre référence

The author has granted a non-exclusive licence allowing the National Library of Canada to reproduce, loan, distribute or sell copies of this thesis in microform, paper or electronic formats.

L'auteur a accordé une licence non exclusive permettant à la Bibliothèque nationale du Canada de reproduire, prêter, distribuer ou vendre des copies de cette thèse sous la forme de microfiche/film, de reproduction sur papier ou sur format électronique.

The author retains ownership of the copyright in this thesis. Neither the thesis nor substantial extracts from it may be printed or otherwise reproduced without the author's permission.

L'auteur conserve la propriété du droit d'auteur qui protège cette thèse. Ni la thèse ni des extraits substantiels de celle-ci ne doivent être imprimés ou autrement reproduits sans son autorisation.

0-612-38714-3

Canada

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

Ce mémoire intitulé :

MODÉLISATION PAR VOLUMES FINIS DE LA COMBUSTION DANS UN INCINÉRATEUR RÉGÉNÉRATIF

présenté par : TREMBLAY Marc
en vue de l'obtention du diplôme de : Maîtrise ès sciences appliquées
a été dûment accepté par le jury d'examen constitué de :

M. GARON André, Ph.D., président
M. CAMARERO Ricardo, Ph.D., membre et directeur de recherche
M. McKENTY François, Ph.D., membre et codirecteur de recherche
M. DETUNCQ Bruno, M.Ing., membre

À mes parents,
pour m'avoir inculqué la richesse
de l'instruction

REMERCIEMENTS

MES PREMIERS REMERCIEMENTS s'adressent à M. Guy Drouin, Président de Biothermica International Inc. Je lui suis vivement reconnaissant pour son soutien financier ainsi que pour la confiance qu'il m'a toujours manifestée. Il m'a ouvert la porte au milieu professionnel de l'ingénierie et a joué en quelque sorte le rôle de parrain professionnel.

J'exprime également toute ma reconnaissance à mon directeur de recherche, M. Ricardo Camarero et à mon codirecteur de recherche, M. François McKenty. La compréhension, la patience, le support et les conseils qu'ils m'ont offerts sont autant d'éléments responsables de la réussite de ce mémoire.

Je tiens aussi à remercier le personnel du département de génie mécanique et plus particulièrement Alain, Daniel, Chantal, Gisèle et Manon pour leur amitié et le support attentionné qu'ils m'ont apportés. Je m'en voudrais de passer sous silence les conseils, les remarques, les connaissances, les services ou tout simplement l'amitié que m'ont offerts durant mon séjour à Polytechnique les professeurs de la section aérothermique et plus particulièrement MM. Bernier, Pelletier, Detuncq, Garon et Trépanier.

Enfin, je remercie ma famille, mes amis et mes confrères d'étude tels Serge, André, Dominique, Roberto, Samir, Christian, Éric, Stéphane, Mélanie ... qui ont partagé avec moi toutes les émotions reliées à la réalisation d'une maîtrise.

RÉSUMÉ

EN RAISON DE LA RÉGLEMENTATION de plus en plus sévère en matière de contrôle de pollution de l'air, les industries sont aujourd'hui fortement incitées à réduire, voire même à neutraliser leurs émissions de polluants atmosphériques. L'une des options les plus populaires qui s'offre à ces industries est l'incinération régénérative des gaz polluants. Les manufacturiers d'incinérateurs ont traditionnellement conçu la chambre de combustion de ces appareils en se fiant à leur expérience ainsi qu'aux recommandations des agences environnementales des gouvernements. La concurrence de plus en plus féroce et la conscientisation environnementale grandissante de la population incitent les manufacturiers à optimiser le rendement de ces incinérateurs pour les rendre plus performants au niveau économique et environnemental. Ce mémoire constitue une tentative de réponse à cette demande, en développant un modèle de combustion adapté à l'écoulement réactif existant dans la chambre de combustion d'un incinérateur.

Le modèle de combustion doit satisfaire les conditions d'opération régnant dans la chambre, soit une oxydation de type pré-mélange à moyenne température d'un mélange combustible-comburant se trouvant en dehors des limites d'inflammabilité. Le modèle choisi est celui du taux de réaction fini faisant intervenir à la fois la cinétique de la réaction et l'influence de la turbulence. Il est incorporé à un modèle aéraulique basé sur un schéma de volumes finis où

l'aspect turbulent de l'écoulement est pris en compte à l'aide du modèle k-ϵ standard avec loi de paroi.

Le modèle de combustion est validé sur deux problèmes d'écoulement réactif de type pré-mélange. La concordance satisfaisante des résultats obtenus par la simulation avec les solutions numériques et expérimentales de la littérature entérine le modèle et nous permet de passer, avec confiance, à la simulation de l'écoulement dans l'incinérateur. Cette dernière simulation donne l'occasion d'observer les champs de vitesse, de concentration et de température existant dans la chambre de combustion de l'incinérateur. Le taux de destruction moyen des polluants obtenu par cette simulation se compare avantageusement avec le taux de destruction calculé expérimentalement sur une installation existante, l'écart étant de seulement 1%.

La simulation numérique de l'écoulement réactif permet d'observer l'influence de la modification de certains paramètres de conception de la chambre de combustion sur le rendement de destruction des polluants. Parmi les conclusions les plus prometteuses, on note qu'une faible augmentation de la distance entre les lits de l'incinérateur permet d'augmenter de façon appréciable le taux de destruction des polluants. Le modèle développé dans cette étude constitue donc un outil de conception acceptable et profitable pour l'optimisation de la chambre de combustion d'un incinérateur régénératif ou de tout autre incinérateur de fumées.

ABSTRACT

BECAUSE OF STRENUOUS REGULATIONS in air pollution control, industries are eager today to reduce or even eliminate their atmospheric pollutant emissions. One of the most popular options offered to those industries is the regenerative thermal oxidizer. Manufacturer of thermal oxidizer have traditionally designed the combustion chamber of these devices by relying on their experience and recommendations of environmental government agency. The growing competition and the increasing environmental conscientiousness by the citizens have forced manufacturers to optimize the design of the combustion chamber so that they become more economically and environmentally efficient. This Master's thesis tries to answer this request by developing a combustion model suited to the reactive flow that exists in the thermal oxidizer combustion chamber.

The combustion model must satisfy the operating conditions that prevail in the chamber, i.e. a premixed oxidation that occurs in medium temperature and outside of explosive limits. The selected model is the finite reaction rate model that makes use simultaneously of reaction kinetics and turbulent mixing. This combustion model is incorporated in an aerolic model where turbulence is modeled by the k-ϵ model and the wall's law. Discretisation is done by a finite volume method.

The combustion model is validated on two premixed reactive flow problems. Concordance with numerical and experimental solution gained from literature is satisfactory. This ratifies the model and allows us to consider the model for simulation of the reactive flow in the oxidizer. These simulations enable the observation of speed, temperature and concentration field that exist in the combustion chamber of a regenerative thermal oxidizer. Pollutant's destructive rate obtained by the simulation compares to the experimental destructive rate measured on an existing installation by a difference of only 1%.

Numerical simulation of the reactive flow allows us to observe the effect of changing certain design parameters of the combustion chamber on the pollutant's destructive rate. Among the conclusions of this parametric study, we note that a small increase in the gap between two beds of the oxidizer noticeably increases pollutant's destructive rate. Model developed in this study is thus a suitable and beneficial design tool for optimization of regenerative thermal oxidizer's combustion chamber or any other thermal oxidizer's combustion chamber.

TABLE DES MATIÈRES

DÉDICACE iv

REMERCIEMENTS v

RÉSUMÉ vi

ABSTRACT viii

TABLE DES MATIÈRES x

LISTE DES TABLEAUX xiii

LISTE DES FIGURES xv

LISTE DES ABRÉVIATIONS xix

LISTE DES NOTATIONS xx

AVANT-PROPOS xxiii

INTRODUCTION 1

CHAPITRE 1 : REVUE DE LITtÉrATURE 8

1.1 Incinération des fumées 8

1.1.1 Description des différents composés chimiques en jeu 9

1.1.2 Conception de la chambre de combustion 11
1.2 Modèles de combustion 17
1.2.1 Chimie infiniment rapide 19
1.2.2 Équilibre chimique 21
1.2.3 Taux de réaction fini 22
1.3 Applications industrielles de modèles de combustions 28
1.4 Conclusion 29

CHAPITRE 2 : FORMULATION MATHÉMATIQUE 33

2.1 Équations aérodynamiques de base 33
2.2 Modèles de combustion 36
2.2.1 Taux de réaction fini 39
2.2.2 Chimie infiniment rapide 44
2.2.3 Équilibre chimique 46
2.3 Conditions frontières et résolution 48
2.4 Conclusion 49

CHAPITRE 3 : VALIDATION DES MODÈLES DE COMBUSTION 50

3.1 Taux de réaction fini : combustion du CO humide 51
3.1.1 description du problème 51
3.1.2 Solution numérique et analyse des résultats 53
3.2 Taux de réaction fini : combustion du propane 58
3.2.1 Description du problème 59
3.2.2 Solution numérique et analyse des résultats 61
3.3 Taux de réaction infiniment rapide 66
3.4 Équilibre chimique 69
3.5 Conclusion 70

CHAPITRE 4 : SIMULATION DE L'ÉCOULEMENT RÉACTIF DANS L'INCINÉRATEUR 71

4.1 Description du problème 71
4.2 Chimie infiniment rapide : solutions numériques et analyse des résultats 82
4.3 Équilibre chimique : solutions numériques et analyse des résultats 83
4.4 Taux de réaction fini : solutions numériques et analyse des résultats 87
4.4.1 Coupe horizontale 87
4.4.2 Coupe verticale de l'écoulement affecté par le brûleur 91
4.4.3 Coupe verticale de l'écoulement non-affecté par le brûleur 98
4.4.4 Coupe verticale centrale 103
4.5 Conclusion 105

CHAPITRE 5 : OPTIMISATION DU RENDEMENT DE DESTRUCTION 108

5.1 Description des modifications sur la chambre de combustion 108
5.1.1 Simulation étalon 109
5.1.2 Essai 1 : brûleur positionné plus haut 110
5.1.3 Essai 2 : brûleur positionné plus bas 111
5.1.4 Essai 3 : Débit de purge plus grand 112
5.1.5 Essai 4 : Débit de purge plus faible 112
5.1.6 Essai 5 : Chambre de combustion plus grande 112
5.1.7 Essai 6 : Chambre de combustion plus petite 113
5.1.8 Essai 7 : Chambre de combustion plus large 114
5.1.9 Essai 8 : Chambre de combustion plus étroite 114
5.1.10 Essai 9 : Lit de l'incinérateur plus grand 115
5.1.11 Essai 10 : Lit de l'incinérateur plus petit 115
5.2 Analyse des résultats 116
5.3 Conclusion 124

CONCLUSION 126

BIBLIOGRAPHIE 130

LISTE DES TABLEAUX

Tableau 1-1 : Taux de destruction des COV en fonction de la température et du temps de résidence (Donley et Lewandowski, 1995)..... 13
Tableau 2-1 : Taux de réaction Arrhénius pour les combustibles 41
Tableau 3-1 : Composition du mélange gazeux à l'entrée 52
Tableau 4-1 : Répartition des composés chimiques dans les polluants à l'entrée de l'incinérateur 72
Tableau 4-2 : Composition des fumées à l'entrée de l'incinérateur 73
Tableau 4-3 : Composition des fumées à l'entrée de la chambre de combustion 74
Tableau 4-4 : Composition des gaz au brûleur 75
Tableau 4-5 : Composition des fumées à l'entrée de la coupe horizontale..... 76
Tableau 4-6 : Résultats pour la coupe verticale dans la partie affectée 96
Tableau 4-7 : Résultats pour la coupe verticale dans la partie non-affectée .. 102
Tableau 4-8 : Résultats pour la coupe verticale dans la partie centrale..... 104
Tableau 4-9 : taux de destruction moyen de chacune des coupes 106
Tableau 5-1 : Taux de destruction des polluants en fonction des cycles et des modifications 117
Tableau 5-2 : Taux de destruction moyen des polluants en fonction des modifications 117
Tableau 5-3 : Fréquence où la réaction est contrôlée par Magnussen en fonction des cycles et des modifications 120

Tableau 5-4 : Fréquence moyenne où la réaction est contrôlée par Magnussen en fonction des modifications 120
Tableau 6-1: Température de sortie calculée de deux façons différentes pour la coupe verticale dans la partie centrale..... 128

LISTE DES FIGURES

Figure 0-1 : Mode de fonctionnement d'un incinérateur régénératif (Biothermica 1996) 3
Figure 2-1 : Exemple 1 de calcul du temps de résidence 42
Figure 2-2 : Exemple 2 de calcul du temps de résidence 42
Figure 3-1 : Chambre de combustion cylindrique 51
Figure 3-2 : Maillage de la chambre de combustion utilisé pour la validation ... 52
Figure 3-3 : Champs de vecteurs-vitesse dans le réacteur 53
Figure 3-4 : Isolignes de concentration de CO dans le réacteur 53
Figure 3-6 : Fraction molaire du CO en fonction de la position sur l'axe de symétrie 55
Figure 3-7 : Température en fonction de la position sur l'axe de symétrie 55
Figure 3-8 : Influence de la température d'entrée sur la concentration de CO . 57
Figure 3-9 : Influence de la température d'entrée sur la température dans la chambre 57
Figure 3-10 : Chambre de combustion rectangulaire 59
Figure 3-11 : Conditions frontières à l'entrée de la chambre rectangulaire 60
Figure 3-12 : Maillage de la chambre utilisé pour la validation 61
Figure 3-13 : Champs de vecteurs-vitesse dans la chambre 61
Figure 3-14 : Isolignes de concentration de propane dans la chambre 61
Figure 3-15 : Profils de concentration d'oxygène à différentes valeurs de X en fonction de la position radiale; solution numérique de l'auteur 63

Figure 3-16 : Profils de concentration d'oxygène à différentes valeurs de X en fonction de la position radiale; solution numérique de Spalding (1971) 63
Figure 3-17 : Profils de vitesse à différentes valeurs de X en fonction de la position radiale ; solution numérique de l'auteur 64
Figure 3-18 : Profils de vitesse à différentes valeurs de X en fonction de la position radiale ; solution numérique de Spalding (1971) 64
Figure 3-19 : Profils de composition chimique à x = 25.4 cm en fonction de la position radiale 65
Figure 3-21 : Température de flamme adiabatique du mélange méthane-air en fonction du taux de mélange 68
Figure 3-22 : Concentration molaire des produits de combustion du mélange air-méthane à l'équilibre chimique en fonction de la richesse du mélange 69
Figure 4-1 : schéma de la coupe horizontale du brûleur 75
Figure 4-2 : Schéma de la coupe verticale centrale de la chambre de combustion 77
Figure 4-3 : Maillage de la coupe horizontale 81
Figure 4-4 : Maillage typique de la coupe centrale verticale 81
Figure 4-5 : Isolignes de concentration du benzène; coupe verticale centrale du cycle 2, chimie infiniment rapide 82
Figure 4-6 : Isolignes de concentration du CO; coupe verticale centrale du cycle 2, équilibre chimique 84
Figure 4-7 Isolignes de concentration du NO; coupe verticale centrale du cycle 2, équilibre chimique 84
Figure 4-9 : Champs de vecteurs-vitesse dans la coupe horizontale 87
Figure 4-10 : Isolignes de concentration de benzènes dans la coupe horizontale 88
Figure 4-11 : Isolignes de concentration de CO dans la coupe horizontale 88

Figure 4-12 : Isolignes de taux de mélange dans la coupe horizontale 88
Figure 4-13 : Schéma de la coupe verticale de l'écoulement affecté par le brûleur 91
Figure 4-14 : Coupe verticale dans la partie affectée par le brûleur, cycle 1 92
Figure 4-15 : Coupe verticale dans la partie affectée par le brûleur, cycle 2 93
Figure 4-16 : Coupe verticale dans la partie affectée par le brûleur, cycle 3 94
Figure 4-17 : Isolignes d'énergie cinétique de turbulence, cycle 2..... 95
Figure 4-18 : Schéma de la coupe verticale de l'écoulement non-affecté par le brûleur 98
Figure 4-19 : Coupe verticale dans la section non-affectée par le brûleur, cycle 1 99
Figure 4-20 : Coupe verticale dans la section non-affectée par le brûleur, cycle 2 100
Figure 4-21 : Coupe verticale dans la section non-affectée par le brûleur, cycle 3 101
Figure 4-22 : Isolignes de concentrations de CO dans la coupe verticale centrale..... 104
Figure 4-23 : Taux de destruction des polluants dans les coupes verticales.. 106
Figure 5-1 : Schéma de la coupe verticale de la chambre de combustion pour la simulation étalon 110
Figure 5-2 : Schéma de l'essai 1 : brûleur plus haut..... 111
Figure 5-3 : Schéma de l'essai 2 : brûleur plus bas..... 111
Figure 5-4 : Schéma de l'essai 5 : chambre de combustion plus grande..... 113
Figure 5-5 : Schéma de l'essai 6 : chambre de combustion plus petite 113
Figure 5-6 : Schéma de l'essai 7 : Chambre de combustion plus large 114
Figure 5-7 : Schéma de l'essai 8 : Chambre de combustion plus étroite..... 114
Figure 5-8 : Schéma de l'essai 9 : lit plus grand 115
Figure 5-9 : Schéma de l'essai 10 : lit plus petit 116

Figure 5-10 : Champ de vecteurs-vitesse, cycle 2, essai 5 : chambre plus haute 121
Figure 5-11 : Champ de vecteurs-vitesse, cycle 3, essai 5 : chambre plus haute 121

LISTE DES ABRÉVIATIONS

CAA	Clean Air ACT
CFD	Computational Fluid Dynamic
COV	Composés Organiques Volatils
COC	Composés Organiques Condensables
EPA	Environmental Protection Agency
HAP	Hydrocarbures Aromatiques Polycycliques
PDF	Fonctions de Densité de Probabilité

LISTE DES NOTATIONS

LETTRES LATINES

A Constante d'Arrhénius ou section du brûleur (m^2)

E Énergie d'activation (cal·K/mol)

f Taux de mélange

h Enthalpie spécifique (kJ/kg)

I Intensité de Turbulence

k Énergie cinétique de turbulence (kJ/kg)

L Longueur de pénétration de la flamme (m) ou facteur de proportionnalité de la longueur de mélange

m Concentration massique (kmol/kg)

$\dot{m}$ Débit massique (kg/s)

p Pression (kPa)

R Constante universelle des gaz ou taux de réaction [kmol/(m^3s)]

s Rapport de la concentration massique d'oxygène sur la concentration massique de combustible à la stœchiométrie ou entropie spécifique (kJ/kg·K)

S	Terme source de l'équation d'enthalpie (kW/m^3)
t	Temps (s)
T	Température (K)
u	Vitesse selon l'axe x (m/s)
v	Vitesse selon l'axe y (m/s) ou vecteur vitesse (m/s)

LETTRES GRECQUES

ε	Taux de disipation de l'énergie cinétique de turbulance (kW/kg)
ρ	Densité (kg/m^3)
λ	Facteur de proportionnalité de l'intensité de turbulence
μ	Viscosité dynamique (Ns/m^2)
σ_ϕ	Nombre de Schmidt ou de Prandtl
ϕ	variable scalaire

ACCENTS MATHÉMATIQUES

$\bar{}$	Valeur moyenne; décomposition pondérée par la masse
$'$	Fluctuation; décomposition pondérée par la masse
$\tilde{}$	Valeur moyenne; décomposition non-pondérée par la masse
$''$	Fluctuation; décomposition non-pondérée par la masse

INDICES

arh	Arrhénius
eff	Effective
entrée	Entrée de la chambre de combustion
ebu	Eddy-break-up
H	Hydraulique
i	Composé chimique
init	Valeur initiale
fu	Fuel
magn	Magnussen
p	Produits de combustion
r	Réactifs
t	Turbulente

AVANT-PROPOS

CE MÉMOIRE À ÉTÉ RÉDIGÉ dans le cadre d'une maîtrise subventionnée par la compagnie Biothermica International Inc., concepteur d'incinérateurs régénératifs. Les valeurs expérimentales ainsi que les dimensions de l'incinérateur ont été fournies par l'entreprise. Elles sont basées sur l'incinérateur B20 localisé sur les terrains de l'entreprise BPCO à LaSalle (Québec). Cet incinérateur traite les fumées émanant de la production de bardeaux d'asphalte et de papier bitumé.

INTRODUCTION

LES ÉMISSIONS de composés organiques volatils (COV) et condensables (COC) et d'hydrocarbures aromatiques polycycliques (HAP) produites par les procédés industriels sont soumises à des lois environnementales de plus en plus strictes. Ainsi, en 1990, le gouvernement américain a amendé le Clean Air ACT (CAA) afin de réduire de 70 à 90 %, le total des émissions de COV. Un COV se définit comme un composé de carbone participant à un processus de réaction photochimique dans l'atmosphère. Certains hydrocarbures légers comme le méthane et l'éthane sont techniquement exclus. On considère généralement que les hydrocarbures C_3 à C_{10} entrent dans la définition des COV.

Les COV contribuent conjointement avec les oxydes d'azotes (NO_x) à la production d'ozone dans la basse atmosphère. Or, l'ozone est dommageable pour la santé humaine en concentration aussi faible que 0,1 ppmv (Donley et Lewandowski, 1995). Les COV et les NO_x sont aussi responsables de ce que l'on appelle communément le smog urbain ou smog oxydant. Les COV et COC auraient également un rôle à jouer dans le phénomène d'effet de serre, en plus de dégager des odeurs désagréables au milieu environnant. Quant aux HAP, leurs propriétés cancérigènes ne sont plus à démontrer.

Les industries sont donc fortement incitées à réduire, voire même à neutraliser complètement ces émissions. Plusieurs options s'offrent à elles, mais leur choix en matière de technologie d'épuration des gaz doit se faire sur la base de la fiabilité et de l'efficacité tant au plan énergétique qu'environnemental. Parmi les différentes technologies applicables pour le traitement et la destruction des COV, des COC et des HAP, l'oxydation régénérative se présente comme l'une des technologies les plus efficaces et rentables. Selon une étude (Morette et Mukhopadhyay, 1993) *conduite pour le compte de l'*« American Institute of Chemical Engineers », l'incinération serait la solution aux problèmes des COV dans 43 % des cas.

Le procédé d'incinération régénérative vise essentiellement à transformer les hydrocarbures en composés chimiques plus inoffensifs, soit de l'oxygène, du gaz carbonique et de l'eau, tout en minimisant les coûts reliés à la consommation d'un gaz d'appoint. Un ingénieux système d'échangeur de chaleur permet de récupérer 90 % de l'énergie requise pour l'oxydation des hydrocarbures.

L'incinérateur est doté de trois chambres de récupération thermique (A, B et C sur la figure 0-1) qui sont préchauffées avant d'y introduire les gaz à traiter. Les fumées entrent dans l'unité par une conduite de distribution (1). Elles se réchauffent progressivement lors de leur passage à travers le lit de sellettes de porcelaine (2) avant d'atteindre la chambre de combustion (3) située dans la partie supérieure de l'unité. Les COV, COC et HAP entament une oxydation lente au contact des sellettes de porcelaine, oxydation qui prend de plus en plus d'ampleur à mesure que les fumées se réchauffent et approchent la chambre de combustion. Un apport d'énergie supplémentaire sous forme de gaz ou d'huile (4) peut être nécessaire si la concentration des hydrocarbures dans les fumées

n'est pas assez importante pour maintenir la chambre de combustion à une température moyenne de 750 °C.

Après sa combustion, le mélange gazeux redescend à travers les sellettes de porcelaine de l'une des trois chambres de récupération thermique où la chaleur du mélange est transférée aux sellettes plus froides (5). Le mélange gazeux refroidi est ensuite évacué par une cheminée. Pendant qu'une chambre est en mode récupération (C) et l'autre en mode de préchauffe (A), la troisième est en mode de nettoyage ou de purge (B). En effet, une partie des gaz épurés est

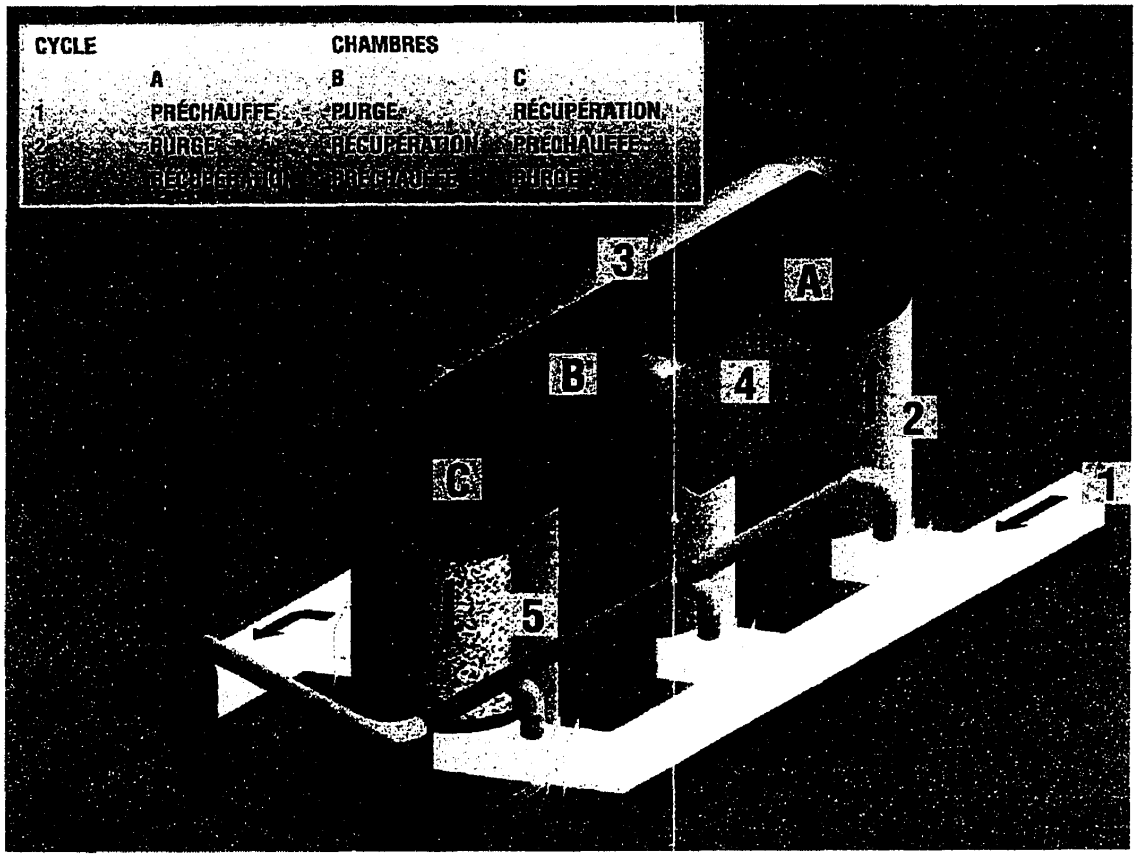


Figure 0-1 : Mode de fonctionnement d'un incinérateur régénératif (Biothermica 1996)

recirculée dans le lit ayant reçu au cycle précédent les fumés sales, afin d'y purger les COV, COC et HAP résiduels. Ce lit pourra ainsi recevoir au cycle suivant les gaz épurés provenant de la chambre de combustion. L'opération des trois chambres s'effectue en mode cyclique sur une courte période de temps par l'action de soupapes, favorisant ainsi une stabilité dans la température de sortie des gaz ainsi qu'une efficacité accrue au niveau de l'échange de chaleur.

Pour les fins de ce mémoire, l'intérêt sera porté uniquement à la chambre de combustion de l'incinérateur régénératif. Les conditions d'entrée de la chambre de combustion ont été déterminées par des hypothèses basées sur des données expérimentales ainsi que par un logiciel de simulation des transferts thermiques dans les lits de porcelaines (BiotoxSim) conçu par l'auteur pour le compte de la société Biothermica International Inc.

Présentement, chez les manufacturiers d'appareils de contrôle de pollution de l'air, la conception des chambres de combustion est uniquement basée sur des relations empiriques, établies par l'EPA (Environmental Protection Agency) sur des projets pilotes réalisés en collaboration avec l'industrie (Rolke et al., 1972; Van Der Vaart et al., 1991). Ces relations déterminent un temps de résidence ainsi qu'une température minimum permettant d'atteindre le taux de destruction désiré. Toutefois, les hydrocarbures contenus dans les fumées ne sont pas tous portés également à la même température et subiront des temps de résidence différents, tout dépendant de leur ligne de courant dans la chambre de combustion. Une proportion des polluants sera coincée dans une zone de recirculation alors qu'une autre sera rapidement éjectée à la sortie de la chambre de combustion. La géométrie de la chambre ainsi que la répartition de la température à l'intérieur de celle-ci joue donc un rôle considérable dans l'efficacité de destruction des polluants.

Ces relations empiriques font fi du type d'incinérateur et oblige donc les manufacturiers à utiliser les mêmes critères pour la conception de l'incinérateur régénératif, de l'incinérateur avec récupérateur de chaleur ou de l'incinérateur-torche. Or ces trois incinérateurs présentent des conditions de température à l'entrée de la chambre passablement différentes de l'un à l'autre. Ceci signifie que pour une même géométrie - donc un même temps apparent de résidence - le temps de résidence où le polluant est réellement porté à la température prescrite est beaucoup plus élevé pour l'incinérateur régénératif que pour l'incinérateur-torche.

Afin de pallier à la situation qui prévaut actuellement chez les manufacturiers, l'auteur s'est fixé les cinq objectifs suivants :

1. Vérifier s'il existe un précédent dans la littérature au sujet de la simulation des écoulements réactifs dans la chambre de combustion d'incinérateur de fumées.
2. Étudier et sélectionner un ou plusieurs modèles de combustion applicables à l'oxydation des gaz polluants dans un incinérateur.
3. Simuler en régime permanent l'écoulement réactif se produisant dans la chambre de combustion d'un incinérateur régénératif.
4. Développer un outil permettant d'améliorer la conception de chambres de combustion d'incinérateur régénératif.
5. Observer l'influence de l'emplacement du brûleur et d'une modification de la géométrie de la chambre sur le taux de destruction des gaz polluants.

Plusieurs hypothèses seront posées au cours de ce mémoire. Il est bien clair qu'il ne s'agit pas ici de concevoir un modèle ayant la capacité de reproduire avec exactitude tous les phénomènes se produisant dans la chambre de combustion. Ce modèle ne permet pas de prédire avec exactitude le taux de

destruction des polluants, mais plutôt d'optimiser ce taux de destruction et d'observer les tendances générales au niveau des champs de vitesse, de température et de concentration de polluants.

L'écoulement réactif dans la chambre de combustion est simulé à l'aide du logiciel VF (Rida, 1993). L'aéraulique de l'écoulement est prédit par la résolution des équations de Naviers-Stokes (conservation de la masse et de la quantité de mouvement) moyennées et formulées en variables primitives (u, v, p). Les transferts thermiques sont modélisés par l'équation de transport de l'enthalpie. Quant à la turbulence, elle est simulée par le modèle k-ε en utilisant une loi de paroi. Ces équations sont discrétisées par une méthode de volumes finis.

La combustion sera simulée par le transport des composés chimiques. Le terme source dans cette équation de transport sera modélisé par un taux de réaction applicable aux flammes de pré-mélange, flamme qui prévaut dans un incinérateur régénératif. Techniquement parlant, il ne se produit pas une combustion des polluants mais plutôt une oxydation, étant donné la pauvreté du mélange gazeux (la richesse du mélange air-CO-C_6H_6 est de 0.0161). Cette oxydation s'effectue en réalité en absence de flamme puisque les concentrations sont en deçà des limites d'inflammabilité (Rolke et al., 1972). Le taux de réaction devra donc idéalement représenter cette réalité. On parle tout de même de "flamme" de pré-mélange pour faire la distinction avec les flammes de diffusion où le comburant et le combustible sont injectés séparément dans la chambre de combustion, le mélange se faisant alors par convection et diffusion. Dans le cas étudié ici, les polluants sont mélangés à l'air bien avant l'introduction des fumées dans la chambre de combustion.

Suite à cette courte introduction, ce mémoire présentera une revue de littérature portant sur l'incinération des fumées ainsi que sur les différents modèles de combustion s'appliquant aux flammes de pré-mélange en général et à l'oxydation des fumées en particulier. Les équations de base utilisées pour la simulation d'écoulements réactifs seront ensuite présentées, en portant une attention particulière aux modèles de combustion. On retrouve ensuite une validation du modèle de combustion par comparaison avec des expériences faisant intervenir des flammes de pré-mélange. Les résultats de la simulation de l'écoulement réactif dans la chambre de combustion de l'incinérateur sont présentés au chapitre 4. Enfin, le dernier chapitre traite de l'influence de modifications apportées au design de la chambre sur le taux de destruction.

CHAPITRE 1 : REVUE DE LITTÉRATURE

CETTE REVUE de littérature traite de trois points principaux. Une revue des pratiques utilisées pour la conception des chambres de combustion d'incinérateurs de fumées est d'abords abordée. Un survol des différents modèles de combustion applicables aux flammes de pré-mélange est ensuite présenté. Une attention particulière est apportée au modèle du taux de réaction fini puisqu'il ressort comme étant le modèle le mieux adapté à l'incinération des fumées. Une dernière section traite de l'application industrielle de la CFD (computational fluid dynamic) réactive dans le domaine du contrôle de la pollution de l'air.

1.1 Incinération des fumées

L'incinération des fumées est une façon propre et efficace de contrôler la pollution de l'air émise par des industries telles l'application de peinture, l'imprimerie, les bardeaux d'asphalte, le papier bitumé, les usines d'équarrissages, la fabrication d'anodes, etc., en autant que l'on respecte certains critères rattachée entre autres au temps de résidence, à la température et au niveau de turbulence. L'incinération permet de décomposer de longues chaînes d'hydrocarbures et autres combustibles par leur oxydation à hautes températures. Bien que cette décomposition produise un gaz responsable de

l'effet de serre, le CO_2, la toxicité de ce dernier est moins importante que celle des réactifs qui l'ont produit.

Les prochaines sous-sections présentent les différents composés chimiques produits et traités par l'incinération des fumées ainsi que les critères utilisés par les manufacturiers pour la conception de la chambre de combustion.

1.1.1 Description des différents composés chimiques en jeu

hydrocarbures

Les hydrocarbures sont les principaux constituants des fumées traitées par incinération. Un hydrocarbure est un composé chimique à base de carbone et d'hydrogène. Les hydrocarbures aliphatiques sont constitués de chaînes de carbone linéaires (normal) ou ramifiés (isomères). Si la chaîne se referme sur elle-même, on parle alors d'hydrocarbures cycliques. On retrouve les COV dans les deux catégories puisque tous les hydrocarbures C_3 à C_{10} entrent dans la définition d'un COV. Les HAP, appartenant à la catégorie des cycliques, sont des hydrocarbures possédant des liaisons doubles (aromatiques), constitués de plusieurs chaînes refermées sur elles-même (polycyclique), d'où leur nom de Hydrocarbure Aromatique Polycyclique. L'asphaltène est également un hydrocarbure : il s'agit d'un dérivé lourd du pétrole composé de plusieurs noyaux aromatiques auxquels viennent se greffer des atomes d'azote, d'oxygène et de souffre. Sa masse moléculaire peut atteindre les 3500 g/mole.

Le type de liaison chimique, la grosseur et l'arrangement de la molécule sont autant de facteurs qui influencent la stabilité chimique des hydrocarbures. Ainsi, les isomères sont beaucoup plus stables chimiquement que leur équivalent en chaîne linéaire. Chez les paraffines (aliphatiques à liaisons

simples), on observe que plus la chaîne est longue, moins le composé est stable. L'ajout de liaisons doubles (oléfines) et triples (di-oléfines) augmentera également la stabilité des aliphatiques, mis à part quelques exceptions comme l'acétylène ou l'éthylène. Cette augmentation de la stabilité par l'ajout de liaisons doubles se vérifie également chez les composés cycliques. Ainsi le benzène, un aromatique, est beaucoup plus stable que son équivalent à liaison simple (naphtène), le cyclohexane.

Ces corrélations mentionnées ci-haut (Heywood, 1988) expliquent bien la stabilité de certains hydrocarbures comme le méthane ou le benzène. En fait, le benzène occupe le troisième rang des composés organiques dangereux les plus stables (Dellinger et al., 1990).

Monoxyde de carbone (CO)

On retrouve du monoxyde de carbone en grande quantité dans toute réaction incomplète de combustion d'un hydrocarbure. La concentration de CO que l'on retrouve dans les produits de combustion est négligeable à 870 °C mais il faut porter la température à plus de 980 °C pour s'assurer une destruction quasi-complète de CO (Cheremisinoff et Young, 1977). Il faut toutefois se méfier des hautes températures puisque à une température supérieure à 1600 °C, des phénomènes de dissociation du CO_2 en CO et O_2 commencent à prendre de l'importance. La présence du CO prend de plus en plus d'ampleur à mesure que l'on refroidit sous les 800 °C. Ainsi, le taux de destruction n'est que de 78% à 760 °C (Donley et Lewandowski, 1995).

Oxydes d'Azote (NO_x)

L'incinération produit rarement du NO_2. Par contre, le NO est un produit de combustion plus fréquent que l'on rencontre surtout dans des conditions d'excès d'air et de très haute température (thermal NO_x) (Cheremisinoff et Young, 1977;

Donley et Lewandowski, 1995). Selon Rolke et al. (1972), L'incinération des fumées à une température de combustion de 815 °C ne produit rarement plus que 22 ppmv de NO_x. La presque totalité de ces NO_x sont formés dans la zone du brûleur où les températures peuvent atteindre les 2000 °C. Les hautes températures entraînent en effet des phénomènes de dissociation du N_2 et du O_2. Le N_2 réagit alors avec l'atome d'oxygène dissocié et l'oxygène en fait autant avec l'atome d'azote dissocié. Si la température de la chambre de combustion passe de 870 °C à 1315 °C, l'émission de NO sera doublée. L'incidence de la température est encore plus importante à 1540 °C. En effet, sous des conditions d'excès d'air, on double la quantité de NO émise pour chaque augmentation de 16 °C (Beér, 1994). Une partie du monoxyde d'azote se transformera toutefois en NO_2 lorsque les gaz seront refroidis sous la barre des 650 °C. Ces deux formes de NO_x sont toxiques et tout aussi dommageables pour l'environnement. Elles sont classées parmi les 6 espèces chimiques les plus dangereuses par le "National Ambiant Air Quality Standards (NAAQS). En plus de leur nocivité intrinsèque (elles entraînent des troubles respiratoires et éventuellement la mort), elles contribuent avec les COV à la production du smog urbain.

1.1.2 Conception de la chambre de combustion

Le succès d'une réaction de combustion dépend de trois grands critères. Ces critères que l'on nomme les trois "T" sont la température, le temps et la turbulence. Les manufacturiers d'incinérateurs se basent généralement sur les deux premiers critères pour la conception de leur chambre en espérant que le troisième sera satisfait. La température est le paramètre qui exerce le plus d'influence sur le rendement d'une combustion. En supposant une vitesse de réaction du premier ordre et en assumant une corrélation de type Arrhénius entre la constante de réaction et la température, on obtient l'équation (1-1) pour

la concentration du composé chimique brûlé en fonction du temps et de la température :

$$[m] = [m_0]\exp[-At\exp(-E/RT)] \qquad (1\text{-}1)$$

où: m = concentration
m_0 = concentration initiale
A = constante d'Arrhénius
E = énergie d'activation
R = constante universelle des gaz
T = température
t = temps

On remarque que la concentration varie de façon exponentielle avec le temps mais de façon super-exponentielle avec la température. La figure 1-1 démontre graphiquement cette relation entre le taux de destruction d'un polluant, le temps et la température.

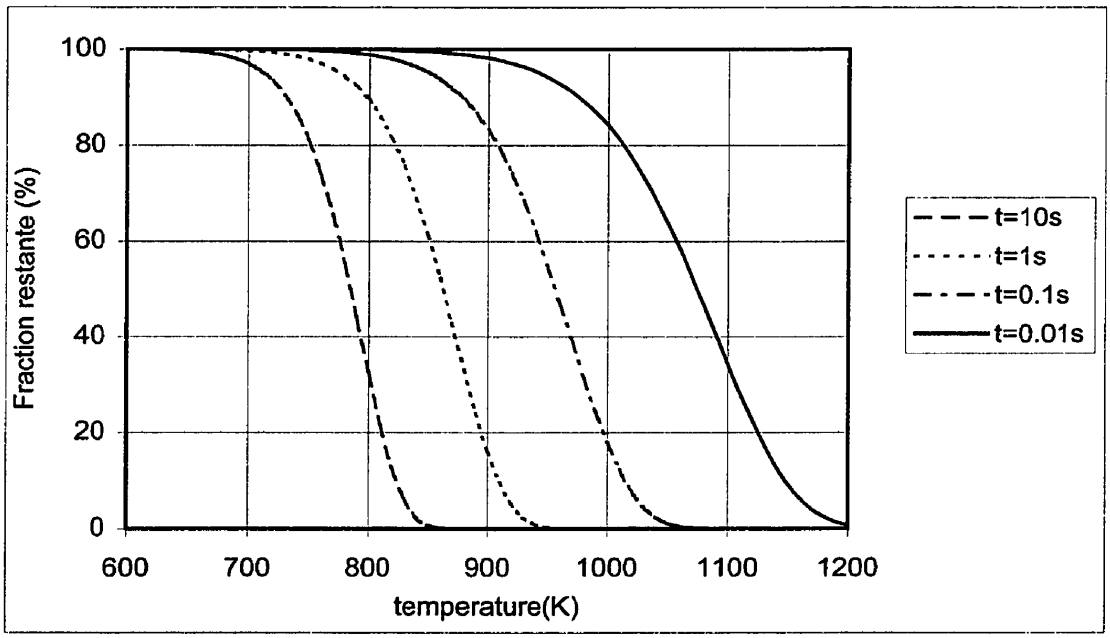


Figure 1-1 : Effet couplé de la température et du temps de résidence sur le taux de destruction du CO (équation 2-21)

Tel que mentionné par Donley et Lewandowski (1995), il est très difficile d'établir les conditions idéales d'opération de la chambre de combustion de l'incinérateur étant donné que le débit, la température, la concentration et le type de polluant varie énormément d'une application à une autre. Ils suggèrent de se fier plutôt aux opérateurs de ces installations qui ont accumulé des données d'opération pendant plusieurs années. Tout de même, ces auteurs suggèrent des pistes basées sur la température d'auto-inflammation du polluant. Le tableau 1-1 résume ces recommandations.

Tableau 1-1 : Taux de destruction des COV en fonction de la température et du temps de résidence (Donley et Lewandowski, 1995).

Efficacité de destruction	Incrément de température au-dessus de la température d'auto-inflammation	Temps de résidence
(%)	(°C)	(s)
95	150	0.5
98	205	0.5
99	245	0.75
99.9	288	1.0
99.99	343	2.0

La température d'auto-inflammation constitue une façon d'évaluer la stabilité thermique d'un composé organique. C'est la température à laquelle un hydrocarbure débute une réaction d'oxydation avec production de CO_2 et H_2O, sans l'aide d'une source externe de chaleur (flamme, étincelle, etc.). Il ne faut pas confondre avec la température d'inflammation ("fire point") qui consiste en la température à laquelle un mélange s'enflamme **à l'approche d'une source de chaleur**. Cette combustion sera soutenue même si la source de chaleur disparaît. Il existe aussi un autre paramètre d'évaluation d'un combustible nommé point

éclair ("flash point"). Il s'agit de la température à laquelle une combustion **momentanée** s'effectue à l'approche d'une flamme. Énoncé en ordre croissant de température, on obtient : le point éclair, la température d'inflammation et la température d'auto-inflammation. Toutes ces températures ne sont valides que lorsque le mélange air-combustible se trouve à l'intérieur des limites d'inflammabilité. Ces limites constituent les concentrations minimales et maximales de combustible pour lesquelles la combustion est possible.

Les polluants contenus dans les fumées sont rarement à l'intérieur des limites d'inflammabilité. La dilution avec l'air rend impossible la propagation de la flamme et ces polluants s'oxydent en absence de flamme. C'est la raison pour laquelle on doit porter les fumées à une température incrémentée de quelques centaines de degrés au-dessus de la température d'auto-inflammation et ce, pendant un laps de temps adéquat.

Les limites d'inflammabilités dépendent de la température des réactifs. Plus la température augmente, plus le champ d'inflammabilité s'élargit. Le monoxyde de carbone présente une limite inférieure d'inflammabilité (LEL) de 16.3% par volume à 17 °C et de 7.5% à 740 °C (American Gas Association, 1965). Le benzène affiche quant à lui une LEL de 1.32% à 17 °C mais 0.13% à 740 °C (Crosby et al, 1954). Ces relations avec la température sont généralement linéaires pour tous les composés. On observe habituellement une diminution de 6 à 8% de la LEL par tranche de 100 °C d'augmentation (Penner et Mullins, 1959). Dans le cas étudié pour ce mémoire, la concentration de CO est de 0.13% alors que celle de benzène est de 0.048% par volume. En utilisant la loi de Le Châtelier et en postulant que le mélange de gaz à leur limite inférieure d'inflammabilité produit un gaz final qui est lui aussi à sa limite inférieure d'inflammabilité, on obtient la formule suivante (Burgess et al. 1982):

$$L = \frac{100}{\frac{P_1}{L_1} + \frac{P_2}{L_2} + \frac{P_3}{L_3} + \ldots} \qquad (1\text{-}2)$$

où L_i = LEL du composé i

P_i = pourcentage volumique du combustible i sur le total de combustible

En appliquant cette formule, on obtient pour le benzène et le CO aux concentrations énoncées plus haut, un LEL total de 0.46% alors que la concentration totale de combustible est de 0.18%.

La présence de très nombreux composés chimiques dans les fumées, des dizaines voire même des centaines parfois, rend très difficile la détermination d'une température de combustion en se basant sur un incrément par rapport à la température d'auto-inflammmation la plus élevée de ces composés chimiques. De plus, les produits intermédiaires provenant de la combustion des longues chaînes de paraffines possèdent généralement des températures d'auto-inflammation plus élevées que le réactif initial, étant donné que ce sont des paraffines de plus courte longueur. Par exemple, le dodécane ($C_{12}H_{26}$) possède une température d'auto-inflammation de 204 °C. La chaîne de carbone sera donc brisée à basse température. Toutefois, les produits de combustion intermédiaires tels le méthane et l'éthane sont beaucoup plus difficiles à brûler, ayant respectivement des températures d'auto-inflammation d'environ 540 et 510 °C. Bien que le dodécane dégage de l'énergie lors de sa combustion et qu'il augmente ainsi la température de son entourage, il n'en dégagera pas suffisamment pour entretenir la combustion s'il est dilué dans une quantité importante de comburant, comme c'est le cas dans les fumées traitées par les incinérateurs régénératifs.

Pour toutes ces raisons, les organismes gouvernementaux ont suggéré, et parfois même imposé, des températures de combustion et des temps de résidence minimums pour les incinérateurs de fumées. L'EPA a suggéré en 1972 une température de combustion de 760 à 816 °C et un temps de résidence de 0,3 à 0,5 seconde, applicable à la majorité des hydrocarbures (Rolke et al., 1972). Ces paramètres permettent une réduction d'au moins 90 %. D'autres études effectuées pour le compte de l'EPA en 1980 suggèrent une température de 871 °C et un temps de résidence de 0,75 s pour obtenir 98% de destruction (Van Der Vaart et al., 1991). Depuis les amendements du Clean Air Act (CAA) en 1990, on **impose** aux installations commerciales traitant les composés organiques par oxydation, un temps de résidence de 0,5 s à 760 °C, permettant ainsi un taux de destruction de 95%.

Tous ces paramètres empiriques ne sont valides que lorsque la turbulence est suffisamment élevée dans la chambre de combustion. La turbulence a deux fonctions. La première est de permettre un bon mélange entre le combustible et le comburant afin de mettre les molécules en contact. Dans le cas d'une flamme de pré-mélange, cette fonction à peu d'importance puisque le mélange est déjà passablement homogène. La seconde fonction consiste à mettre en contact les gaz brûlés chauds avec les gaz frais afin d'augmenter la température de ces derniers. Le nombre de Reynolds (Re), ratio des forces d'inertie sur les forces visqueuses, peut être un indicateur de la turbulence. Une valeur supérieure à 10 000 (basé sur le diamètre de la chambre) permet d'assurer la turbulence (Donley et Lewandowski, 1995). Toutefois, une valeur inférieure à 10 000 n'implique pas que l'écoulement soit laminaire. Une chambre de combustion munie de chicanes permettra probablement une bonne turbulence même pour des valeurs de Re de 3 000. Une vitesse d'écoulement supérieure à 7,6 m/s garantit également une turbulence adéquate. Dans le cas de cette étude, le nombre de Reynolds est de 83000.

Les recommandations de températures et de temps de résidence ne tiennent pas compte du type d'incinérateur. On rencontre quatre types d'incinérateurs sur le marché. En plus des incinérateurs régénératifs, on retrouve les incinérateurs avec récupérateur de chaleur, les incinérateurs-torche et les incinérateurs catalytiques. L'incinérateur régénératif a un rendement de 90 % au niveau de l'échangeur de chaleur. Les fumées pénètrent donc dans la chambre de combustion à une température près de la température de combustion. Les incinérateurs avec récupérateur et les incinérateurs-torche ont respectivement des rendements de 70 et 0%. Puisque les fumées de ces incinérateurs pénètrent dans la chambre à une température plus faible, elles ne seront pas portées à la température requise avant qu'elles n'atteignent la flamme du brûleur. Le temps réel de résidence à la température requise pour ces appareils est donc plus court que dans le cas du régénératif. Quant aux incinérateurs catalytiques, la température requise est beaucoup plus faible en raison de l'action du catalyseur sur le processus d'oxydation.

1.2 Modèles de combustion

Le taux de réaction d'un composé chimique se définit comme le taux auquel le réactif se transforme en produits de réaction. Ce taux est généralement fonction de la température, de la densité et des concentrations du comburant et du combustible. L'influence des concentrations s'explique par le fait que le taux de réaction est proportionnel au nombre de collisions entre les molécules composant les réactifs. Or, pour une température donnée, ce nombre de collisions est proportionnel aux concentrations des réactifs. Dans le cas où le CO est le combustible et l'oxygène est le comburant, cette proportionnalité s'exprime de la façon suivante :

$$R_{CO} = K_f \rho^2 m_{CO} m_{O_2} \tag{1-3}$$

L'influence de la température sur le taux de réaction se comporte habituellement comme une exponentiel de type Arrhénius (1889), i.e.

$$K_f = Ae^{\frac{-E}{RT}} \tag{1-4}$$

On obtient donc dans le cas d'une *combustion en régime laminaire* un taux de réaction exprimé sous la forme suivante (Khalil, 1982; McKenty, 1992) :

$$R_{CO} = A\rho^2 m_{CO} m_{O_2} e^{\frac{-E}{RT}} \tag{1-5}$$

Ce taux de réaction reflète très bien la réalité en autant que l'on connaisse les constantes utilisées dans cette équation. Ces constantes doivent être établies expérimentalement pour chaque combustible et ce, dans les conditions se rapprochant le plus des conditions d'opérations. Les constantes peuvent être calculées de façon analytique seulement dans le cas de réactions élémentaires. Or, une réaction comme l'oxydation du CO peut comporter plus de 28 réactions élémentaires (Westbrook et al., 1977). Un hydrocarbure typique aura quant à lui un mécanisme de combustion faisant intervenir quelques 200 espèces et plus de 240 réactions chimiques élémentaires.

La présence de la turbulence dans l'écoulement réactif vient toutefois compliquer les choses énormément. L'influence entre la turbulence et le taux de réaction se fait dans les deux sens. Le taux de réaction affecte les concentrations massiques qui, à leur tour affectent la densité du mélange soit directement par l'intermédiaire de l'équation d'état ou indirectement par le calcul de la température. La densité affecte à son tour toutes les équations de transport dont celles du modèle de turbulence. C'est dans l'autre sens toutefois que les conséquences sont les plus complexes. La turbulence implique des

valeurs moyennées dans le temps. Or, le taux de réaction moyen réel n'est pas égal au taux de réaction basé sur des valeurs moyennes. Pour cette raison, le taux de réaction moyen en présence de turbulence prend la forme suivante (Khalil, 1982; McKenty, 1992):

$$\tilde{R}_{CO} = A\tilde{\rho}^2\tilde{m}_{CO}\tilde{m}_{O_2}e^{\frac{-E}{RT}}[1+F] \qquad (1\text{-}6)$$

où

$$F = \frac{\overline{m''_{CO}m''_{O_2}}}{\tilde{m}_{CO}\tilde{m}_{O_2}} + \frac{E}{2R\tilde{T}}\left(\frac{E}{R\tilde{T}}-1\right)\left(\frac{\sqrt{\overline{T''^2}}}{\tilde{T}}\right)^2 + \frac{E}{R\tilde{T}}\left(\frac{\overline{T''m''_{CO}}}{\tilde{T}\tilde{m}_{CO}}+\frac{\overline{T''m''_{O_2}}}{\tilde{T}\tilde{m}_{O_2}}\right) \qquad (1\text{-}7)$$

Le terme F représente l'influence de la turbulence. Il contient plusieurs termes non-linéaires et rend impossible la fermeture du système d'équations sans avoir recours à certains modèles très complexes.

Pour contourner les problèmes associés à la modélisation des termes non-linéaires contenus dans F, nous avons recours à différents modèles de combustion pour résoudre les écoulements réactifs turbulents. Les prochaines sous-sections présentent les différents modèles étudiés par l'auteur.

1.2.1 Chimie infiniment rapide

Le modèle à chimie infiniment rapide suppose que la réaction chimique est si rapide que celle-ci est complétée aussitôt que les réactifs sont mélangés. La réaction se produit en une seule étape, rapide, complète et de manière irréversible. Ce modèle est conçu pour les flammes de diffusion où l'échelle de temps à laquelle se mélangent les réactifs est beaucoup plus grande que celle de la réaction. On parle alors d'une combustion contrôlée par le mélange

turbulent plutôt que par la cinétique de la réaction. C'est un modèle simple, rapide et plus ou moins précis. Il ne permet d'obtenir comme produits de réaction que du CO_2, H_2O, N_2 avec en plus du O_2 dans le cas d'un mélange pauvre ou du combustible dans le cas d'un mélange riche. Ce modèle surestime la température des produits de combustion puisqu'on ne tient pas compte de la présence réelle de produits intermédiaires de combustion tels le CO ou le NO.

Avec le modèle de chimie infiniment rapide, il n'est pas nécessaire de transporter chaque composé chimique et d'y inclure un taux de réaction à titre de terme source. Par le truchement d'une combinaison linéaire des équations de transports des différents réactifs et en supposant que les coefficients de diffusion soient les mêmes pour tous les composés chimiques, on obtient une nouvelle équation de transport sans terme source (Khalil, 1982; McKenty, 1992). Cette nouvelle équation est celle du transport du taux de mélange des réactifs. Le transport du taux de mélange permet de calculer l'évolution du mélange des réactifs dans la chambre de combustion. Dans le cas de la flamme de diffusion, on assiste au mélange du combustible et du comburant. Le taux de mélange prend la valeur de 1 pour du combustible pur et 0 pour du comburant pur. Toute valeur du taux de mélange comprise entre 0 et 1 indique un mélange particulier des réactifs. Quant à la flamme de pré-mélange, elle ne nécessite pas la résolution de cette équation de transport à moins qu'il y ait deux entrées distinctes de mélange gazeux dans la chambre de combustion.

On considère que la réaction est complète et irréversible et qu'elle entraîne une destruction totale du combustible ou du comburant. S'il y a excès d'air (mélange pauvre), tout le combustible sera consommé et il restera de l'oxygène dans les produits. À l'inverse, s'il y a manque d'air (mélange riche), tout l'oxygène sera consommé et on retrouvera du combustible dans les produits. Dans le cas d'un mélange riche faisant intervenir plusieurs combustibles, on

peut accorder des priorités de combustion à certains composés chimiques ou bien supposer que les proportions des différents combustibles demeureront les mêmes, dans les réactifs comme dans les produits.

Ce modèle ne procurera pas de résultats concluants dans le cas étudié dans le cadre de ce mémoire puisque les réactifs sont déjà en contact les uns avec les autres au moment de pénétrer dans la chambre de combustion. De plus, ce modèle n'est pas fonction de la température. L'appliquer à la chambre de combustion de l'incinérateur produirait une réaction instantanée, peu importe la température d'entrée dans la chambre de combustion. On assisterait à une réaction complète, même avec des fumées à la température ambiante.

1.2.2 Équilibre chimique

Le modèle d'équilibre chimique suppose que la réaction est suffisamment rapide pour que l'équilibre chimique soit atteint localement entre les différentes espèces chimiques. Ceci suppose donc que l'équilibre chimique soit atteint aussitôt que le combustible entre en contact avec le comburant. Contrairement au modèle précédent toutefois, on ne pose plus comme hypothèse que l'équation est complète et irréversible. On parle d'équilibre chimique lorsqu'il n'y a plus de direction préférentielle dans les réactions. Prenons par exemple la réaction suivante :

$$CO + \frac{1}{2}O_2 \Leftrightarrow CO_2 \qquad (1\text{-}8)$$

On suppose donc que le monoxyde de carbone s'oxyde au même rythme que le gaz carbonique se dissocie pour former le monoxyde de carbone. Ce calcul d'équilibre chimique est basé sur la minimisation de l'énergie de Gibbs

(Heywood, 1988; McKenty, 1992). Ce modèle a l'avantage de déterminer les concentrations de tous les composés chimiques que l'on peut supposer être présents dans les produits sous des conditions d'équilibre chimique. On peut calculer avec ce modèle des concentrations de CO, H_2, NO, NO_2, etc. Pour les mêmes raisons que le modèle précédent, ce modèle est destiné aux flammes de diffusion. Il permet une meilleure estimation de la température puisqu'il tient compte de la présence d'espèces dissociées. Il tend par contre à surestimer la concentration de certains composés chimiques dont le taux de réaction très lent ne leur permet pas d'atteindre l'équilibre chimique en un temps limité. Le calcul de l'équilibre chimique est cependant beaucoup plus coûteux en termes de temps de calcul. Le mélange de deux fluides et surtout l'ignorance de la composition du mélange dans le lit de purge de l'incinérateur empêchent de calculer à l'avance les équilibres chimiques pour une série de conditions de températures et de compositions comme le fait McKenty (1992). En effet, le fluide pénétrant dans la chambre de combustion par le lit de purge se trouve à être une fraction du flux de sortie recirculé dans la chambre. L'équilibre chimique doit donc être calculé à chaque nœud de calcul et ce, pour chacune des itérations.

1.2.3 Taux de réaction fini

Lorsque l'échelle de temps à laquelle se mélangent les réactifs devient du même ordre de grandeur ou encore plus faible que celle de la cinétique de la réaction, le modèle de taux de réaction fini est le plus approprié. On parle alors d'une combustion contrôlée autant par le mélange que par la cinétique de la réaction ou bien d'une réaction contrôlée uniquement par la cinétique de la réaction. Les modèles basés sur un taux de réaction fini s'appliquent surtout dans le cas de flammes de pré-mélange.

Les premiers modèles de combustion basés sur un taux de réaction fini étaient de type Arrhénius tel que présenté à l'équation 1-6 en posant F=0. Ce modèle est approprié lorsque la réaction est contrôlée par la cinétique chimique. Toutefois, ce taux de réaction moyen basé sur des valeurs moyennes plutôt que sur des valeurs instantanées ne semblait pas donner de très bons résultats lorsque le temps de mélange était à peu près du même ordre de grandeur que le temps de réaction. Spalding (1971) trouvait que l'importance du contrôle cinétique était grandement exagérée dans les flammes de pré-mélange. Il a donc développé un modèle qui permettait de ne plus négliger l'impact de la turbulence sur le taux de réaction. Ce modèle appelé Eddy-break-up est basé sur le taux de dégénérescence des tourbillons en supposant que plus les poches de gaz non-brûlé sont petites, plus il y a de contacts entres les molécules de gaz brûlés, chaudes et celles de gaz non-brûlés, froides. Afin de tenir compte des situations de basses températures dans la chambre de combustion, Spalding (1971) propose de tenir compte des deux modèles selon la relation suivante :

$$\frac{1}{R_{fu}} = \frac{1}{R_{ebu}} + \frac{1}{R_{arh}} \qquad (1\text{-}9)$$

La majorité des utilisateurs de ce modèle choisiront plutôt d'opter pour le taux de réaction qui contrôle la réaction, soit le plus lent des deux :

$$R_{fu} = \min(R_{ebu}, R_{arh}) \qquad (1\text{-}10)$$

Bien que la méthode de Spalding semble donner de très bons résultats dans les flammes de pré-mélange, elle rencontre plus de difficulté dans les flammes de diffusion, malgré les améliorations apportées en 1973 (Mason et Spalding) et 1976 (Spalding). Hutchinson et al. (1976) et Khalil et al. (1975) ont remarqué que dans un tel cas, le taux de Eddy-break-up contrôlait trop souvent la réaction au détriment du taux de type Arrhénius. Pope (1977) ajoute même que ce

modèle ne s'appliquerait pas dans le cas de flammes de diffusion puisqu'il ne donne pas de solution unique. Bray et Moss (1977) ont ensuite démontré les limites du modèle Eddy-break-up à l'aide de leur modèle basé sur une variable de réactivité et qui constitue en fait une extension du modèle de Spalding. Le modèle de Bray et Moss donne toutefois de meilleurs résultats lorsque la réaction est contrôlée par la turbulence et il s'applique surtout aux flammes de pré-mélange. Afin de pallier cette situation, Borghi et Moreau (1977) ont développé un modèle qui s'applique aussi bien aux flammes de diffusion qu'aux flammes de pré-mélange et pour des cas ou la réaction est contrôlée par la cinétique ou la turbulence. Pour ce faire, ils ont développé les termes non-linéaires que l'on retrouve dans l'équation 1-7 en ne négligeant que les termes supérieurs au deuxième ordre. Cette méthode est toutefois très coûteuse en temps de calcul puisqu'elle nécessite le transport de plusieurs termes additionnels.

Magnussen et Hjertager (1976) ont également développé un modèle pouvant s'appliquer aussi bien aux flammes de pré-mélange qu'aux flammes de diffusion. Ce modèle est en fait une extension du modèle Eddy-break-up mais il ne fait pas usage de la fluctuation du taux de mélange. Magnussen (1981) a par la suite publié un modèle beaucoup plus généralisé, basé sur les structures fines. Le modèle qu'ils ont publié en 1982 (Hjertager et Magnussen) en est une version simplifiée et c'est celui que l'on retrouve le plus souvent dans la littérature. Comme tous les modèles énoncés précédemment mis à part celui de Bray et Moss (1977), il n'est applicable que dans les cas ou la combustion est contrôlée uniquement par la turbulence du mélange. Pour tenir compte de l'influence de la température sur le taux de réaction, Il faut coupler un de ces modèles au modèle de type Arrhénius (équation 1-6 où F=0) à l'aide de l'équation 1-10.

La pondération à l'aide de fonctions de densité de probabilité (PDF) permet de tenir compte des fluctuations turbulentes de certains scalaires comme le taux de mélange. La pondération donne une meilleure approximation des vitesses et des températures. Quelques-unes de ces fonctions ont été déterminées et s'appliquent aux modèles de combustion où le mécanisme de réaction est basé sur le taux de mélange (Khalil, 1982). Dans le cas étudié ici toutefois, le taux de réaction fini n'est pas exclusivement basé sur une seule variable et la détermination d'une PDF bi-modale applicable au cas analysé pose de sérieuses difficultés. Aucune pondération ne sera donc réalisée.

Les fumées traitées par l'incinérateur étudié dans le cadre de ce mémoire sont produites par un bain de goudron. Elles sont composées de centaines d'hydrocarbures différents possédant une masse moléculaire pouvant varier entre 16 et 3500 g/mole. Au début de cette étude, une analyse des fumées a permis de faire ressortir les huit composés chimiques les plus représentatifs. On retrouvait entres autres des HAP comme les phénanthrènes, des COV-HAP comme le benzène, le toluène ou le xylène et des paraffines comme le éicosane. L'absence de références expérimentales sur ces composés, le temps de calcul nécessaire au transport de tous ces composés et une analyse plus approfondie des conditions à l'entrée de la chambre de combustion ont amené l'auteur à considérer seulement deux composés chimiques.

Le choix des composés chimiques s'est arrêté sur le benzène et le monoxyde de carbone (CO). Ces deux composés sont susceptibles de se trouver en grande quantité à l'entrée de la chambre de combustion. En effet, les asphaltènes ont tendance à se cracker en composés benzéniques à une température d'environ 500 °C (Speight, 1980). Ce crackage doit donc se produire dans le haut du lit de sellettes, juste avant l'entrée dans la chambre de combustion (environ 740 °C). Quant au CO, c'est un sous-produit de

combustion que l'on retrouve en grande quantité dans des réactions incomplètes de combustion d'hydrocarbures (Donley et Lewandowski, 1995). On doit donc s'attendre à en retrouver en proportion importante à l'entrée de la chambre de combustion puisque les réactions d'oxydation ont débuté dans le lit de sellettes.

Le benzène et le CO ont également un taux de réaction des plus lents et contrôlent ainsi la réaction. Tel que mentionné précédemment, le benzène occupe le troisième rang des composés organiques dangereux les plus stables. Quant au CO, Il prend 10 fois plus de temps à s'oxyder qu'il en faut pour qu'il se crée à partir d'un hydrocarbure (Rolke et al., 1972). Puisque ces composés sont les derniers à brûler dans les fumées, leur destruction impliquera la destruction de tous les autres hydrocarbures.

Tel que mentionné précédemment, l'utilisation d'un taux de réaction de type Arrhénius nécessite la connaissance de constantes de réaction adaptées au composé chimique ainsi qu'aux conditions de richesse de mélange et de température. Ces constantes d'Arrhénius doivent toutefois tenir compte autant que possible des conditions réelles d'opération soit une faible ou forte température, la richesse du mélange et la présence ou l'absence de flammes. Ce dernier paramètre détermine la quantité de radicaux OH présents dans les fumées, véritables « catalyseurs » de la réaction d'oxydation d'hydrocarbure. Par exemple, l'énergie d'activation pour l'oxydation du CO par les radicaux OH est 48 fois moins élevée que celle nécessaire à l'oxydation du CO par l'oxygène (O_2) (Rolke et al., 1972). Or, on retrouve beaucoup plus de radicaux OH dans la flamme que partout ailleurs dans la chambre de combustion où elle peut être considérée comme approchant sa concentration à l'équilibre chimique. Dryer et Glassman (1973) ont démontré que le taux de réaction du CO en présence de

flamme est deux ordres de grandeur plus élevés que celui où la concentration de OH est posée à l'équilibre chimique.

Le même taux de réaction ne peut donc pas être utilisé pour simuler la destruction devant la flamme du brûleur et celle se produisant ailleurs dans la chambre de combustion. Les températures plus élevées au brûleur, mais surtout la présence d'une flamme, nécessite une modification du taux de réaction. Le taux de réaction de type Arrhénius pour le CO en présence de flammes a été déterminé expérimentalement par Dryer et Glassman (1973). Il est valide dans les conditions suivantes : température de 757 à 957 °C, pression de 1 atm., richesse de 0.04 à 0.5, concentration en eau de 0.1 à 3% vol. et écoulement turbulent. Pour le calcul du taux de réaction en absence de flamme, les auteurs ont supposé que la concentration de radicaux OH était à l'équilibre. Selon certaines observations en industrie (Rolke et al., 1972), le taux de réaction en absence de flamme se situerait en fait entre celui déterminé en présence de flamme et celui calculé en posant la concentration de radicaux OH à l'équilibre chimique.

En ce qui concerne le benzène, Lee et al. (1982) ont établi expérimentalement un taux de réaction de type Arrhénius sous des conditions que l'on retrouve dans un incinérateur, soit des vapeurs très diluées, une absence de flamme et des températures se situant entre 690 et 982 °C. Ce taux de réaction est calculé pour une combustion incomplète où on retrouve des produits intermédiaires de combustion. Il comporte un délai d'allumage évalué en secondes. Pour les conditions en face du brûleur où on retrouve plus de radicaux OH et de plus hautes températures, le taux de réaction déterminé par Duterque et al. (1981) est celui qui est le mieux adapté. Il a toutefois été établi dans des conditions de mélange stœchiométrique pour des températures supérieures à 1025 °C, soit des conditions légèrement différentes de celles que

l'on retrouvera en face du brûleur. Ce taux de réaction n'est valide que pour l'oxydation du benzène en monoxyde de carbone.

1.3 Applications industrielles de modèles de combustions

L'objectif de cette sous-section n'est pas de relever toutes les occurrences d'applications industrielles de modèles de combustion que l'on peut retrouver dans la littérature, mais plutôt de rapporter quelques articles utilisant une méthode qui pourrait s'appliquer au cas étudié.

Dans un premier temps, on retrouve des applications dans le domaine de l'incinération des déchets municipaux. May (1994) utilise un modèle de type Arrhénius et une formulation lagrangienne pour simuler la destruction d'un traceur dans la chambre de combustion secondaire d'un incinérateur de type « four rotatif ». La flamme produite par les brûleurs est quant à elle simulée par un modèle de type Magnussen. À la suite de nouvelles politiques environnementales émises par la CEE, Nasserzadeh et al. (1991) ont été mandatés par la ville de Sheffield en Angleterre pour étudier l'influence du design et des paramètres d'opération sur la performance de l'incinérateur à déchets municipaux. Comme dans le cas précédent, ils ont utilisé une formulation lagrangienne pour évaluer le temps de résidence d'un traceur dans la chambre de combustion. La simulation de la combustion a été réalisée en formulation newtonienne par un modèle à taux de réaction fini de type Arrhénius-Magnussen en se servant de l'équation 1-10. Le processus de combustion a été séparé en deux étapes. La première étape transforme l'hydrocarbure en monoxyde de carbone et la seconde complète la combustion

du CO en CO_2. Étant donné que le mélange n'est pas suffisamment pauvre, l'hydrocarbure sera en compétition avec le monoxyde de carbone pour réagir avec l'oxygène. Les auteurs tiennent donc compte de cette situation dans la formulation de leur modèle de combustion tel que suggéré par Magnussen (1976). D'autres études numériques ont également été réalisées dans le domaine des incinérateurs à déchets (Ravichandran et Gouldin, 1992; 1993). Afin de réduire la complexité du problème toutefois, ces études ne portent que sur des écoulements isothermes.

On retrouve également des applications industrielles de modèles de combustion dans le domaine des fours à verre. Les flammes de diffusion des brûleurs sont généralement simulées par un modèle de chimie infiniment rapide couplé à une PDF. La production de suie est simulée par un modèle de type arrhénius alors que la destruction de cette suie peut être simulée par un modèle de type Magnussen (Carvalho et al., 1988) ou un modèle basé sur la variable de réactivité (Jouvaud et al., 1988).

Il n'existe toutefois aucun article dans la littérature qui traite spécifiquement de la simulation numérique de la combustion dans un incinérateur de fumées.

1.4 Conclusion

La réussite d'une oxydation complète de polluants dépend de trois facteurs importants, les trois « T », soit la température, le temps et la turbulence. L'efficacité de destruction est directement proportionnelle à chacun de ces paramètres. Afin de procurer certaines balises aux manufacturiers, l'EPA signalait en 1980 que maintenir les hydrocarbures à la température de 871 °C pendant 0.75 s assurait une efficacité de destruction de 98%. Il est toutefois

difficile de déterminer le temps réel pendant lequel les polluants sont maintenus à cette température dans la chambre de combustion, à cause des zones de recirculation et de l'hétérogénéité des températures qui existent dans la chambre. Ces conditions sont-elles trop élevées ou trop faibles pour l'incinération régénérative ? Et qu'en est-il des incinérateurs-torches ou avec récupérateur de chaleur ? Est-il possible d'assurer cette efficacité dans un temps moindre ou sous une température moins élevée ? Quelle influence a le débit de purge ou la température ou la géométrie ou encore le brûleur sur l'efficacité ? L'EPA ne peut répondre à ces questions. C'est pour tenter d'y répondre que l'on simule le phénomène de façon numérique.

La complexité des phénomènes de turbulence et de combustion et la faiblesse des systèmes informatiques nous obligent toutefois à utiliser des modèles pour tenter de reproduire la réalité avec le plus d'exactitude possible. Le modèle de combustion qui semble le plus prometteur pour le cas étudié est celui qui combine le modèle d'Arrhénius et de Magnussen (1982). Il permet d'être sensible au temps, à la température, à la turbulence et aux concentrations en plus d'être adapté aux flammes de pré-mélanges.

Le benzène et le monoxyde de carbone ont été sélectionnés pour représenter la composition des polluants contenus dans les fumées pour les raisons suivantes :

- ils sont extrêmement stables chimiquement;
- ils devraient se retrouver en quantité majoritaire à l'entrée de la chambre;
- ils sont relativement présents dans la littérature;
- leur destruction implique la destruction complète de tous les autres polluants.

La combustion du benzène se fera en deux étapes afin de faire ressortir le monoxyde de carbone comme produits de réaction intermédiaires :

$$\begin{aligned} &C_6H_6 + 4{,}5(O_2 + 3{,}773N_2) \Rightarrow 6CO + 3H_2O + (4{,}5 * 3{,}773)N_2 \\ &6CO + 3(O_2 + 3{,}773N_2) \Rightarrow 6CO_2 + (3 * 3{,}773)N_2 \end{aligned} \qquad (1\text{-}11)$$

Le taux de réaction de type Arrhénius doit respecter cette contrainte additionnelle, soit d'avoir été calculé pour une combustion entraînant ce type de produit de réaction.

L'étape de réaction du monoxyde de carbone qui prédomine réellement dans l'incinérateur est plutôt celle-ci:

$$CO + OH \Rightarrow CO_2 + H \qquad (1\text{-}12)$$

C'est le taux de réaction de l'équation 1-12 qui sera utilisé, mais le calcul des concentrations massiques sera basé sur l'équation 1-11 étant donné que OH et H ne sont pas transportés.

Un taux de réaction différent sera utilisé pour les cellules du maillage se trouvant en face du brûleur, là ou la quantité de radicaux OH est plus importante à cause de la présence de la flamme.

Pour calculer les proportions de chacun des composés à l'entrée de la chambre de combustion, nous poserons comme hypothèses que tous les asphaltènes ($C_nH_{1,35n}$) et les HAP ($C_nH_{0,85n}$) ont été transformés en benzène alors que les COV (C_nH_{2n+2}) et les aliphatiques (C_nH_{2n}) ont totalement été transformés en CO lors de leur passage dans le lit d'entrée. Le CO déjà présent dans les fumées se rajoutera à la quantité de CO produite par les COV et les aliphatiques.

Étant donné qu'il n'existe pas de condition de très haute température dans la chambre de combustion, la quantité de monoxyde d'azote produite devrait être négligeable. Nous la simulerons quand même à l'aide du modèle d'équilibre chimique. Comme ce modèle tend à surestimer la concentration de certains composés chimiques ayant un taux de réaction très lent comme le NO, la concentration calculée constituera la limite supérieure de concentration que l'on pourrait retrouver dans la chambre de combustion. Cette concentration devrait également être moindre à la cheminée puisque le NO se transforme en NO_2, lorsqu'il est refroidi sous les 650 °C.

Nous verrons dans le prochain chapitre le détail des équations de transport ainsi que les équations définissant les différents taux de réaction.

CHAPITRE 2 : FORMULATION MATHÉMATIQUE

LA SIMULATION de l'écoulement réactif dans la chambre de combustion se fait par l'entremise de la résolution par volumes finis des équations de transport discrétisées représentant les différents phénomènes physiques. L'aéraulique est simulée par le transport de la masse et du mouvement. La turbulence est simulée par le modèle k-ε qui fait appel au transport de l'énergie cinétique de turbulence et du taux de dissipation de cette énergie. La combustion nécessite quant à elle le transport de l'énergie (enthalpie), des espèces chimiques réactives ainsi que du taux de mélange.

La solution est obtenue pour le régime permanent sur une géométrie bi-dimensionelle en coordonnés cartésiennes. La première section de ce chapitre traitera des équations de transport alors que la seconde traitera des différents modèles de combustion.

2.1 Équations aérodynamiques de base

Le caractère turbulent de l'écoulement cause une fluctuation de toutes les propriétés du fluide. On décompose généralement une variable instantanée ϕ

en terme de sa valeur locale moyenne $\tilde{\phi}$ (dans le temps) et de sa composante de fluctuation ϕ'' de telle sorte que:

$$\phi = \tilde{\phi} + \phi'' \tag{2-1}$$

La valeur moyenne étant définie par :

$$\tilde{\phi} = \lim_{T \to \infty} \frac{1}{T} \int_t^{t+T} \phi dt \tag{2-2}$$

Par contre, pour tenir compte des effets de la variation de la densité, nous avons plutôt recours à une décomposition pondérée par la masse. Cette décomposition permet une interprétation physique plus directe des grandeurs moyennes (Jones, 1979). On obtient alors la décomposition suivante :

$$\phi = \bar{\phi} + \phi' \tag{2-3}$$

où

$$\bar{\phi} = \lim_{T \to \infty} \frac{1}{T} \int_t^{t+T} \frac{\rho\phi}{\tilde{\rho}} dt \tag{2-4}$$

Les équations décrivant l'aéraulique d'un écoulement turbulent prennent alors la forme suivante en notation tensorielle :

Équation de continuité :

$$\nabla \cdot (\tilde{\rho}\bar{v}) = 0 \tag{2-5}$$

Équations du mouvement :

$$\nabla \cdot (\tilde{\rho}\bar{v} \otimes \bar{v} - \mu_{eff} \nabla \bar{v}) = -\nabla \cdot (\bar{p}G) \tag{2-6}$$

où $\otimes$ symbolise le produit tensoriel et G représente le tenseur métrique. La viscosité effective μ_{eff} est définie par :

$$\mu_{eff} = \mu + \mu_t \tag{2-7}$$

où μ est la viscosité laminaire et μ_t la viscosité turbulente qui s'exprime dans le cadre du modèle de turbulence $k-\varepsilon$ par :

$$\mu_t = C_\mu \tilde{\rho} \frac{\bar{k}^2}{\bar{\varepsilon}} \tag{2-8}$$

Le modèle de turbulence $k-\varepsilon$ permet d'obtenir des résultats suffisamment précis sans toutefois nécessiter trop de temps de calcul. Ce modèle nécessite le transport des deux équations suivantes :

Équation de l'énergie cinétique de turbulence :

$$\nabla \bullet \left[\tilde{\rho} \bar{v} \bar{k} - \frac{\mu_{eff}}{\sigma_k} \nabla \bar{k} \right] = (P_k - \tilde{\rho}\, \bar{\varepsilon}) \tag{2-9}$$

Équation du taux de dissipation de l'énergie cinétique de turbulence:

$$\nabla \bullet \left[\tilde{\rho} \bar{v} \varepsilon - \left(\frac{\mu_{eff}}{\sigma_\varepsilon} \right) \nabla \bar{\varepsilon} \right] = \frac{\bar{\varepsilon}}{\bar{k}} \left(C_{\varepsilon 1} P_k - C_{\varepsilon 2} \tilde{\rho}\, \bar{\varepsilon} \right) \tag{2-10}$$

Le terme P_k représente la production de l'énergie cinétique de turbulence. Il est défini par :

$$P_k = 2\mu_t \ \mathrm{tr}\,(DD) = 2\mu_t \ D_{ij} D_{ij} \tag{2-11}$$

où D représente le tenseur des taux de déformation et tr() symbolise l'opérateur trace.

Les constantes utilisées pour ce modèle de turbulence sont les suivantes :

σ_k	σ_ε	$C_{\varepsilon 1}$	$C_{\varepsilon 2}$	C_μ
1,0	1,3	1,44	1,92	0,09

Le modèle $k-\varepsilon$ n'étant valide que dans les régions où le nombre de Reynolds est élevé, il ne s'applique donc pas au voisinage des parois solides où les effets visqueux prédominent. On utilise alors une loi de paroi qui modélise le frottement imposé par la paroi sur le fluide (Rida, 1993). Cette loi permet de calculer la vitesse ainsi que les valeurs de k et ε à la frontière du domaine où s'applique le modèle $k-\varepsilon$. Le domaine de calcul ne comprend donc pas cette mince couche limite située le long des parois solides. Certains utilisateurs de ce modèle déplacent la frontière de leur domaine de calcul afin qu'elle coïncide avec l'interface entre la couche limite et le régime pleinement turbulent. Ce déplacement de la paroi présente des avantages et des désavantages. Il permet une meilleure représentation du profil de vitesse. En effet, la vitesse sur la paroi physique du domaine doit être nulle à cause du frottement. Si la paroi n'est pas déplacée et que la loi de paroi calcule une vitesse sur la frontière, la conservation de la masse conduira la vitesse maximale sur le profil à être plus faible qu'en réalité. On ne peut toutefois pas déplacer la paroi sans créer de discontinuités lorsque l'on veut faire varier l'épaisseur de la couche limite le long d'une paroi continue. Pour éviter les problèmes de discontinuités, la paroi ne sera pas déplacée pour les solutions obtenues dans le cadre de ce mémoire.

2.2 Modèles de combustion

Lorsque se produit une réaction chimique dans un écoulement, il y a toujours dégagement ou absorption de chaleur. Ce passage d'une forme d'énergie à

une autre, soit de chimique à thermique, entraîne une modification de certain paramètres. La réaction chimique modifie la température et les concentrations massiques des composés présents. Ces deux paramètres affectent la densité du mélange par l'intermédiaire de l'équation d'états représenté par l'équation suivante:

$$\tilde{\rho} = \frac{\tilde{p}}{R\overline{T}\sum_{i=1}^{N}\overline{m}_i} \qquad (2\text{-}12)$$

où R est la constante universelle des gaz et m_i est la concentration massique du composé i en kmol/kg. L'indice N représente le nombre total de composés chimiques présents dans le gaz.

La densité influence à son tour toute les équations de transports tels la turbulence, le mouvement et l'énergie. Le lien entre la combustion et l'aérolique de l'écoulement turbulent est donc réalisé par l'intermédiaire de la densité.

Pour calculer ce paramètre important qu'est la densité, on doit connaître la pression (p), la concentration massique de chacun des composés chimiques (m_i) ainsi que la température du mélange gazeux. La pression est à peu près constante dans la chambre de combustion. Elle oscille autour de 1 atm (101,325 kPa). Le méthode utilisée pour calculer les concentrations massiques est expliquée dans les prochainee sous-sections. Quant au calcul de la température, il se fait par l'intermédiaire de l'enthalpie. En posant comme hypothèse que le modèle des gaz parfaits s'applique à l'écoulement réactif dans la chambre de combustion, on peut relier directement la chaleur spécifique et l'enthalpie d'un gaz à sa température. La chaleur spécifique et l'enthalpie sont respectivement reliées à la température par un polynôme de degré 4 et 5. Ces polynômes, propres à chacun des composés chimiques, ont été récupérés de Gordon et Mcbride (1971). Puisque la relation entre l'entalpie et la température

est non-linéaire, on calcule la température pour une enthalpie donnée à l'aide de la méthode itérative de Newton-Raphson.

Étant donné que l'enthalpie spécifique est une propriété intensive, on peut utiliser une équation de transport pour analyser son évolution dans la chambre de combustion.

Équation de transport de l'enthalpie :

$$\nabla \bullet \left[\tilde{\rho}\overline{v}\overline{h} - \frac{\mu_{eff}}{\sigma_h} \nabla \overline{h} \right] = \overline{S} \qquad (2\text{-}13)$$

où $\overline{S}$ représente la source d'enthalpie.

Lorsque le système est adiabatique, le terme source est nul. Sinon, ce terme source peut représenter un gain ou une perte d'enthalpie comme par exemple le transfert de chaleur par rayonnement, les pertes de chaleur à travers les parois ou une source ponctuelle de chaleur provenant d'un brûleur. Pour diminuer la complexité et puisqu'ils sont négligeables dans le cas étudié ici, on néglige le rayonnement et les pertes à travers la paroi. On doit par contre tenir compte de l'énergie provenant du brûleur. Lorsque le brûleur se situe à la frontière du domaine de calcul, on peut imposer à cette frontière la quantité de masse et d'enthalpie qui provient du brûleur. Par contre, lorsque le brûleur projette ces gaz au centre du domaine de calcul comme c'est le cas dans cette étude, on tient compte de cette source additionnelle d'enthalpie en l'incluant dans le terme source ($\overline{S}$).

La source additionnelle d'enthalpie porte les unités de kW/m^3. Elle correspond au taux de chaleur transféré à la masse de fluide se trouvant en face du brûleur. On la calcule de la façon suivante :

$$\overline{S} = \frac{(\overline{h}_p - \overline{h}_r)\dot{m}}{AL} \qquad (2\text{-}14)$$

où $\overline{h}_p$ est l'enthalpie spécifique des produits de combustion du brûleur à la température des fumées où se décharge le brûleur, $\overline{h}_r$ est l'enthalpie spécifique des réactifs au brûleur à la température de la conduite de gaz, $\dot{m}$ est le débit massique au brûleur, A est la section du brûleur et L est la longueur de pénétration de la flamme dans la chambre.

Une simulation tridimensionnelle n'aurait pas nécessité de modéliser l'apport d'enthalpie provenant du brûleur par un terme source puisque le brûleur aurait été localisé à la frontière du domaine de calcul.

La formulation de l'équation de transport de l'enthalpie donnée par l'équation (2-13) suppose que la diffusion turbulente de l'énergie cinétique de turbulence et de l'énergie cinétique du fluide sont négligeables devant celle de l'enthalpie. On pose également comme hypothèse que les constantes que l'on retrouve au dénominateur des coefficients de diffusions, i.e. les nombres de Schmidt et de Prandtl, sont toutes égales.

2.2.1 Taux de réaction fini

Le calcul des concentrations massiques dépend du modèle de combustion utilisé. Dans le cas du modèle à taux de réaction fini, le calcul se fait par le

transport du taux de mélange, le transport des combustibles, et l'équilibrage stœchiométrique des équations de réactions.

Équation de transport du taux de mélange :

$$\nabla \bullet \left[\tilde{\rho} \bar{v} \bar{f} - \frac{\mu_{eff}}{\sigma_f} \nabla \bar{f} \right] = 0 \qquad (2\text{-}15)$$

Cette dernière équation n'est utile que lorsqu'il y a deux entrées de mélanges gazeux. Elle permet de déterminer la répartition initiale des concentrations de tous les composés chimiques dans la chambre de combustion avant que n'ait lieu toute réaction chimique. Ceci suppose que les composés chimiques présentent tous le même nombre de Schmidt (σ_f). En posant que f=1 à l'entrée 1 et f=0 à l'entrée 2, on exprime la concentration initiale en tout point de la façon suivante :

$$\bar{m}_{i,init} = \bar{m}_{i,1} \bar{f} + \bar{m}_{i,2} \left(1 - \bar{f}\right) \qquad (2\text{-}16)$$

où i indique le composé et l'indice suivant, le type de condition.

Équation de transport des combustibles :

$$\nabla \bullet \left[\tilde{\rho} \bar{v} \bar{m}_i - \frac{\mu_{eff}}{\sigma_m} \nabla \bar{m}_i \right] = \bar{R}_i \qquad (2\text{-}17)$$

Un test à chaque nœud du maillage est réalisé à l'aide de l'équation (2-18) pour déterminer lequel des taux de réaction de Magnussen et d'Arrhénius contrôle la réaction.

$$R_i = \min\left(R_{Magn}, R_{arh}\right) \qquad (2\text{-}18)$$

Le tableau ci-dessous résume les taux de réactions Arrhénius (R_{arh}) utilisés pour les équations transportant les combustibles.

Tableau 2-1 : Taux de réaction Arrhénius pour les combustibles

Composé chimique	Conditions d'opérations	Taux de réaction (R_{arh})
Benzène	Absence de flamme	$-Ae^{\frac{-E}{R\tilde{T}}}\tilde{\rho}\overline{m}_{C_6H_6}$ (2-19)
		A=7,43x10^{21}, E=95900, R=1,987
	Présence de flammes	$-Ae^{\frac{-E}{\tilde{T}}}\tilde{\rho}^2\overline{m}_{C_6H_6}\overline{m}_{O_2}$ (2-20)
		A=9x10^{10}, E=15300
CO	Absence de flamme	$-Ae^{\frac{-E}{R\tilde{T}}}\tilde{\rho}\overline{m}_{CO}\left(\tilde{\rho}\overline{m}_{O_2}\right)^{0,25}\left(\tilde{\rho}\overline{m}_{H_2O}\right)^{0,5}$ (2-21)
		A=10$^{13.6-3*0.75}$, E=40000, R=1,987
	Présence de flammes	même qu'en absence de flamme
		A=10$^{14.6-3*0.75}$, E=40000, R=1,987

Le taux de réaction du Benzène en absence de flamme comprend également un délai d'allumage en seconde exprimé sous la forme suivante :

$$\text{délai} = 2,59 - 0,00178T \qquad (2\text{-}22)$$

où T est en °F.

Il n'y a aucune réaction du benzène tant que le temps de résidence du benzène est inférieur au délai calculé par l'équation (2-22). La température utilisée dans cette équation correspond à la moyenne arithmétique entre la température au point de calcul et celle à l'entrée des fumées. Puisque la formulation lagrangiène n'est pas utilisée, on calcule le temps de résidence en divisant le trajet linéaire parcouru par les fumées depuis leur entrée par la vitesse à l'entrée. Ce trajet pour une entrée verticale consiste au maximum entre le trajet vertical entre le point et l'entrée des fumées, et la distance linéaire entre le point et le coin de l'entrée située le plus près de l'aval de l'écoulement (figure 2-1). Si ce point d'évaluation se trouve en amont du coin de l'entrée par rapport à la direction générale de l'écoulement, le trajet retenu est celui du trajet vertical (figure 2-2).

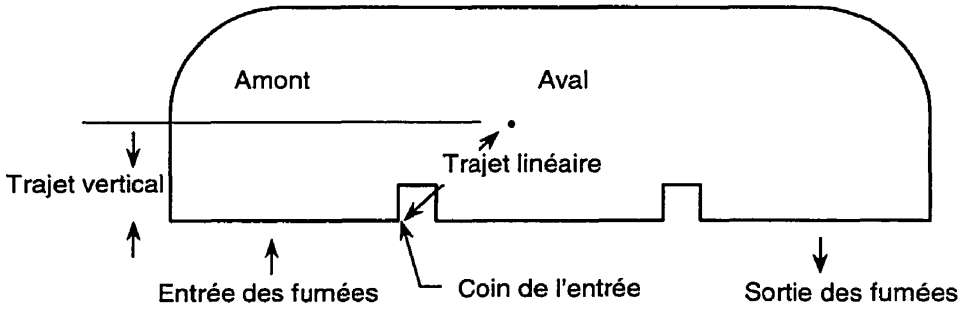


Figure 2-1 : Exemple 1 de calcul du temps de résidence

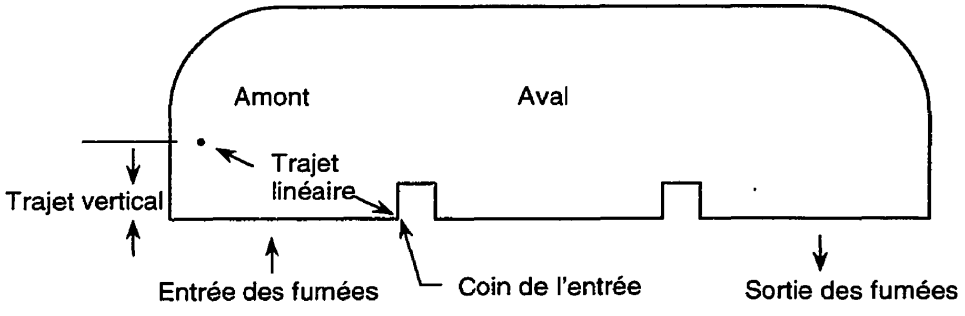


Figure 2-2 : Exemple 2 de calcul du temps de résidence

Lorsqu'il y a présence de benzène dans les fumées, il faut rajouter le taux de production de CO au taux de destruction de CO. Selon l'équation (1-11) reproduite ci-dessous, le terme source prend alors la forme suivante :

$$R_{co} = R_{co} - 6 \cdot R_{C_6H_6} \qquad (2\text{-}23)$$

$$\begin{aligned} &C_6H_6 + 4{,}5(O_2 + 3{,}773N_2) \Rightarrow 6CO + 3H_2O + (4{,}5 * 3{,}773)N_2 \\ &6CO + 3(O_2 + 3{,}773N_2) \Rightarrow 6CO_2 + (3 * 3{,}773)N_2 \end{aligned} \qquad (1\text{-}11)$$

Afin de tenir compte de l'influence de la turbulence sur le taux de réaction, le taux de réaction selon Magnussen (Hjertager et Magnussen, 1982) sera mis à profit :

$$R_{Magn} = -\frac{\overline{m}_{i,init} - \overline{m}_i}{\overline{m}_{i,init}} 4\tilde{\rho} \frac{\overline{\varepsilon}}{\overline{k}} \min\left(\overline{m}_i, \frac{\overline{m}_{O_2}}{s} \right) \qquad (2\text{-}24)$$

où le rapport $\dfrac{\overline{m}_{i,init} - \overline{m}_i}{\overline{m}_{i,init}}$ (2-25)

représente la fraction de gaz brûlé par rapport à la concentration initiale de gaz. C'est ce rapport qui permet de tenir compte de l'influence de la turbulence sur le mélange des gaz brûlés et non-brûlés dans une flamme de pré-mélange. Ce rapport est toutefois nul à l'entrée car aucun gaz n'est encore brûlé. Seule la présence d'une zone de recirculation immédiatement après l'entrée peut ramener suffisamment de gaz brûlés pour engendrer l'oxydation et assurer la stabilité de la flamme. Dans le cas où l'oxydation se fait en dehors des limites d'inflammabilité, il n'y a aucune flamme et l'oxydation ne démarre pas. Le même phénomène se produit lorsque la stabilité est assurée par un pilote. Pour éviter que le taux de réaction de Magnussen soit nul partout dans le domaine, une valeur minimum de 5% sera imposée au rapport lorsque son calcul donne une valeur inférieure à 5% de gaz brûlés.

Une fois la concentration des combustibles recalculée à chaque nœud du maillage, la concentration des autres composés (O_2, N_2, CO_2, H_2O) est déterminée par équilibrage stœchiométrique à l'aide de l'équation (1-11) et de l'équation (2-16). Les produits de réaction tels CO, CO_2, H_2O qui sont présents à l'entrée de la chambre de combustion n'ont pas été inclus dans l'équation (1-11) simplement pour des fins de clarté de lecture.

Les constantes de diffusion utilisées dans les équations de transport sont les suivantes :

σ_h	σ_f	σ_m
0,7	0,7	0,7

2.2.2 Chimie infiniment rapide

Le modèle de combustion basé sur la chimie infiniment rapide ne nécessite que le transport du taux de mélange et ce, seulement s'il y a plus d'une entrée de mélange gazeux. Une fois les concentrations initiales établies à l'aide de cette équation de transport, on détermine les produits par simple équilibrage stœchiométrique tel qu'illustré par les équations (2-26) à (2-30)

En posant :

$$aCO + bH_2 + cC_iH_jO_k + dO_2 + eCO_2 + fH_2O + g(O_2 + 3{,}773N_2) \Rightarrow tC_iH_jO_k + uCO_2 + vH_2O + wN_2 + xO_2 + yCO + zH_2 \qquad (2\text{-}26)$$

on obtient pour l'oxygène :

$$x = d + g - \left(i + \frac{j}{4} - \frac{k}{2}\right)c - \left(\frac{a+b}{2}\right) \qquad (2\text{-}27)$$

Si $x \geq 0$ alors le mélange est pauvre et on obtient :

$$
\begin{aligned}
t &= y = z = 0 \\
u &= a + ic + e \\
v &= b + \frac{j}{2}c + f \\
w &= 3{,}773g
\end{aligned}
\qquad (2\text{-}28)
$$

Si $x < 0$ alors le mélange est riche et x représente la quantité d'air nécessaire pour brûler le combustible excédentaire. On obtient pour le combustible non-brûlé :

$$
\begin{aligned}
t &= -\frac{\delta x}{\frac{\alpha+\beta}{2} + \left(i + \frac{j}{4} - \frac{k}{2}\right)\delta} \\
z &= -\frac{\beta x}{\frac{\alpha+\beta}{2} + \left(i + \frac{j}{4} - \frac{k}{2}\right)\delta} \\
y &= -\frac{\alpha x}{\frac{\alpha+\beta}{2} + \left(i + \frac{j}{4} - \frac{k}{2}\right)\delta}
\end{aligned}
\qquad (2\text{-}29)
$$

où δ, α et β représentent respectivement les proportions de $C_iH_jO_k$, CO et H_2 par rapport à la quantité totale de combustible dans les réactifs. Ceci suppose que les proportions des différents combustibles demeurent les mêmes tout au long de la réaction. Un modèle plus réaliste pourrait favoriser en premier la combustion du H_2.

Les concentrations des autres produits de réaction sont déterminées de la façon suivante :

$$u = a + i(c - t) + e - y$$

$$v = b + f - z + \frac{j}{2}(c - t)$$

$$w = 3{,}773g \qquad (2\text{-}30)$$

$$x = 0$$

2.2.3 Équilibre chimique

Les équations de ce modèle sont basées sur la conservation de la masse des différents réactifs ainsi que sur la minimisation de l'énergie libre de Gibbs, h-Ts, où h est l'enthalpie, T est la température et s est l'entropie du système. L'équilibre chimique est obtenu lorsque l'énergie libre de Gibbs du système est à son minimum. La détermination des concentrations des produits de réactions posés comme potentiellement présents dans les produits se fait par la résolution du système à (N+L+1) équations non-linéaires (Heywood, 1988; McKenty, 1992) donné à la page suivante.

$$\sum_{j=1}^{N} a_{ij} n_j - b_i^0 = 0 \qquad \text{où} \quad i \in [1, L]$$

$$\frac{\mu_j^0}{RT} + \ln\left[\frac{n_j}{n}\right] + \ln\left[\frac{P}{P_0}\right] + \sum_{i=1}^{L} \frac{\lambda_i}{RT} a_{ij} = 0 \qquad \text{où } i \in [1, N]$$

(2-31)

$$n = \sum_{j=1}^{N} n_j$$

où N = nombre de composés chimiques dans les produits

L = nombre d'atomes différents présents dans la réaction

a_{ij} = nombre d'atomes de l'élément *i* dans le composé *j*

b_i^0 = nombre d'atomes de l'élément *i* dans les réactifs

b_i = nombre d'atomes de l'élément *i* dans les produits

n_j = nombre de moles du composé *j* dans les produits

μ_j^0 = potentiel chimique du composé *j*

p = pression

λ_i = multiplicateur de Lagrange

Les inconnus de ce système sont les n_j, n et λ_i

Les N=8 composés sélectionnés pour cette étude sont le C_6H_6, CO, CO_2, O2, H2O, H_2, NO et NO_2.

Le modèle sera utilisé pour déterminer la quantité de NO présent dans des conditions hypothétiques d'équilibre chimique dans la chambre de combustion.

2.3 Conditions frontières et résolution

Des conditions de Neumann nulles (dérivé normale à la paroi nulle) sont imposées à la sortie et sur toutes les parois solides de toutes les variables transportées sauf u, v, k et ε où une condition de Dirichlet est imposée sur les parois solides à l'aide de la loi de paroi. Les conditions à l'entrée sont de type Dirichlet pour toutes les variables. Les valeurs de k et ε à l'entrée sont données par :

$$k_{entrée} = \frac{3}{2} I^2 u_{entrée}^2 \quad = \lambda u_{entrée}^2$$

$$\varepsilon_{entrée} = C_\mu \frac{k_{entrée}^{3/2}}{L D_H} \qquad (2\text{-}32)$$

où I caractérise l'intensité de turbulence, L est un facteur de proportionnalité de la longueur de mélange et D_H est le diamètre hydraulique à l'entrée. Pour le cas étudié ici, la valeur de λ à été posée à 0.003 et celle de L à 0.03.

La résolution est effectuée par une méthode de volumes finis sur des maillages non-strucurés triangulaires. Les variables sont définies sur le centre des faces des éléments sauf la pression qui est définie au centre de l'élément. Les variables sont interpolées sur le volume de contrôle par une fonction linéaire pour le terme de diffusion et par une fonction pondérée par la masse pour le terme de convection. La résolution des variables u, v et p est effectuée par un système d'équations couplées de façon à optimiser le temps de calcul. La résolution de toutes les autres équations de transport est effectuée de manière découplée. Étant donné que les équations sont non-linaires et qu'en plus, la majorité des variables ont une influence l'une sur l'autre, le système général

d'équations est implicite et plusieurs itérations sont nécessaires avant d'atteindre la solution. Une relaxation des corrections sur les variables permet d'assurer la stabilité et la convergence de la solution au prix toutefois d'un temps de calcul plus long.

2.4 Conclusion

Les équations présentées dans ce chapitre permettent de résoudre tout problème d'écoulement permanent bi-dimensionel, turbulent ou laminaire, dans lequel une oxydation de benzène ou de CO se produit sous la forme d'une flamme de pré-mélange.

Le modèle aéraulique a déjà été validé par Rida (1993). Les modèles de combustion doivent toutefois être validés sur des flammes de pré-mélange. Le prochain chapitre traitera de la validation des modèles sur des écoulements réactifs de CO et de propane. L'équation du taux de réaction Arrhénius pour le propane n'a pas été présentée dans le présent chapitre puisqu'elle ne sera utilisée que pour démontrer la validité du modèle dans son ensemble. Les modèles de chimie infiniment rapide et d'équilibre chimique ne seront pas validés sur un écoulement réactif mais plutôt sur un problème statique de réaction chimique qui sera également traité au prochain chapitre.

CHAPITRE 3 : VALIDATION DES MODÈLES DE COMBUSTION

LES MODÈLES MATHÉMATIQUES présentés au chapitre précédent ont pour but de simuler un écoulement réactif dans une chambre de combustion d'un incinérateur régénératif. Toutefois, avant de pouvoir effectuer ces simulations, il faut s'assurer de la validité des modèles. Rien ne sert de tirer des conclusions sur les résultats apportés par une méthode qui n'a pas fait ses preuves. Les modèles aérauliques et turbulents utilisés dans ce projet de maîtrise ont déjà été validés par Rida (1993) et implanté dans le logiciel nommé VF. Les modèles de combustion applicables aux flammes de pré-mélanges et annexés au logiciel VF doivent toutefois être validés sur des solutions obtenues de façon expérimentale ou numérique. Le présent chapitre répond à cet impératif en présentant deux cas-tests où le modèle de taux de réaction fini est validé sur des solutions à la fois numériques et expérimentales. Quant aux modèles de chimie infiniment rapide et d'équilibre chimique, ils sont validés sur une réaction statique de combustion du méthane.

3.1 Taux de réaction fini : combustion du CO humide

La réaction simulée par cette expérience, soit la combustion du CO en présence de vapeur d'eau, se produit en une seule étape. Les produits de réaction obtenus sont le CO, l'air, l'eau et le CO_2. Il n'y a aucune production de CO.

3.1.1 description du problème

La figure 3-1 illustre le premier problème sur lequel le modèle est validé. Il s'agit d'un écoulement turbulent dans une chambre de combustion cylindrique (« turbulent flow reactor ») tiré de Westbrook et al. (1977).

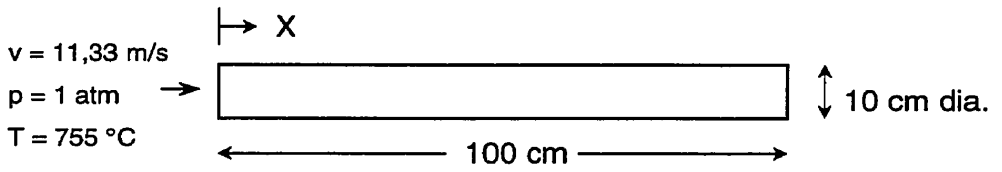


Figure 3-1 : Chambre de combustion cylindrique

Les concentrations à l'entrée sont données au tableau 3-1. Ces concentrations ont été estimées par Westbrook et al (1977) mais l'expérience a été réalisée par Dryer et Glassman (1973). Dans cette expérience, le CO est injecté de façon radiale par rapport à l'écoulement principal d'air chaud et de vapeur d'eau, dans une tuyère en amont de la section cylindrique de la chambre de combustion. Le mélange se fait très rapidement grâce à l'état turbulent de l'écoulement principal et les concentrations données dans le tableau 3-1 représentent la composition du mélange gazeux à une distance d'environ 25 cm après l'injection du CO. Les paramètres d'entrée de la figure 3-1 correspondent également aux

conditions existant à cette position de 25 cm. L'oxydation de type pré-mélange se développe ensuite sur une distance d'environ 85 cm.

Tableau 3-1 : Composition du mélange gazeux à l'entrée

composé	fraction molaire (%)
CO	1,233
O_2	20,51
N_2	75,642
CO_2	0,135
H_2O	2,48

Les parois du tube cylindrique sont maintenues à la température de l'écoulement principal à l'entrée, soit une température de 755 °C. Le système n'est donc pas tout à fait adiabatique. Il existe un léger flux de chaleur qui s'intensifie à mesure que la réaction évolue dans la chambre de combustion. Ce flux de chaleur est toutefois négligeable par rapport à l'énergie contenue dans le mélange gazeux et celle dégagée par la réaction chimique. Le système sera donc traité comme étant adiabatique. La figure 3-2 illustre le maillage utilisé pour la résolution de ce problème. Il comporte 2300 nœuds et 4356 éléments triangulaires. Il s'agit d'un maillage triangulaire structuré irrégulier.

Figure 3-2 : Maillage de la chambre de combustion utilisé pour la validation

On remarque sur ce maillage qu'il est plus raffiné sur la paroi supérieure que sur la frontière inférieure. Ce raffinement est justifié par l'évolution rapide des propriétés le long de la paroi, i.e. à la transition entre la couche limite et la zone pleinement turbulente. Le maillage sur la paroi inférieure ne présente pas la

même allure puisqu'une condition d'axi-symétrie existe sur cette frontière. La vrai géométrie du problème est générée en faisant révolutionner ce maillage de 360° autour d'un axe de symétrie horizontale. Cette technique permet ainsi de résoudre fidèlement un problème tridimensionnel en deux dimensions.

3.1.2 Solution numérique et analyse des résultats

L'absence de production de CO facilite la résolution de l'équation de transport du CO. Ainsi, un facteur de relaxation de seulement 30% sur l'équation de transport du CO est nécessaire pour assurer la stabilité de la solution. Tel qu'il sera constaté plus loin, la production de CO déstabilise la solution et un facteur de relaxation de l'ordre du 1% est nécessaire dans ce dernier cas. La figure 3-3 illustre le champ de vecteurs-vitesse dans la chambre de combustion du réacteur alors que la figure 3-4 illustre les isolignes de concentration de CO.

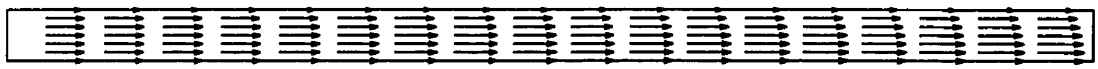


Figure 3-3 : Champs de vecteurs-vitesse dans le réacteur

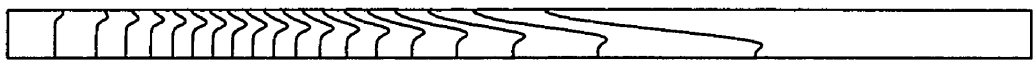


Figure 3-4 : Isolignes de concentration de CO dans le réacteur

Les figures 3-5 à 3-7 présentent la variation de trois paramètres en fonction de leur position sur l'axe de symétrie. Ces trois paramètres sont respectivement la fraction molaire de CO_2, la fraction molaire de CO et la température. Sur ces mêmes figures, on observe les résultats expérimentaux obtenus par Dryer et Glassman (1973) et les résultats numériques obtenus par Westbrook et al (1977). Les résultats de Westbrook et al (1977) ont été obtenus par la

combinaison d'un modèle unidimensionnel et d'un modèle à dimension nulle faisant intervenir 28 réactions chimiques élémentaires. Les résultats expérimentaux de Dryer et Glassman (1973) ont été tirés de l'article de Westbrook et al (1977).

Ces trois figures (3-5 à 3-7) illustrent les résultats obtenus en utilisant uniquement le modèle Arrhénius (équation 2-21 en présence de flamme), uniquement le modèle de Magnussen (équation 2-24) et la combinaison des deux modèles (équation 2-18). Même si la concentration du CO à l'entrée est en dehors des limites d'inflammabilité soit 1,233% versus 7,4% pour la limite inférieure, la constante A de l'équation (2-21) a été choisie en fonction d'une combustion en présence de flamme. Dryer et Glassman (1973), qui ont établi cette constante sur l'expérience décrite ici, estiment que la concentration de OH dans la chambre de combustion est de deux ordres de grandeur supérieure à celle existant à l'équilibre chimique. Cette concentration élevée de radicaux OH que l'on retrouve généralement sous des conditions où il y a présence de flamme pourrait s'expliquer par la présence de H_2O dans le mélange gazeux. l'eau sous forme vapeur réagit en effet avec les atomes de O et de H pour former des radicaux OH (Westbrook et al, 1977). Ceci pourrait avoir comme influence de diminuer la limite inférieure d'inflammabilité du CO.

$$R_{Arrh} = -Ae^{\frac{-E}{R\overline{T}}}\tilde{\rho}\overline{m}_{CO}\left(\tilde{\rho}\overline{m}_{O_2}\right)^{0,25}\left(\tilde{\rho}\overline{m}_{H_2O}\right)^{0,5} \qquad (2\text{-}21)$$

$A=10^{14.6-3*0.75}$ en présence de flamme et $10^{13.6-3*0.75}$ en absence de flamme

$$R_{Magn} = -\frac{\overline{m}_{i,init} - \overline{m}_i}{\overline{m}_{i,init}} 4\tilde{\rho}\frac{\overline{\varepsilon}}{\overline{k}}\min\left(\overline{m}_i, \frac{\overline{m}_{O_2}}{s}\right) \qquad (2\text{-}24)$$

$$R_i = \min\left(R_{Magn}, R_{arrh}\right) \qquad (2\text{-}18)$$

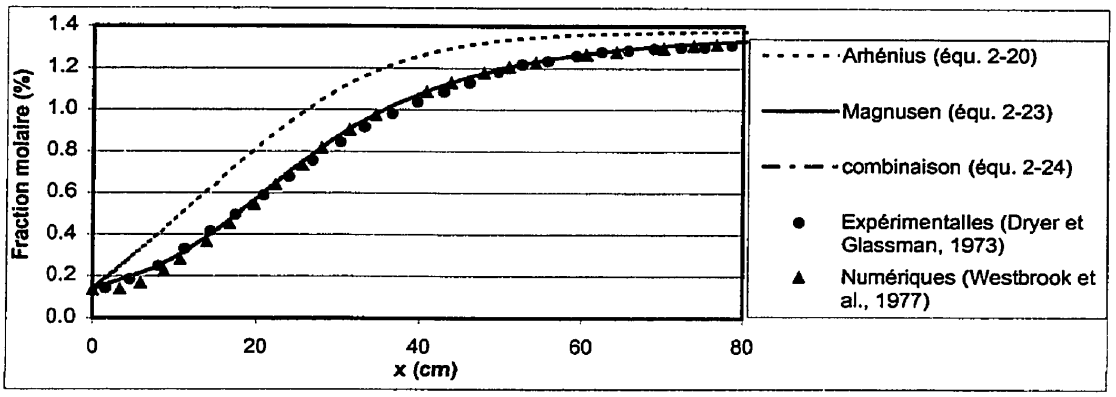


Figure 3-5 : Fraction molaire du CO2 en fonction de la position sur l'axe de symétrie

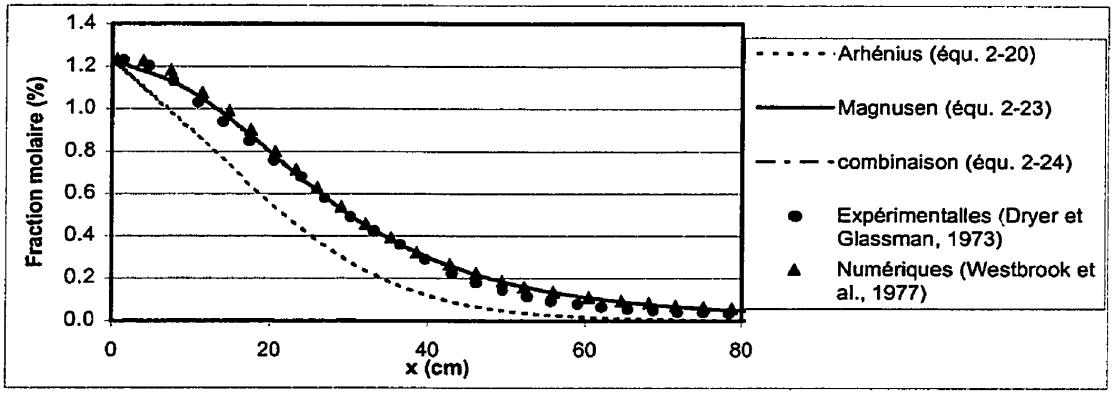


Figure 3-6 : Fraction molaire du CO en fonction de la position sur l'axe de symétrie

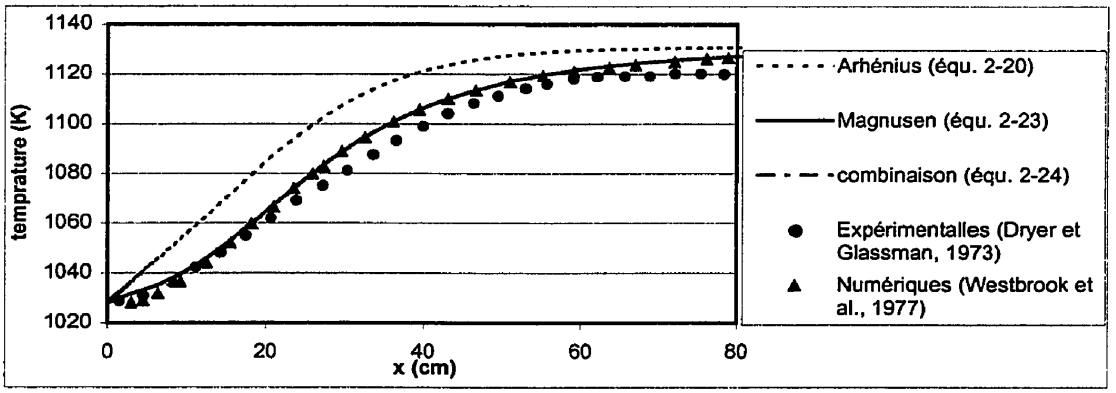


Figure 3-7 : Température en fonction de la position sur l'axe de symétrie

On observe tout d'abord sur les figures 3-5 à 3-7 une excellente concordance entre les résultats numériques faisant intervenir la combinaison des deux taux de réaction fini, et les résultats expérimentaux et numériques de la littérature. Le modèle Arrhénius surestime dans ce cas-ci le taux de réaction du CO. Les résultats obtenus avec le modèle de Magnussen ne sont pas visibles sur ces graphiques puisqu'ils sont superposés avec les résultats obtenus par la combinaison des deux modèles de taux de réaction fini. La réaction est donc contrôlée presque uniquement par la turbulence du mélange gazeux. Le pourcentage des nœuds ou le taux de réaction à été contrôlé par la turbulence est de 86.7%. De plus, 100% des nœuds situés sur l'axe de symétrie ont vu leur taux de réaction contrôlé par la turbulence.

Tel que l'indique l'équation 1-1 : $[m]=[m_0]\exp[-A t\exp(-E/RT)]$ (1-1)
le taux de réaction fini de type Arrhénius est très dépendant de la température. Dans le but d'observer cette dépendance et de vérifier si la réaction est toujours contrôlée par la turbulence, un essai présentant les mêmes conditions mais avec une température d'entrée plus basse (690°C au lieu de 755°C) a été réalisé par l'auteur. Dans cet essai réalisé avec la combinaison des deux taux de réaction (équation 2-18), seulement 0,4% des nœuds présentaient un taux de réaction contrôlé par la turbulence. La réaction était donc dans ce cas presque uniquement contrôlée par la cinétique de la réaction chimique. On voit ici l'importance d'utiliser l'équation 2-18 afin de faire intervenir les deux types de taux de réaction fini puisqu'on peut difficilement prévoir d'avance quelle sera l'étape déterminante de la réaction. De plus, ce contrôle peut très bien différer d'un endroit à un autre sur le domaine de calcul. Les figures 3-8 et 3-9 illustrent respectivement l'influence d'une baisse de 65°C sur la concentration de CO ainsi que sur la température dans la chambre de combustion. On remarque sur la figure 3-8 qu'une baisse de 65°C à l'entrée fait passer le taux de destruction du CO de 96 % à 62 % sur la région étudiée.

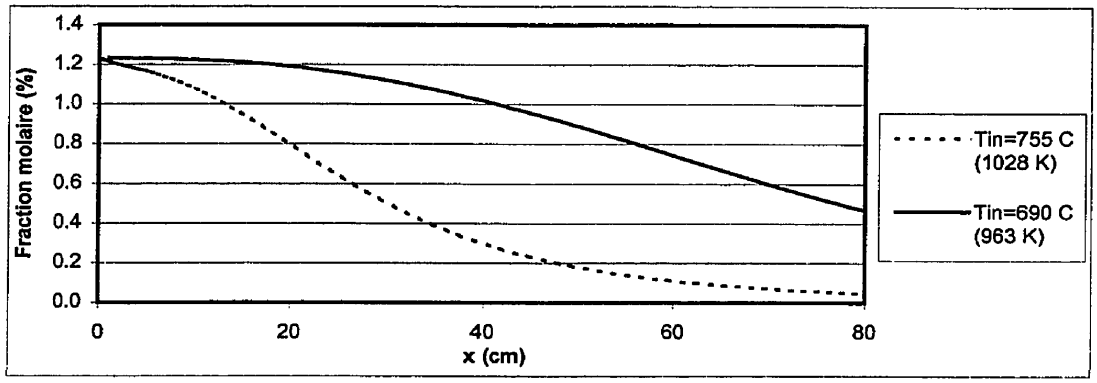


Figure 3-8 : Influence de la température d'entrée sur la concentration de CO

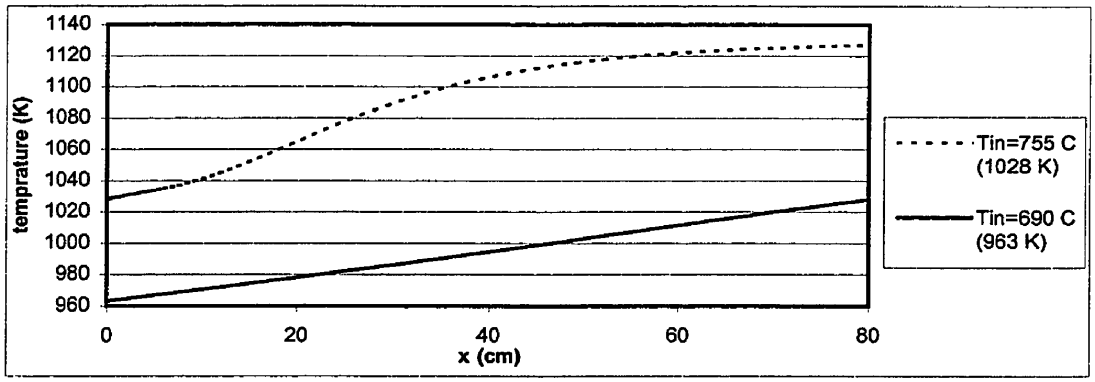


Figure 3-9 : Influence de la température d'entrée sur la température dans la chambre

On remarque également sur la figure 3-7 que le système n'est pas tout à fait adiabatique. Les températures supérieures obtenues par le modèle numérique de l'auteur et de Westbrook et al. (1977) par rapport aux valeurs expérimentales s'expliquent par la présence d'un léger flux de chaleur vers l'extérieur de la chambre de combustion qui n'a pas été simulé par les modèles numériques. La différence à la sortie n'est toutefois que de 7°C. Cette faible différence vérifie l'hypothèse posée en début de chapitre.

Il a été mentionné à la sous-section 2.2.1 qu'un plancher minimum de 5% est imposé au rapport de combustible brûlé sur combustible initial, défini par l'équation (2-25) :

$$\frac{\overline{m}_{i,init} - \overline{m}_i}{\overline{m}_{i,init}} \tag{2-25}$$

On retrouve ce rapport de concentration dans l'équation (2-24) qui décrit le taux de réaction de Magnussen. Cette équation est d'ailleurs rapportée dans les premières pages de la présente sous-section. Rappelons que le but de cette imposition est de s'assurer que la réaction d'oxydation s'enclenche même s'il n'y a pas de flamme pilote ou de zone de recirculation située immédiatement après la zone d'injection. Cette imposition d'une valeur minimum de 5% semble raisonnable comme artifice puisque moins de 4% du domaine de calcul est affecté par cette mesure. En effet, seuls les nœuds présents dans les quatre premiers centimètres du réacteur sont affectés par cette imposition.

3.2 Taux de réaction fini : combustion du propane

La réaction simulée par ce deuxième cas-test de validation se produit également en une seule étape. Il s'agit de la combustion du propane où les produits de réaction obtenus sont le propane, l'air, l'eau et le CO_2. Il n'y a aucune production de CO puisque le taux de réaction de type Arrhénius utilisé pour la combustion du propane a été modélisé en posant l'hypothèse d'une combustion complète du propane.

3.2.1 Description du problème

Ce cas-test simule la combustion stœchiométrique d'une flamme de pré-mélange de propane-air dans une conduite rectangulaire. Le profil de vitesse à l'entrée de la chambre est uniforme et la flamme est retenue par un stabilisateur de flamme cylindrique. L'intensité de la turbulence à l'entrée est de 0,3%. Les parois de la chambre sont refroidis à l'eau mais selon Cushing et al.(1967), les pertes de chaleur à travers ces parois sont négligeables. Spalding a imposé pour sa simulation une température modérée sur les parois sans toutefois mentionner la valeur de cette température. Pour la simulation effectuée dans cette étude, l'hypothèse d'une paroi adiabatique a été utilisée. Cette hypothèse engendre de légères erreurs mais elles ne sont pas suffisamment élevées pour fausser les résultats. La description de cette expérience réalisée par Howe et al. (1963) est illustrée à la figure 3-10.

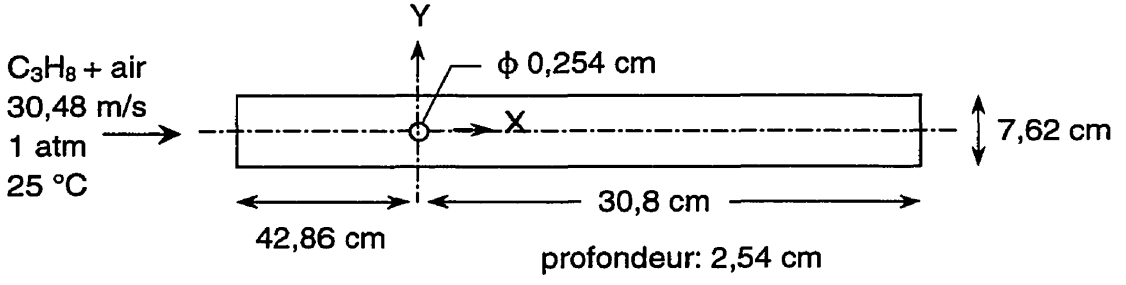


Figure 3-10 : Chambre de combustion rectangulaire

Afin d'éviter les difficultés reliées à la simulation de la stabilisation de la flamme sur la tige cylindrique, le domaine de calcul débute en aval de la tige stabilisatrice. Les conditions d'entrée sont décrites par Spalding (1971) qui a simulé cette expérience pour développer son modèle de taux de réaction fini appelé Eddy-break-up. Spalding pose comme hypothèse qu'à une distance de

2,5 diamètres de tige en aval de celle-ci, la recirculation des gaz a cessé et le propane est complètement brûlé sur une hauteur de 3 diamètres de tige, centrée sur l'axe de symétrie horizontal (figure 3-11). Toujours selon Spalding, l'imposition de ces conditions arbitraires ne semble pas influencer le développement de la flamme en aval. Les conditions de vitesse, de pression et de composition sont les mêmes qu'à l'entrée sauf dans la zone centrale de gaz brûlé où la température est fixée à 2015 °C, soit la température de flamme adiabatique à l'équilibre chimique d'un mélange stœchiométrique de propane-air. La composition dans cette zone correspond à celle des gaz brûlés produits par une réaction complète du mélange gazeux.

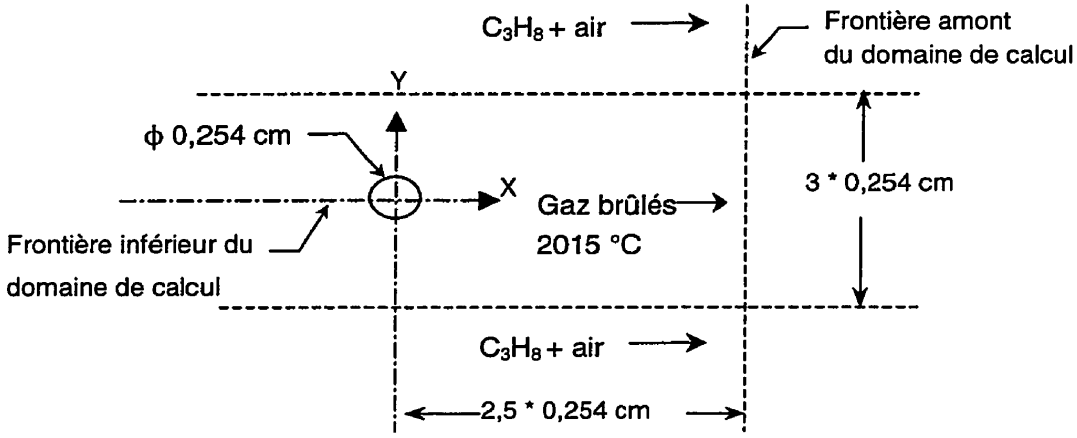


Figure 3-11 : Conditions frontières à l'entrée de la chambre rectangulaire

Le domaine de calcul pour la résolution ne comprends que la partie positive de l'axe des Y. Une condition de symétrie a donc été imposée sur la frontière inférieure du domaine de calcul. Puisque la simulation est bi-dimensionnelle, la solution ne pourra cependant pas reproduire les effets visqueux causés par la paroi verticale située de part et d'autre de l'écoulement. La solution numérique de Spalding a également été réalisée par une approche bi-dimensionnelle.

Le maillage utilisé pour la résolution du problème comporte 2634 nœuds et 5054 éléments triangulaires. Ce maillage est illustré à la figure 3-12 :

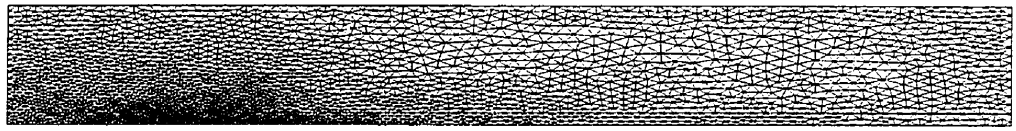


Figure 3-12 : Maillage de la chambre utilisé pour la validation

3.2.2 Solution numérique et analyse des résultats

Les figures 3-13 et 3-14 illustrent les champs de vecteurs ainsi que les isolignes de concentration de propane présents dans le réacteur.

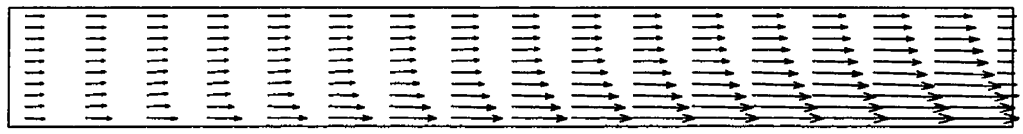


Figure 3-13 : Champs de vecteurs-vitesse dans la chambre

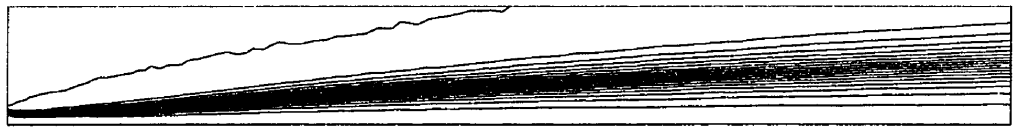


Figure 3-14 : Isolignes de concentration de propane dans la chambre

La validation du modèle sur cette expérience est effectuée par comparaison de profils de vitesse et de concentration expérimentaux et numériques situés à différentes valeurs de X. Le système d'axe XY est situé au centre de la tige stabilisatrice. Les figures 3-15 et 3-16 présentent la comparaison entre les profils de concentration molaire d'oxygène obtenus de façon expérimentale et ceux obtenus respectivement par l'auteur et Spalding (1971). Les figures 3-17 et 3-18 illustrent les mêmes comparaisons pour les profils de vitesse. Enfin, la figure 3-19 compare le profil expérimental de composition chimique situé à la position X = 25,4 cm avec celui obtenu par l'auteur.

On remarque d'abord des divergences pour les points situés près de l'axe de symétrie (y=0) sur les figures 3-15 et 3-17. Les concentrations d'oxygène calculées sont inférieures aux valeurs expérimentales. Ces résultats sont consistants avec le fait que les vitesses calculées le long de l'axe sont supérieures aux valeurs expérimentales. En effet, une concentration moindre d'oxygène indique une combustion plus avancée, donc une densité plus faible et une vitesse plus élevée.

Plusieurs paramètres ont été modifiés afin d'évaluer leur influence sur la vitesse et la concentration d'oxygène près de l'axe de symétrie. L'intensité de turbulence en aval de la tige stabilisatrice a été portée à des valeurs variant entre 0.3% et 14%. La constante dans l'équation du taux de Magnussen a été modifiée d'une valeur de 4 à une valeur de 2. Aucune de ces modifications n'a permis d'augmenter de façon significative la concentration d'oxygène sur l'axe de symétrie près de la tige stabilisatrice.

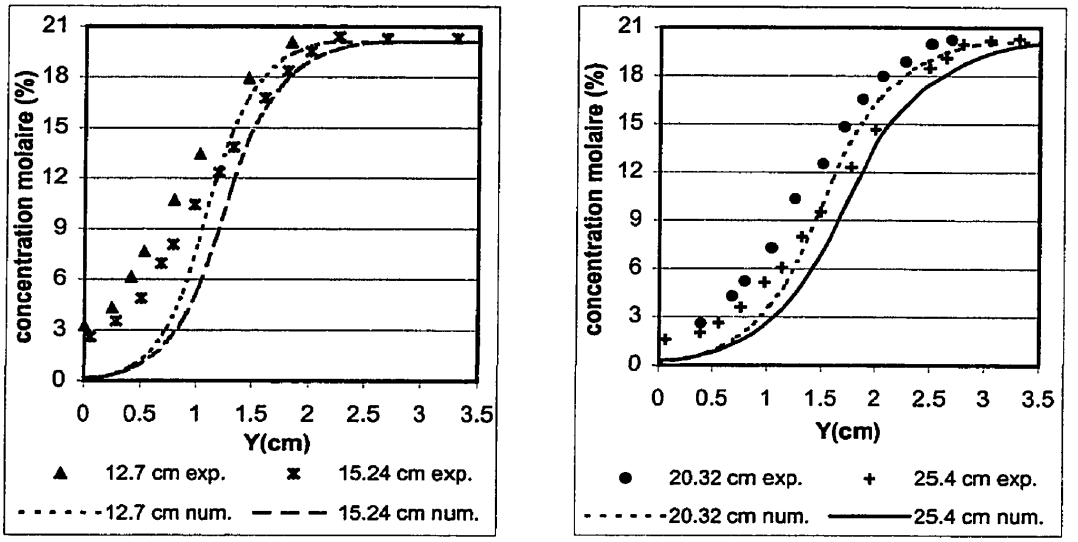


Figure 3-15 : Profils de concentration d'oxygène à différentes valeurs de X en fonction de la position radiale; solution numérique de l'auteur

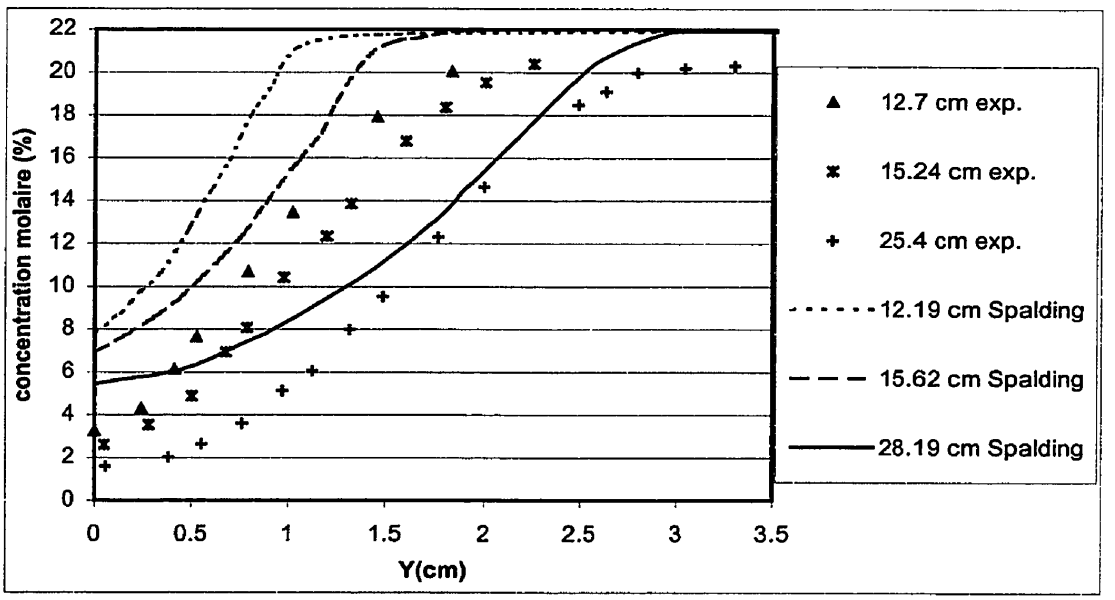


Figure 3-16 : Profils de concentration d'oxygène à différentes valeurs de X en fonction de la position radiale; solution numérique de Spalding (1971)

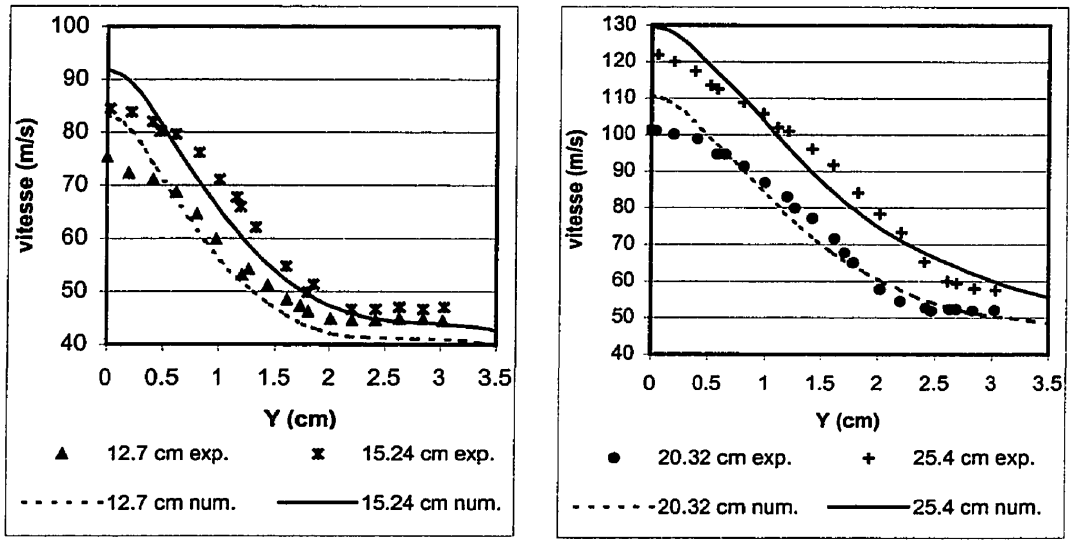


Figure 3-17 : Profils de vitesse à différentes valeurs de X en fonction de la position radiale ; solution numérique de l'auteur

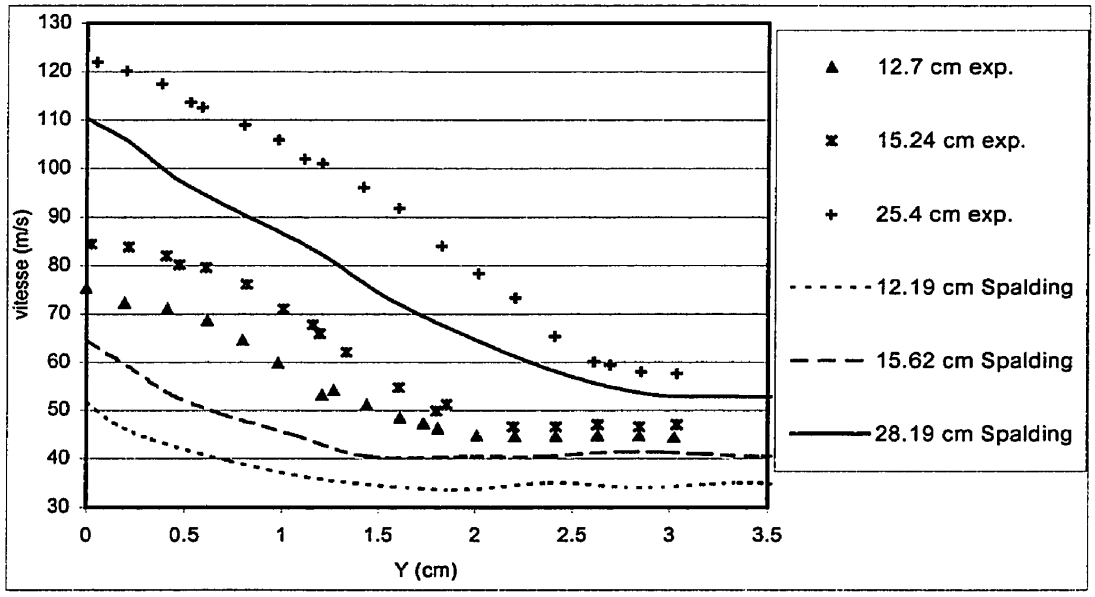


Figure 3-18 : Profils de vitesse à différentes valeurs de X en fonction de la position radiale ; solution numérique de Spalding (1971)

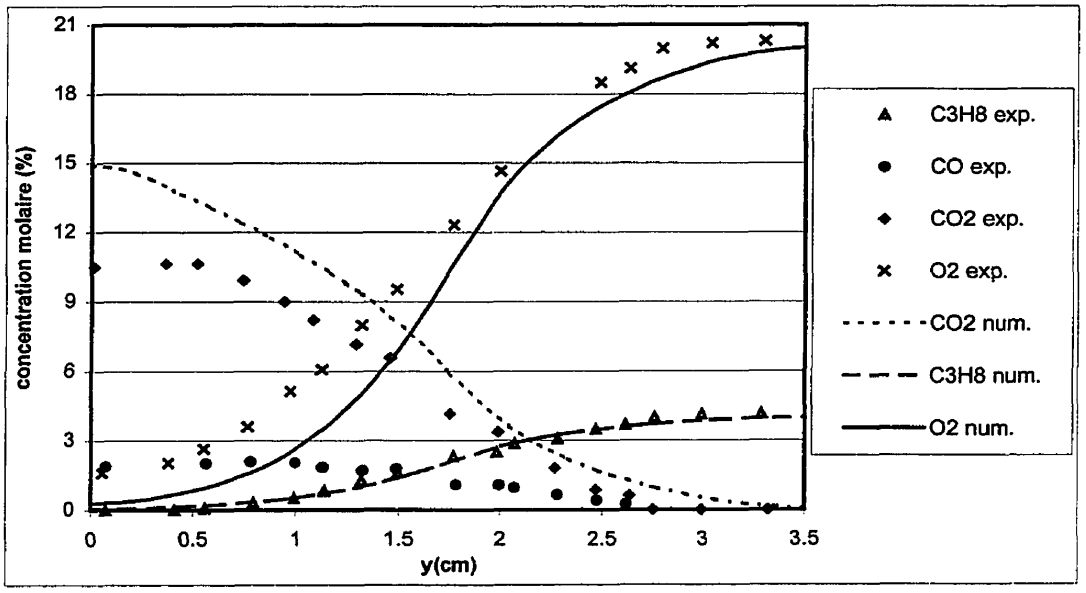


Figure 3-19 : Profils de composition chimique à x = 25.4 cm en fonction de la position radiale

Afin de vérifier si ce manque d'oxygène était dû à une combustion trop rapide, un essai a été effectué en transportant les composés chimiques sans toutefois leur permettre de réagir. Encore là, le mélange des gaz n'est pas assez important pour diffuser ou convecter une quantité appréciable d'oxygène sur l'axe de symétrie dans les premiers centimètres en aval de la tige. À la position X = 5.08 cm sur l'axe de symétrie, la concentration d'oxygène est de 8% alors que la valeur expérimentale en présence de combustion est de 11,5%. Les conditions frontières à l'entrée dictées par Spalding ne reflètent peut-être pas tout à fait la réalité. Bien que Spalding ait réussi à obtenir une quantité importante d'oxygène sur l'axe de symétrie, ses résultats illustrés aux figures 3-16 et 3-18 offrent une concordance moins bonne que celle observée par les résultats de l'auteur.

Les concentrations de CO_2 sur la figure 3-19 sont supérieures aux valeurs expérimentales. Ceci s'explique surtout par l'absence de monoxyde de carbone

comme produit de réaction intermédiaire dans la solution numérique. La concordance dans la concentration de propane est cependant excellente.

Dans l'ensemble, la concordance avec les valeurs expérimentales peut être jugée comme étant qualitativement correcte.

3.3 Taux de réaction infiniment rapide

Tel que mentionné au chapitre 1, le modèle à chimie infiniment rapide suppose que la réaction chimique est si rapide que celle-ci est complétée aussitôt que les réactifs sont mélangés. La réaction se produit en une seule étape, rapide, complète et de manière irréversible. Ce modèle est validé en comparant les fractions molaires des produits de combustion d'un mélange méthane-air à 25 °C avec celles calculées par le modèle d'équilibre chimique. La figure 3-20 illustre ces fractions molaires en fonction de la richesse du mélange. La richesse d'un mélange est définie comme le rapport massique combustible/air sur le rapport massique combustible/air stœchiométrique. Le modèle de chimie infiniment rapide est représenté sur la figure 3-20 par les lignes pleines alors que le modèle d'équilibre chimique (McKenty, 1992) est représenté par les symboles.

On remarque sur la figure 3-20 que les valeurs obtenues pour une richesse inférieure à 1 (mélange pauvre) avec le modèle de chimie infiniment rapide collent avec celles du modèle d'équilibre chimique. Par contre, les valeurs obtenues par les deux modèles divergent lorsque le mélange est riche. Ce comportement prévisible s'explique par la combustion incomplète du méthane ainsi que par la dissociation des composés chimiques. Dans un mélange pauvre, il y a suffisamment d'oxygène pour oxyder complètement le méthane

ainsi que le CO formé en cours de réaction. À mesure que la température augmente, les phénomènes de dissociation modélisés par le modèle d'équilibre chimique prennent de plus en plus d'importance. La figure 3-21 illustre d'ailleurs la température de flamme adiabatique d'un mélange méthane-air obtenue par les deux modèles en fonction du taux de mélange, i.e. la fraction massique de combustible brûlé et non-brûlé. On observe sur la figure 3-20 que la dissociation du CO_2 devient non-négligeable pour une richesse supérieure à 0,9.

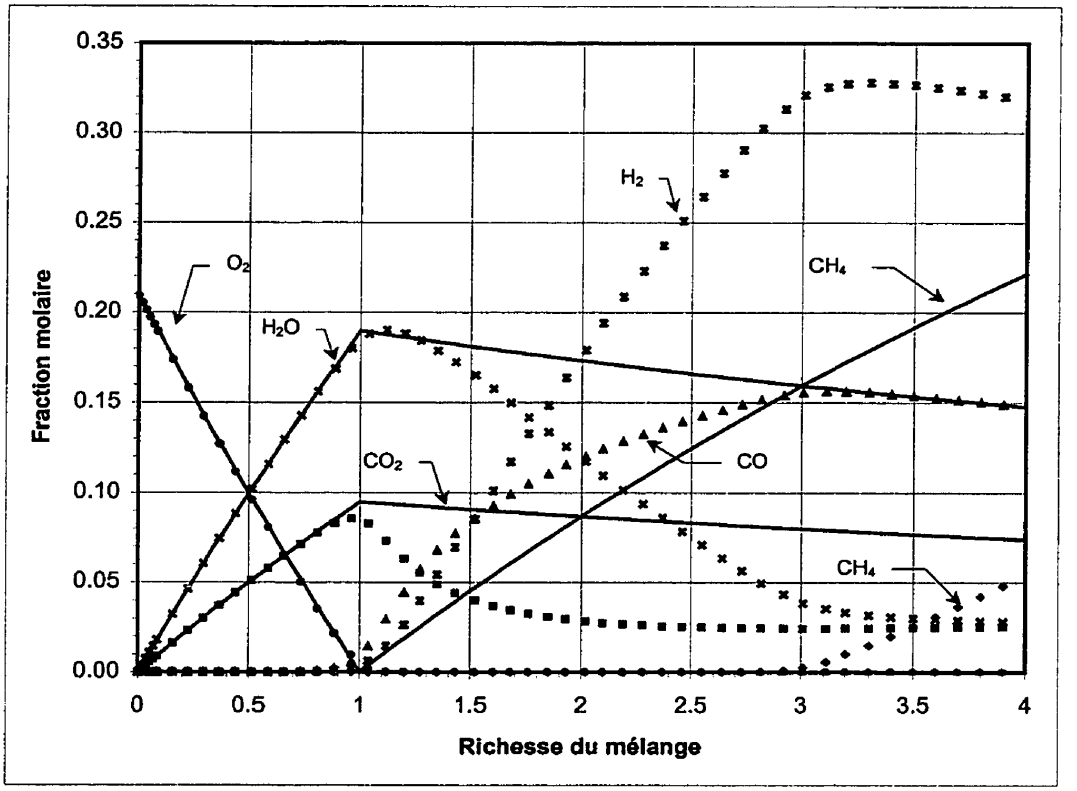


Figure 3-20 : Comparaison du modèle de chimie infiniment rapide avec le modèle d'équilibre chimique pour le mélange méthane-air

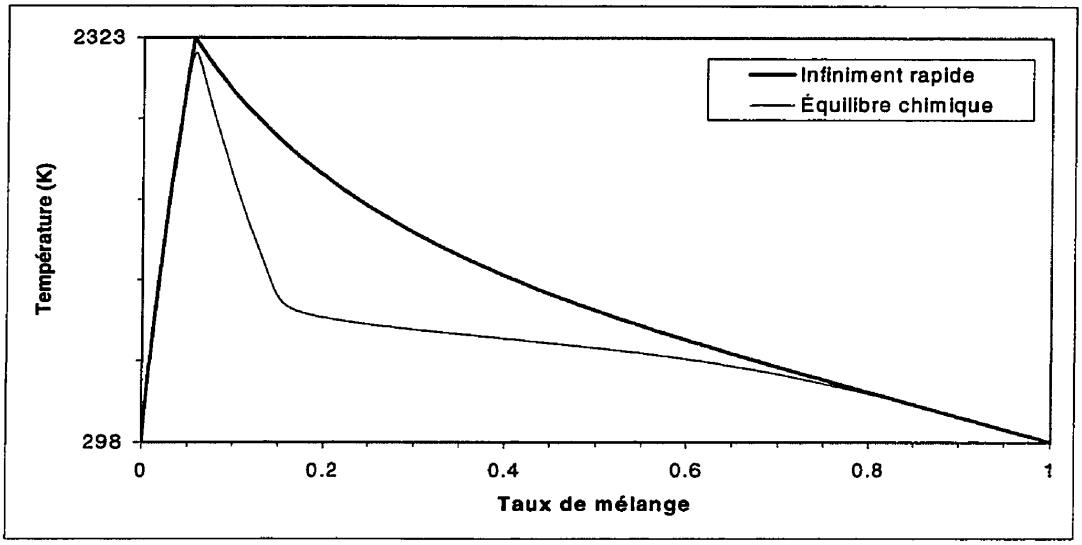


Figure 3-21 : Température de flamme adiabatique du mélange méthane-air en fonction du taux de mélange

Lorsque le mélange devient riche, il y a défaut d'oxygène. Tel qu'attendu, le modèle de chimie infiniment rapide prédit alors que du CH_4 se retrouve dans les produits de combustion. Comme le modèle d'équilibre chimique le prédit, il se produit en réalité une combustion incomplète du méthane ainsi qu'une apparition de produits intermédiaires de combustion tel le CO. Rappelons que le modèle de chimie infiniment rapide ne peut simuler que des réactions complètes et irréversibles de combustible.

Le manque d'oxygène et les hautes températures provoquent également un phénomène de dissociation de certains composés chimiques tels le H_2O et le CO_2. Cette dissociation simulée par le modèle d'équilibre chimique entraîne la présence dans les produits de combustion de composés chimiques comme le CO et le H_2. Ceci a pour effet de transformer l'énergie interne en énergie chimique latente et de diminuer ainsi la température des produits de combustion tel qu'illustré à la figure 3-21.

3.4 Équilibre chimique

Le modèle d'équilibre chimique suppose que la réaction est suffisamment rapide pour que l'équilibre chimique soit atteint localement entre les différentes espèces chimiques. Ce modèle est validé pour la combustion statique d'un mélange méthane-air où la température des réactifs est établie à 25 °C. Les composés chimiques que l'on suppose être présents dans les produits de réactions sont les suivants : CH_4, CO, CO_2, O_2, N_2, H_2, H_2O, NO, NO_2. La solution présentée à la figure 3-22 est validée sur la solution numérique de McKenty (1992). Les traits pleins sont reliés à la solution de l'auteur alors que les points représentent les valeurs de McKenty. On observe une excellente concordance entre les deux séries de valeurs.

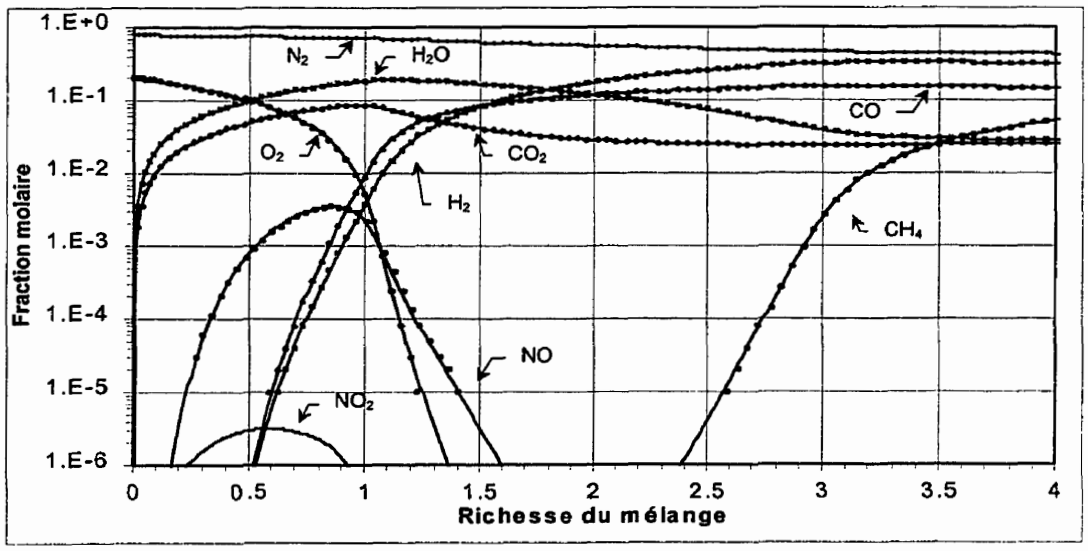


Figure 3-22 : Concentration molaire des produits de combustion du mélange air-méthane à l'équilibre chimique en fonction de la richesse du mélange

3.5 Conclusion

L'objectif n'était pas de valider les taux de réaction choisis pour ce mémoire mais plutôt l'implantation dans le logiciel VF d'un modèle de taux réaction fini applicable aux flammes de pré-mélange. Nous prendrons donc pour acquis que le taux de réaction de type Arrhénius applicable au CO en absence de flamme ainsi qu'au benzène est valide.

Suite à l'examen des figures 3-5 à 3-7, 3-15, 3-17 et 3-19, on observe que le modèle de taux de réaction fini donne dans l'ensemble des résultats acceptables. Quant aux modèles d'équilibre chimique et de chimie infiniment rapide, leur validité est évidente dans le cas d'une combustion statique d'un mélange en volume fermé.

Cette validation permet maintenant de passer à la prochaine étape, soit la simulation de l'oxydation de type pré-mélange des fumées dans la chambre de combustion d'un incinérateur régénératif. Le modèle du taux de réaction fini sera utilisé afin de déterminer la concentration des produits de combustion des fumées, soit le benzène, CO, CO2, H20, O2 et N2. Le NO sera déterminé par le modèle d'équilibre chimique. Le modèle de chimie infiniment rapide sera également mis à profit puisqu'il permet d'obtenir la solution initiale nécessaire au processus itératif du modèle d'équilibre chimique.

CHAPITRE 4 : SIMULATION DE L'ÉCOULEMENT RÉACTIF DANS L'INCINÉRATEUR

PUISQUE LA VALIDITÉ des modèles de combustion a été démontrée au chapitre précédent, il est maintenant possible de passer au cœur du problème, soit la simulation de l'écoulement réactif des fumées dans la chambre de combustion de l'incinérateur régénératif. Plusieurs coupes verticales et horizontales de la chambre de combustion sont analysées afin de reproduire le plus fidèlement possible les phénomènes tridimensionnels.

4.1 Description du problème

L'incinérateur régénératif étudié traite les émissions produites par la production de bardeaux d'asphalte. Les vapeurs d'hydrocarbures qui émanent du bain de goudron sont captées par une hotte puis acheminées à l'entrée de l'incinérateur (figure 0-1 située à la page suivante). Ces fumées sont initialement composées d'hydrocarbures lourds et légers, de monoxyde de carbone, d'air, de vapeur d'eau et de CO_2. Les fumées pénètrent dans l'incinérateur à une température de 81 °C, une pression de 1 atm et un débit de 25500 Nm^3/h. La concentration de polluants dans les fumées est de 2350 mg/Nm^3. Le tableau 4-1 résume la répartition des différents polluants que l'on retrouve à l'entrée de l'incinérateur.

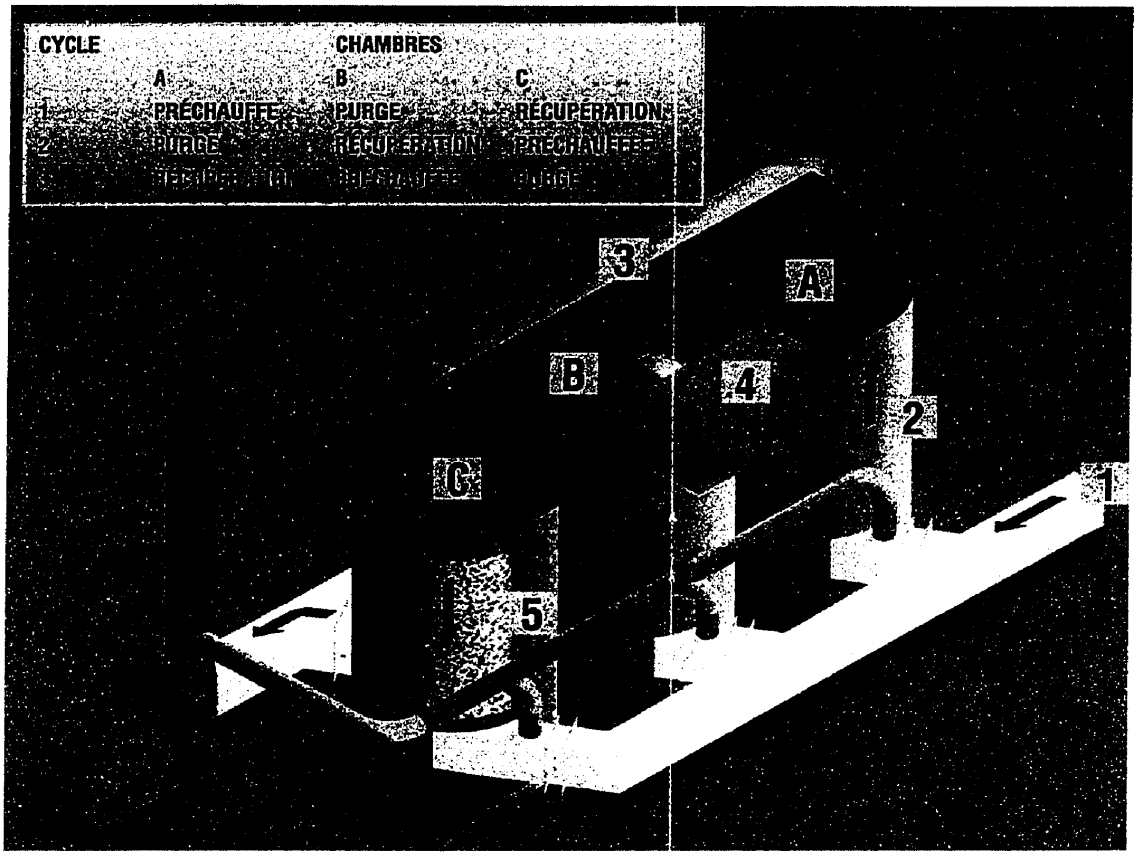


Figure 0-1 : Mode de fonctionnement d'un incinérateur régénératif (Biothermica 1996)

Tableau 4-1 : Répartition des composés chimiques dans les polluants à l'entrée de l'incinérateur

Catégorie	Pourcentage massique (%)	Composé représentatif
aliphatiques	30,65	Tétracosane ($C_{24}H_{50}$)
COV	0,12	Butane (C_4H_{10})
HAP	0,05	Diméthylnaphtalène ($C_{12}H_{12}$)
monoxyde de carbone	0,63	CO
Asphaltènes	68,55	$C_nH_{1,35n}$ et M=3500g/mol ($C_{262}H_{354}$)

Le tableau 4-2 procure la composition totale des fumées à l'entrée de l'incinérateur. Ce n'est cependant pas cette composition qui nous intéresse puisque seule la chambre de combustion de l'incinérateur est simulée. Certaines hypothèses doivent être posées afin de connaître la composition des fumées à l'entrée de la chambre de combustion, i.e. après leur passage dans le lit de sellettes de céramique. Tel que mentionné à la section 1-4, nous posons comme hypothèse que tous les asphaltènes et les HAP sont transformés en benzène alors que les COV et les aliphatiques sont totalement transformés en CO lors de leur passage dans le lit d'entrée. En tenant compte de la consommation d'oxygène, de la production d'eau et de CO_2 et en utilisant les composés représentatifs du tableau 4-1, nous obtenons la composition donnée au tableau 4-3. Cette composition est évaluée en kmol/kg et c'est sous cette forme qu'elle doit être fournie au logiciel. En effet, toute variable transportée en volumes finis doit être une propriété intensive, i.e. une propriété par unité de masse. Certains auteurs transportent des fractions massiques (kg/kg) alors que d'autres transportent des concentrations massiques (kmol/kg). Nous avons opté dans ce mémoire pour des concentrations massiques.

Tableau 4-2 : Composition des fumées à l'entrée de l'incinérateur

Substance chimique	Pourcentage massique (%)
Polluants	0,197
CO_2	0,116
H_2O	1,787
Air (O_2 + 3,773N_2)	97,900

Tableau 4-3 : Composition des fumées à l'entrée de la chambre de combustion

Composé chimique	Concentration massique (kmol/kg)
CO	4,388 E-5
C_6H_6	1,680 E-5
O_2	702,914 E-5
N_2	2672,135 E-5
CO_2	2,628 E-5
H_2O	105,449 E-5

En plus des fumées qui pénètrent dans la chambre de combustion, il y a une deuxième entrée de mélange gazeux : la purge. La purge est constituée de la même composition chimique que celle du mélange gazeux situé à la sortie de la chambre de combustion. En effet, 24% du débit volumique à la sortie de la chambre est retourné dans l'incinérateur par le lit de purge. Pour calculer la concentration moyenne des gaz à la sortie de la chambre, on effectue une moyenne pondérée sur le débit massique et la surface. C'est cette concentration moyenne recalculée à chaque itération qui est posée comme condition frontière à la purge. On ne peut donc pas savoir d'avance quelle sera la composition des gaz à la purge. On connaît toutefois leur température qui est déterminée par le logiciel BiotoxSim. Ce logiciel développé par Biothermica fait l'étude par différences finies des transferts de chaleur dans les lits.

La simulation de l'écoulement dans la chambre de combustion est faite selon quatre coupes du volume tridimensionnel. La première est une coupe horizontale au niveau du centre du brûleur qui permet d'observer l'influence du

brûleur sur l'écoulement principal des fumées. Les dimensions de cette coupe sont données à la figure 4-1. La composition au brûleur donnée au tableau 4-4 correspond à celle des produits de réaction d'une réaction complète d'un mélange stœchiométrique méthane-air. La température au brûleur est la température de flamme adiabatique à l'équilibre chimique d'un mélange méthane-air stœchiométrique initialement aux conditions normales de température et de pression.

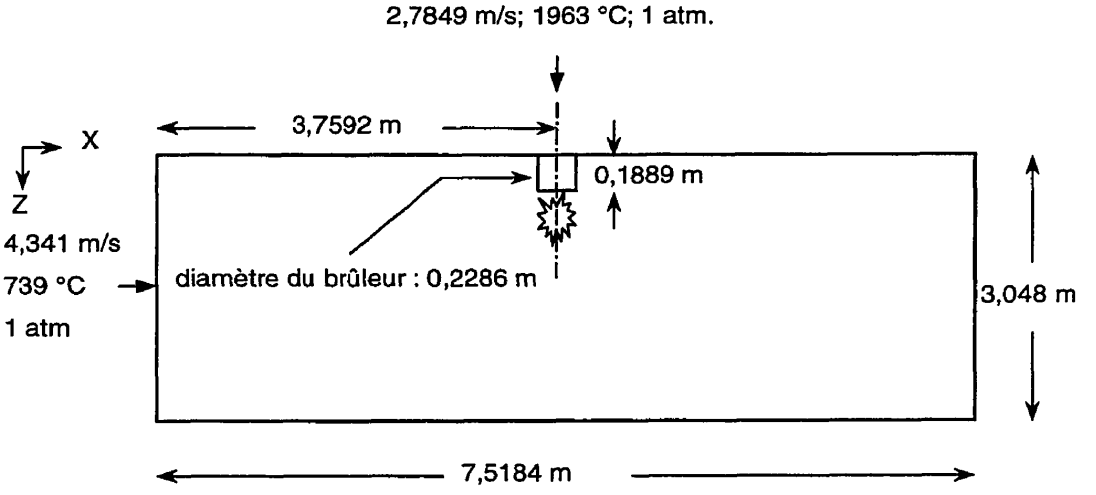


Figure 4-1 : schéma de la coupe horizontale du brûleur

Tableau 4-4 : Composition des gaz au brûleur

Composé chimique	Concentration massique (kmol/kg)
N_2	2579,760 E-5
CO_2	341,846 E-5
H_2O	683,690 E-5

Pour cette simulation de la coupe horizontale, on pose que le lit A (figure 0-1) est en cycle d'entrée, le lit B en cycle de purge et le lit C en cycle de sortie. La longueur totale de la coupe correspond à la distance centre à centre du lit A au lit C. Cette coupe ne permet cependant pas de simuler l'écoulement du lit central, i.e. le lit de purge puisque l'entrée des gaz de purge n'est pas située sur une frontière. On pose donc comme hypothèse que le débit et la composition à l'entrée de cette coupe est la somme des débits et des compositions d'entrée et de purge. La composition de purge est déterminée en supposant que la totalité des combustibles sont brûlés. Le tableau 4-5 fourni la composition des fumées à l'entrée de la coupe horizontale. La température à l'entrée de la coupe horizontale correspond à une moyenne, pondérée sur le débit, des températures au lit de purge et à l'entrée de la chambre de combustion.

Tableau 4-5 : Composition des fumées à l'entrée de la coupe horizontale

Composé chimique	Concentration massique (kmol/kg)
CO	3,335 E-5
C_6H_6	1,278 E-5
O_2	699,360 E-5
N_2	2672,135 E-5
CO_2	6,100 E-5
H_2O	106,658 E-5

La vue d'élévation de l'écoulement principal dans la chambre de combustion est fournie par la coupe verticale illustrée à la figure 4-2. Cette coupe verticale est située au centre de la chambre de combustion. La température à la sortie du lit d'entrée et de purge a été estimée à l'aide du logiciel BiotoxSim.

Tel que mentionné précédemment, un système de valves à l'entrée des lits fait alterner de façon cyclique l'entrée des fumées dans chacun des trois lits. L'appellation « cycle 1 », « cycle 2 » ou « cycle 3 » que l'on retrouvera au cours des prochaines pages fait référence aux cycles représentés sur la figure 0-1. Les étiquettes A, B et C que l'on retrouve sur cette figure sont reprises sur la figure 4-2. Rappelons que le mode préchauffe signifie l'entrée des fumées et le mode récupération signifie la sortie des fumées.

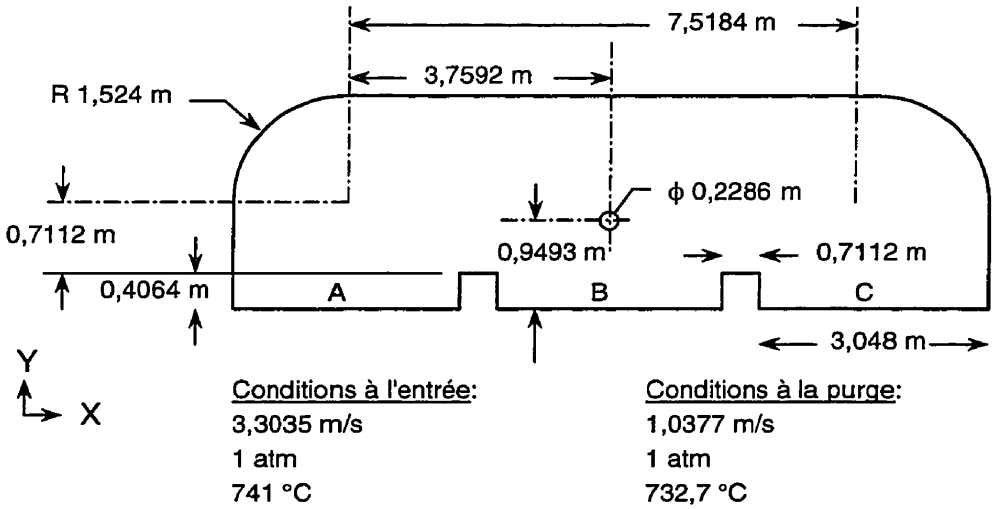


Figure 4-2 : Schéma de la coupe verticale centrale de la chambre de combustion

La simulation sera également effectuée sur deux autres coupes verticales. La première représente le volume de la chambre qui est affecté par le brûleur. La seconde coupe représente le volume de la chambre qui n'est aucunement affecté par le brûleur. C'est la coupe horizontale qui déterminera le taux de pénétration de la flamme. En prenant le taux de mélange comme indice et en posant comme condition frontière que le taux vaut 1 à l'entrée et 0 au brûleur, on pose comme hypothèse que l'écoulement n'est pas affecté par le brûleur à

partir d'une position H située en face du brûleur ou le taux de mélange est supérieur à 0,999. On suppose que les nombres de Prandtl et de Schmidt utilisés pour l'équation de transport de l'enthalpie sont les mêmes que ceux utilisés pour le transport du taux de mélange. Ceci permet de dire qu'à partir de ce point, l'écoulement n'est pas affecté par le brûleur, à 0,1% près, autant du point de vue cinétique que thermique.

La coupe représentant la partie affectée par le brûleur sera prise à la position z qui divise en deux le volume de la chambre compris entre le plan vertical $z = H$ et la paroi de la chambre du coté du brûleur. Cette coupe se situe donc au milieu du volume affecté par le brûleur. De la même façon, on effectue une coupe au milieu du volume restant, soit le volume de la chambre qui n'est pas affecté par le brûleur. Ces coupes sont significatives en autant que l'on suppose que malgré la turbulence, l'écoulement suit un couloir vertical et n'est pas influencé par l'écoulement de part et d'autre. Cette supposition est partiellement fausse puisque les forces visqueuses causées par le frottement des parois verticales de la chambre influencent inévitablement l'écoulement. C'est toutefois la meilleure façon de simuler un phénomène tridimensionnel en seulement deux dimensions.

Quelques particularités sont apportées en ce qui concerne les taux de réaction utilisés pour l'oxydation des combustibles. Premièrement, l'oxydation du benzène est uniquement simulée par le taux de réaction de type Arrhénius. Ce choix est justifié par les deux raisons suivantes : 1) L'utilisation d'un délai d'allumage dans le taux de réaction de type Arrhénius entraîne une période où aucune réaction se produit, suivi d'une période où la réaction est vive. L'utilisation des deux taux de réaction finis (Arrhénius et Magnussen) ferait en sorte qu'aucune réaction ne se produirait pendant un laps de temps et qu'ensuite la réaction ne débuterait que très lentement à cause du rapport des

concentrations (eq. 2-25) faisant intervenir les gaz brûlés dans le taux de Magnussen. 2) Le modèle de Magnussen est conçu pour simuler une réaction complète d'un combustible et non une réaction se produisant en deux étapes comme celle qui est simulée dans le cas du benzène. Si la réaction du benzène était découpée en plusieurs dizaines d'étapes comme c'est le cas en réalité, le modèle de Magnussen prédirait un temps de réaction des dizaines de fois plus long qu'il le ferait avec une réaction simulée en une seule étape, bien qu'il s'agisse globalement de la même réaction chimique.

La seconde particularité concerne la définition du rapport des concentrations (eq. 2-25) que l'on retrouve dans le taux de Magnussen (eq. 2-24) :

$$\frac{\overline{m}_{i,init} - \overline{m}_i}{\overline{m}_{i,init}} \tag{2-25}$$

$$R_{Magn} = -\frac{\overline{m}_{i,init} - \overline{m}_i}{\overline{m}_{i,init}} 4\tilde{\rho}\frac{\overline{\varepsilon}}{\overline{k}}\min\left(\overline{m}_i, \frac{\overline{m}_{O_2}}{s}\right) \tag{2-24}$$

En conditions normales, ce rapport est défini comme la quantité de combustible brûlé sur la quantité initiale de combustible propre à chaque nœud du maillage. Cette quantité initiale de combustible est déterminée par l'équation (2-16) :

$$\overline{m}_{i,init} = \overline{m}_{i,1}\overline{f} + \overline{m}_{i,2}\left(1 - \overline{f}\right) \tag{2-16}$$

Notons que dans le cas où il y a production de CO, on ajoute à ce calcul de concentration initiale, la quantité de CO produite par la combustion du benzène. On détermine ensuite la quantité de combustible brûlé en soustrayant la concentration initiale par la concentration finale à chaque point (numérateur de l'équation 2-25). Par contre, pour tenir compte de l'apport important de gaz brûlés provenant de la flamme du brûleur, on pose que ce rapport déterminé par l'équation (2-25) vaut 1 pour les points de calcul situés devant le brûleur dans les coupes verticales.

Une autre particularité concernant le rapport de concentration (éq. 2-25) s'applique au gaz de purge. À la sortie de la chambre de combustion, les gaz poursuivent leur oxydation pendant la descente dans le lit de sortie. La fraction de ces gaz qui retournent à la chambre de combustion par le lit de purge poursuivent également leur oxydation pendant la montée dans le lit. Pour tenir compte de cette situation, nous insérons dans l'équation (2-25) la concentration initiale de combustibles à l'entrée des fumées pour les nœuds de calcul situés à l'entrée de la purge. Cet artifice permet d'obtenir un rapport de gaz brûlé sur gaz initial plus élevé et d'empêcher les situations incohérentes où ce rapport à l'entrée du cycle de purge est sous la barre des 5%.

La dernière particularité concerne le calcul du délai d'allumage pour la coupe horizontale. Étant donné que les fumées ont parcouru une distance verticale de 0,9493 m entre l'entrée dans la chambre et la coupe horizontale prise à la hauteur du brûleur, on ajoute cette distance au trajet parcouru par les molécules de benzène pour le calcul du délai d'allumage.

Bien qu'il existe une certaine perte de chaleur à travers les parois de la chambre de combustion, pour des raisons de simplification, on pose comme hypothèse que le système est adiabatique.

Le maillage utilisé pour la coupe horizontale est illustré à la figure 4-3. La figure 4-4 illustre un maillage typique utilisé pour la coupe verticale centrale de la chambre de combustion. Le maillage peut différer quelque peu, tout dépendant du cycle simulé. Le maillage de la figure 4-4 est celui du cycle 3. Il est plus raffiné près du brûleur, des parois et de la paroi horizontale située entre les lits A et B. Ce raffinement sur la paroi horizontale est nécessaire pour capter la zone de recirculation qui existe à cet endroit. Aucune étude qualitative de convergence a été réalisée sur les maillages. Une étude quantitative a toutefois

été réalisée sur un maillage plus raffiné d'une coupe verticale et horizontale. Les résultats étaient passablement les mêmes mais le temps d'exécution du code était beaucoup plus élevé. Étant donné la quantité élevée de solutions à obtenir, il a été décidé de poursuivre avec un maillage plus grossier. Une attention particulière a toutefois été portée aux zones de recirculation et de changements brusques de propriété. Des correctifs sur ces zones ont été apportés à mesure que le besoin se faisait sentir.

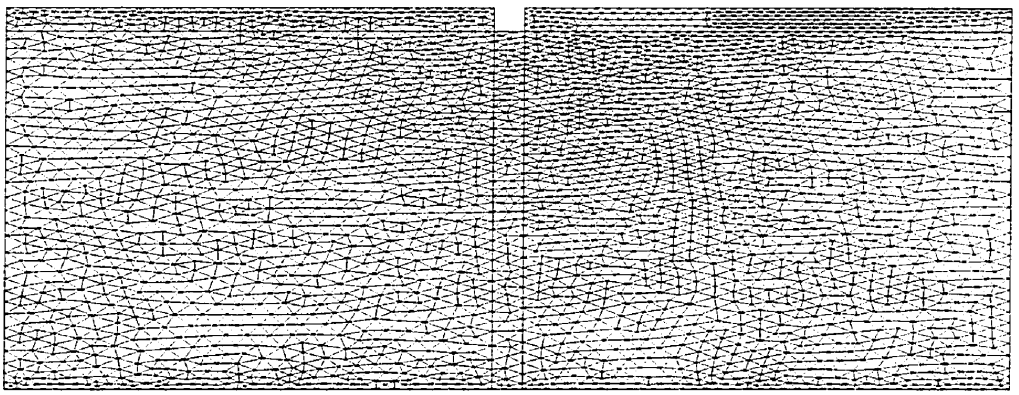


Figure 4-3 : Maillage de la coupe horizontale

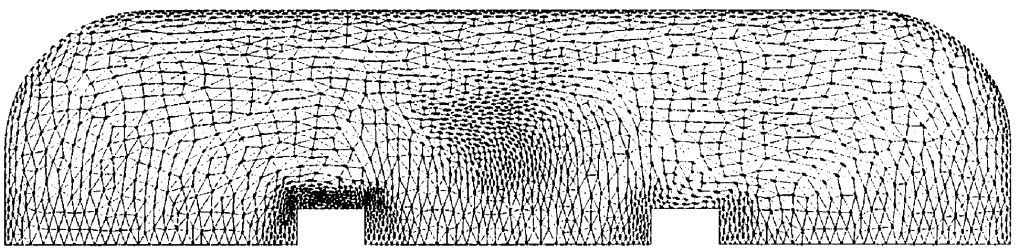


Figure 4-4 : Maillage typique de la coupe centrale verticale

4.2 Chimie infiniment rapide : solutions numériques et analyse des résultats

Cette section présente les résultats obtenus sur la coupe verticale centrale avec le modèle de chimie infiniment rapide. Seuls les résultats du cycle 2 sont présentés et analysés, les deux autres cycles présentant des résultats similaires.

La figure 4-5 illustre les isolignes de concentration du benzène présent dans le cycle 2 de la coupe verticale centrale de la chambre de combustion. Le CO se comporte exactement comme le benzène, il présente les même isolignes. Selon le modèle de chimie infiniment rapide, ces combustibles sont entièrement brûlés dès leur entrée dans la chambre de combustion. Ces résultats étaient prévisibles puisque le modèle de chimie infiniment rapide pose que la réaction chimique est si rapide que celle-ci est complétée aussitôt que les réactifs sont mélangés. Or, le combustible et le comburant sont déjà mélangés avant même leur entrée dans la chambre de combustion. Puisque le mélange est pauvre, il y a suffisamment d'oxygène pour oxyder complètement les polluants.

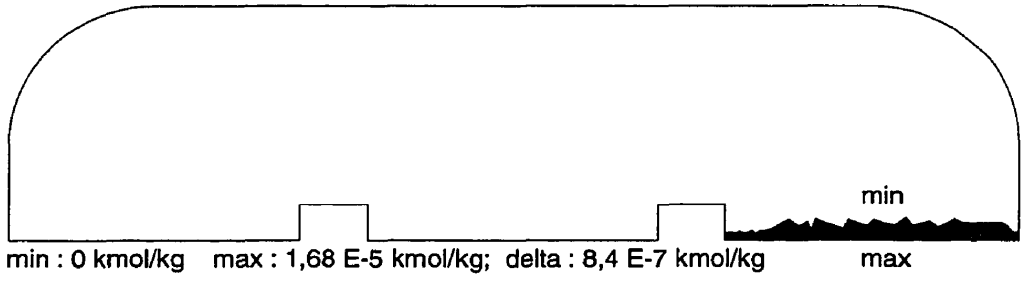


Figure 4-5 : Isolignes de concentration du benzène; coupe verticale centrale du cycle 2, chimie infiniment rapide

Ce modèle ne reflète donc pas la réalité puisque qu'un échantillonnage des gaz effectué à la sortie de l'incinérateur rapporte une destruction de 92% des polluants. Si ce modèle reflétait la réalité, un temps de résidence d'une fraction de seconde dans la chambre de combustion serait suffisant pour complètement détruire les polluants.

4.3 Équilibre chimique : solutions numériques et analyse des résultats

Cette section simule le même problème que celui de la section précédente sauf que cette fois-ci, le modèle d'équilibre chimique est utilisé. Ce modèle diffère un peu du modèle précédent en ce sens qu'il ne considère pas que la réaction est complète et irréversible dès que le combustible et le comburant sont mélangés. Il pose toutefois qu'à chaque nœud de calcul, la réaction a eu le temps d'atteindre son équilibre chimique. Le modèle d'équilibre chimique permet donc de tenir compte des phénomènes de dissociation et de combustion incomplète que l'on rencontre surtout dans des mélanges riches ou dans des conditions de très hautes températures. Bien sûr, cela suppose que les réactions ont atteint l'équilibre chimique.

La figure 4-6 illustre les isolignes de concentration du CO. Les résultats sont passablement les mêmes que dans le cas du modèle de chimie infiniment rapide puisque le mélange dans la chambre est pauvre et qu'on ne retrouve pas de haute température. On retrouve du CO, du H_2 et du NO dans la chambre de combustion mais seulement sous forme de traces. La région du brûleur, où les températures sont plus élevées (817 °C), est celle où l'on retrouve ces trois composés chimiques en plus grande quantité. La figure 4-7 illustre d'ailleurs

cette présence du NO au voisinage du brûleur. On obtient au centre du brûleur des concentrations de 1E-5 ppm, 8E-5 ppm et 80 ppm respectivement pour le CO, le H_2 et le NO.

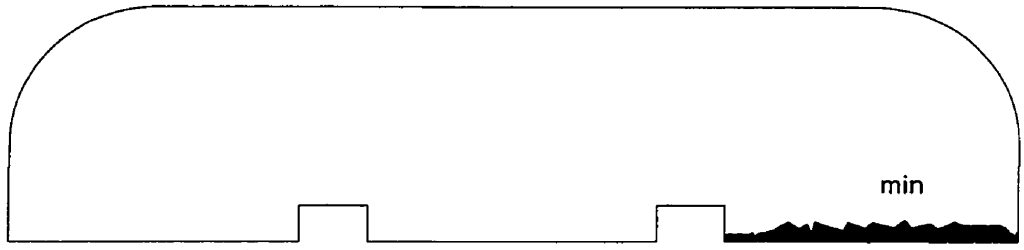


Figure 4-6 : Isolignes de concentration du CO; coupe verticale centrale du cycle 2, équilibre chimique

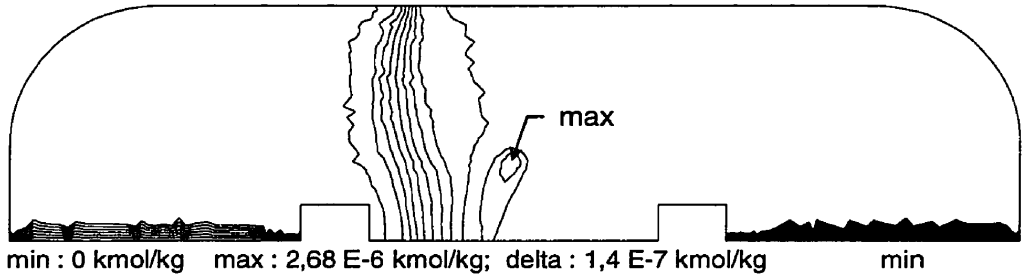


Figure 4-7 Isolignes de concentration du NO; coupe verticale centrale du cycle 2, équilibre chimique

Il est évident que la température que l'on retrouve immédiatement à la sortie du brûleur est plus élevée que la température moyenne des molécules présentes en face du brûleur (817 °C). Comme il est indiqué à la figure 4-1, la température à la sortie du brûleur est de 1963°C. À cette température, la concentration de NO à l'équilibre chimique serait beaucoup plus élevée. La simulation effectuée représente toutefois la concentration moyenne que l'on

retrouverait dans la chambre de combustion si toutes les molécules avaient le temps d'atteindre l'équilibre chimique.

La quantité de NO produite, simulée par ce modèle, constitue la limite supérieure de la quantité que l'on pourrait réellement retrouver dans la chambre de combustion. En effet, le NO possède un temps de réaction très lent. Il n'aurait jamais le temps d'atteindre l'équilibre chimique à l'intérieur de la chambre de combustion.

Un second essai a été réalisé dans les même conditions que l'essai précédent sauf au niveau de la puissance au brûleur. Elle a été portée de 32 kW à 1465 kW, soit la puissance que l'on retrouve lorsque le brûleur fonctionne à plein régime. On peut rencontrer ces conditions pendant un démarrage à froid de l'incinérateur, le temps que la température dans les sellettes de céramique se soit stabilisée. La figure 4-8 illustre les concentrations de NO que l'on retrouverait dans ces conditions. On remarque que la quantité de NO est plus importante lorsque les températures sont plus élevées. Ainsi, la température moyenne des molécules situées en face du brûleur est de 1818 °C et la concentration en NO est de 9900 ppm. Rappelons toutefois que la concentration réelle de NO dans la chambre est beaucoup plus faible que celle simulée par ce modèle. Ce modèle permet tout de même de fournir la marge supérieure de NO que l'on pourrait théoriquement trouver dans la chambre.

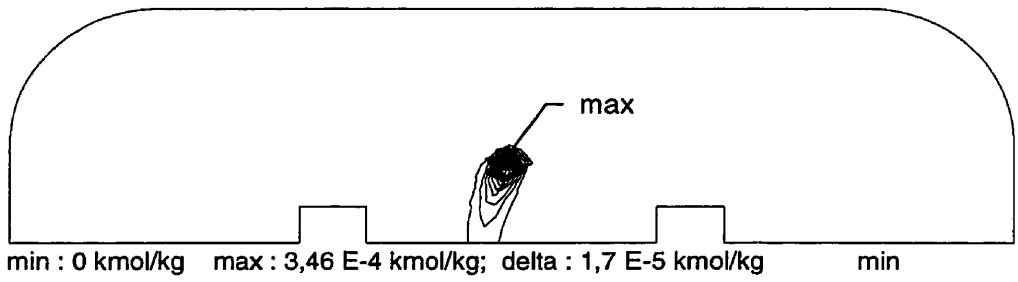


Figure 4-8 : Isolignes de concentration du NO; équilibre chimique, puissance au brûleur plus élevée

Étant donné que le combustible et le comburant d'une flamme de pré-mélange sont déjà en contact, on ne peut plus négliger le temps nécessaire aux molécules pour atteindre l'équilibre chimique comme il est fait avec les flammes de diffusion. Cette simulation nous en donne la preuve puisque l'expérience a démontré qu'il faut un temps de résidence de l'ordre d'une seconde pour s'assurer une bonne destruction des polluants. Or, cette simulation prédit que la combustion est complétée en une fraction de seconde. Il faut donc passer au prochain modèle de combustion, soit celui du taux de réaction fini.

4.4 Taux de réaction fini : solutions numériques et analyse des résultats

On présente dans cette section les résultats obtenus avec le modèle du taux de réaction fini sur les quatre coupes de la chambre de combustion.

4.4.1 Coupe horizontale

La figure 4-9 présente le champ de vecteurs-vitesse existant dans la tranche horizontale de la chambre située à la hauteur du centre du brûleur. Les deux figures suivantes (4-10 et 4-11) présentent les isolignes de concentration du C_6H_6 et du CO. Enfin, la figure 4-12 expose les isolignes de taux de mélange. L'isoligne extérieur correspond à un taux de mélange de 0,999. Il est important de noter que cette tranche n'est pas représentative de toute la chambre mais seulement de la tranche située en face du brûleur.

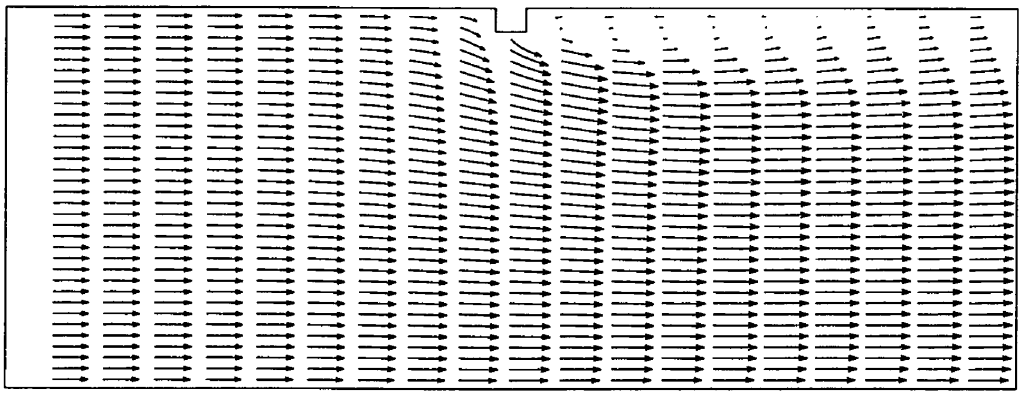
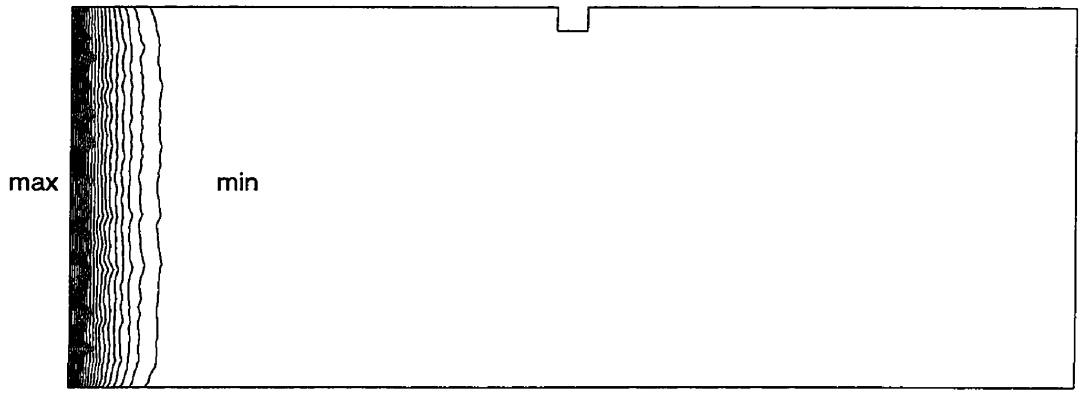
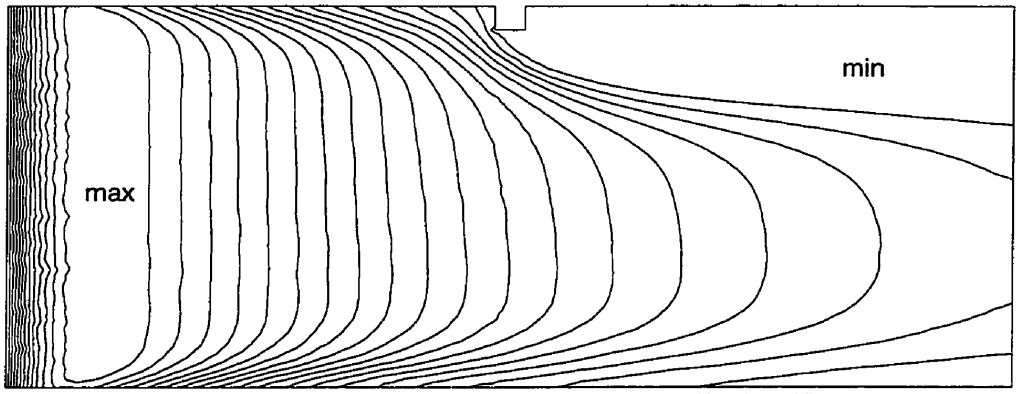


Figure 4-9 : Champs de vecteurs-vitesse dans la coupe horizontale



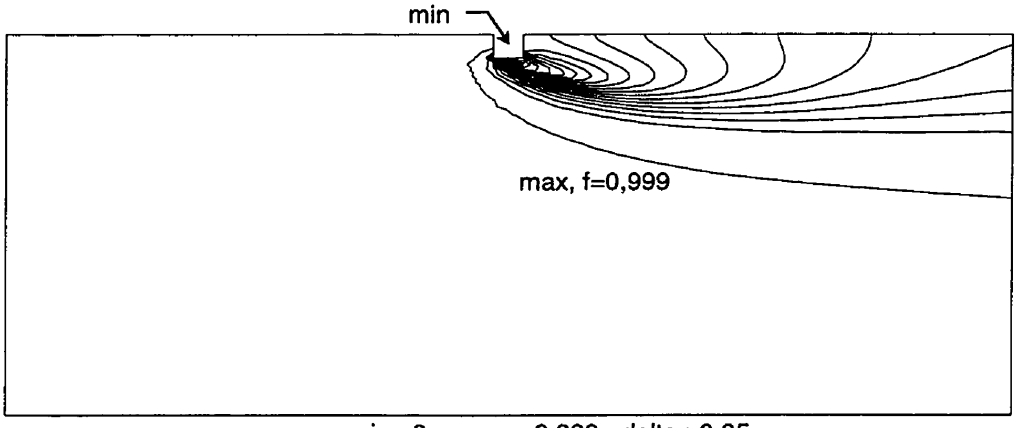
min : 6,4 E-7 kmol/kg max : 1,278 E-5 kmol/kg; delta : 6,4 E-7 kmol/kg

Figure 4-10 : Isolignes de concentration de benzènes dans la coupe horizontale



min : 4.9 E-6 kmol/kg max : 9,32 E-5 kmol/kg; delta : 4,9 E-6 kmol/kg

Figure 4-11 : Isolignes de concentration de CO dans la coupe horizontale



min : 0 max : 0,999; delta : 0,05

Figure 4-12 : Isolignes de taux de mélange dans la coupe horizontale

La figure 4-9 présente un aperçu général de l'écoulement. On remarque que la quantité de mouvement du jet issu du brûleur n'est pas suffisamment importante pour influencer de façon substantielle l'écoulement principal. Il faut se rappeler également que cette influence n'est pas présente ailleurs dans la chambre mais seulement devant le brûleur.

On remarque sur la figure 4-10 qu'aucun délai d'allumage n'est visible sur cette coupe. Ceci s'explique par le fait que le temps nécessaire aux fumées pour se rendre à la hauteur du brûleur excède le délai d'allumage. L'observation simultanée des figures 4-10 et 4-11 permet de voir la zone où il y a production maximale de CO. Le CO se détruit ensuite peu à peu, si bien qu'à la sortie, 93,5% de la masse de polluants (benzène et CO) a été détruite.

La figure 4-12 est la plus intéressante. Elle permet en effet de quantifier le taux de pénétration de la flamme dans la chambre de combustion. L'isoligne de taux de mélange à 0,999 est située à une distance selon l'axe des z de 62,8 cm par rapport à la base du brûleur. La température à cet endroit est de 740,4 °C. Ce faible taux de pénétration était prévisible puisque le brûleur sur cette installation ne fonctionne qu'à 2% de sa capacité, étant donné les concentrations « importantes » de polluants. Le brûleur fournit environ 32 kW alors que sa capacité est de 1465 kW. Le volume de la partie de la chambre de combustion comprise entre la base du brûleur et le plan vertical passant par le point z = 62,8 cm est de 9,02 m^3, soit 16 % du volume totale de 56,33 m^3. Le plan z = 36,8 cm est celui qui divise en deux le volume de la chambre affecté par le brûleur. La coupe verticale représentant l'écoulement qui est affecté par le brûleur est donc prise à une distance en z de 36,8 cm par rapport à la base du brûleur. Le volume de 47,31 m^3 représentant la partie non-affectée par le brûleur se divise en deux à la distance z de 1,724 m par rapport à la base du

brûleur. La coupe verticale représentant la partie de l'écoulement qui n'est pas affectée par le brûleur est donc située à z = 1,724 m.

La valeur de L qui est utilisée dans l'équation (2-14) est donc de 43,9 cm, soit 62,8 cm moins la profondeur de l'ouvreau du brûleur. Rappelons que cette valeur de L sert au calcul du volume de fumées qui capte l'énergie provenant du brûleur dans la coupe verticale affectée par le brûleur.

Pour cette simulation de la coupe horizontale, seulement 0,6% des nœuds ont un rapport de concentration de combustible brûlé sur concentration initiale (eq. 2-25) inférieur à 5%. La réaction est contrôlée par le taux de Magnussen sur 91,6% des nœuds de calcul. La température moyenne à la sortie est de 837,6 °C et le taux de destruction basée sur la masse de carbone des polluants est de 93,5%.

4.4.2 Coupe verticale de l'écoulement affecté par le brûleur

La figure 4-13 présente les dimensions de cette coupe verticale de la chambre de combustion représentant le volume de l'écoulement qui est affecté par le brûleur. Les figures 4-14 à 4-16 présentent les vecteurs-vitesse, les isolignes de concentration de benzène et de CO et les isolignes de température pour chacun des trois cycles de cette coupe verticale.

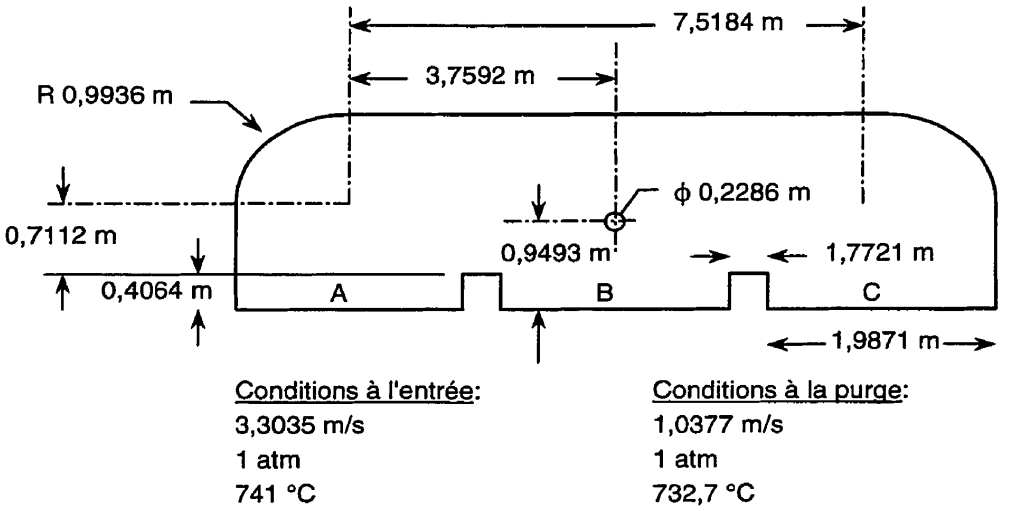
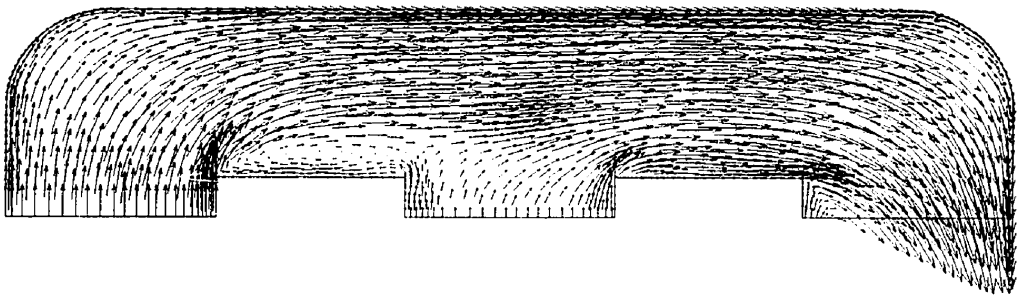
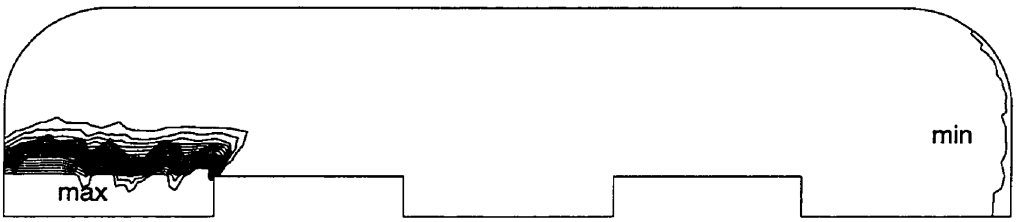


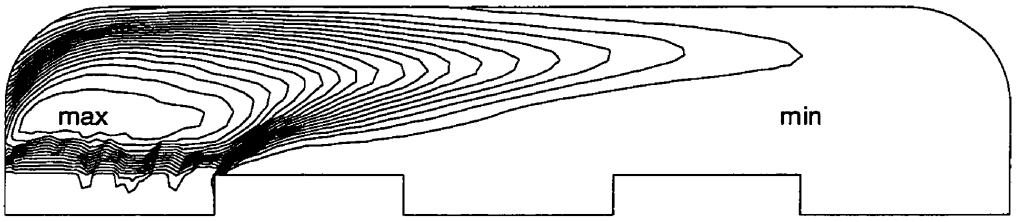
Figure 4-13 : Schéma de la coupe verticale de l'écoulement affecté par le brûleur



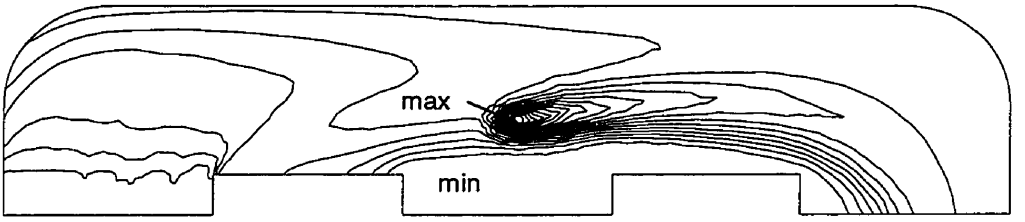
Champs de vecteurs-vitesse



Isolignes de concentration de C_6H_6, min : 0 kmol/kg; max : 1,68 E-5 kmol/kg; delta : 8,4 E-7 kmol/kg

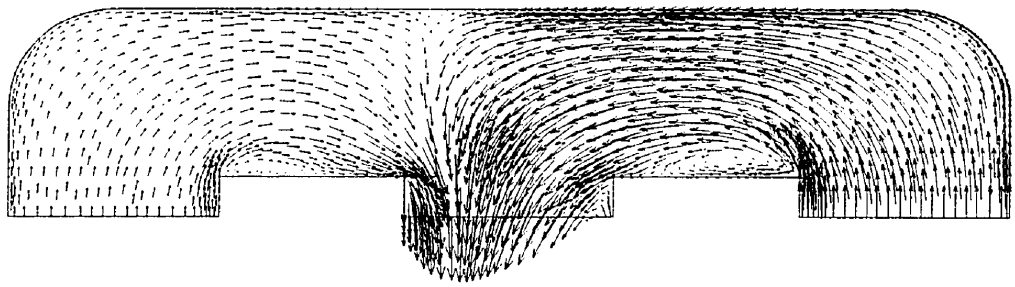


Isolignes de concentration de CO, min : 6,75 E-6 kmol/kg; max : 1,28 E-4 kmol/kg; delta : 6,8 E-6 kmol/kg

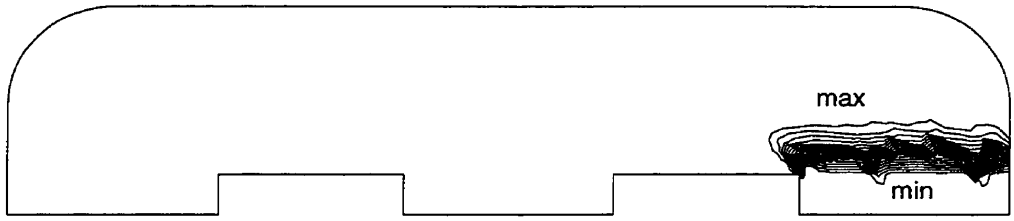


Isolignes de température, min : 1016 K; max : 1208 K; delta : 10,1 K

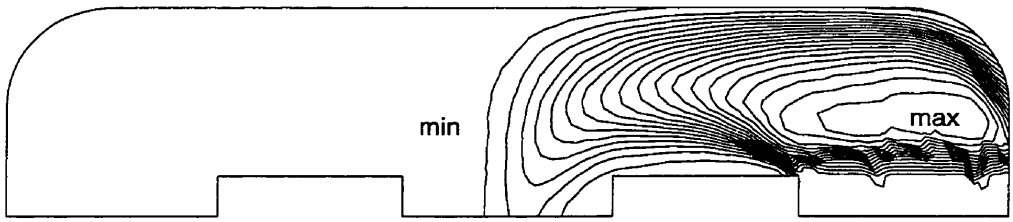
Figure 4-14 : Coupe verticale dans la partie affectée par le brûleur, cycle 1



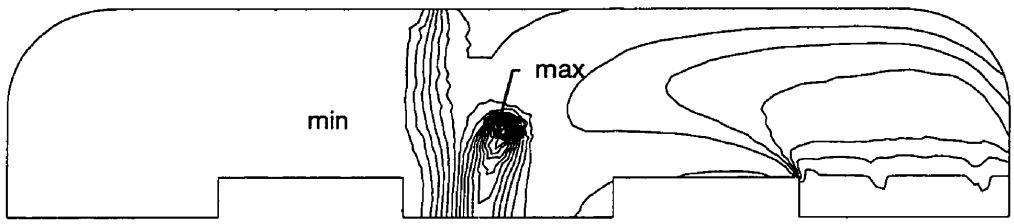
Champs de vecteurs-vitesse



Isolignes de concentration de C_6H_6, min : 8,4 E-7 kmol/kg; max : 1,68 E-5 kmol/kg; delta : 8,4 E-7 kmol/kg

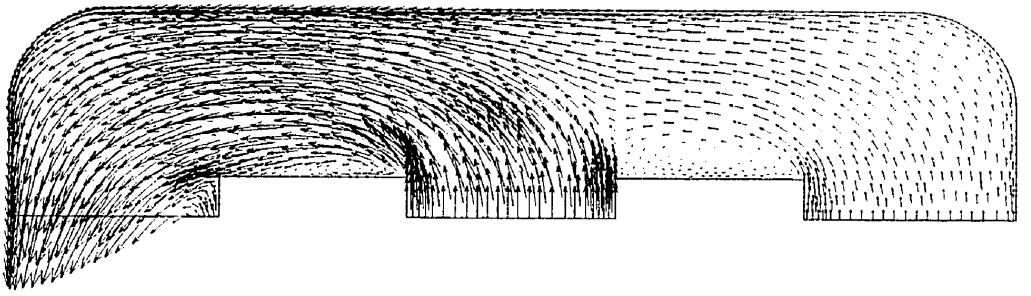


Isolignes de concentration de CO, min : 6,8 E-6 kmol/kg; max : 1,28 E-4 kmol/kg; delta : 6,8 E-6 kmol/kg

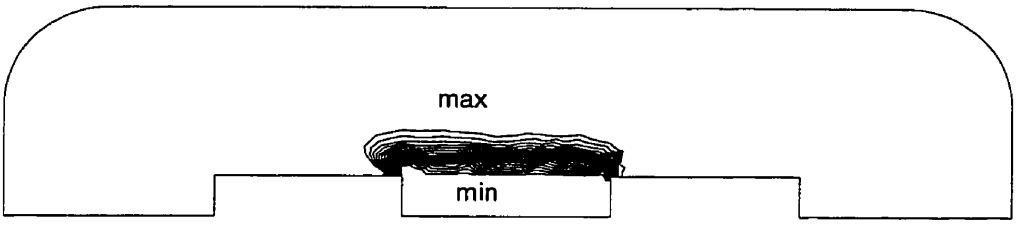


Isolignes de température, min : 1015 K; max : 1187 K; delta : 9,1 K

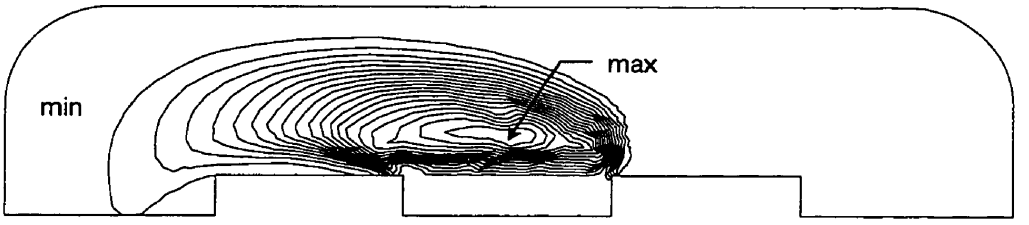
Figure 4-15 : Coupe verticale dans la partie affectée par le brûleur, cycle 2



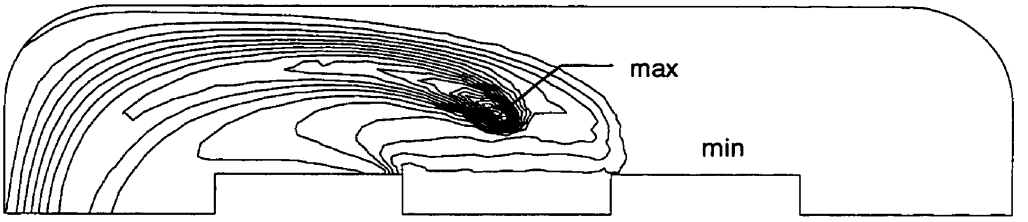
Champs de vecteurs-vitesse



Isolignes de concentration de C_6H_6, min : 8,4 E-7 kmol/kg; max : 1,68 E-5 kmol/kg; delta : 8,4 E-7 kmol/kg



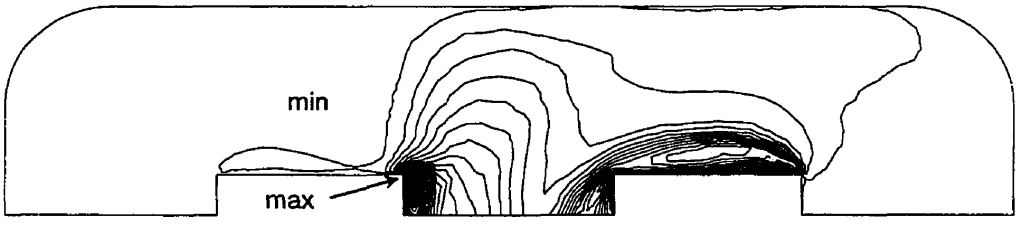
Isolignes de concentration de CO, min : 6,4 E-6 kmol/kg; max : 1,22 E-4 kmol/kg; delta : 6,4 E-6 kmol/kg



Isolignes de température, min : 1016 K; max : 1207 K; delta : 10,1 K

Figure 4-16 : Coupe verticale dans la partie affectée par le brûleur, cycle 3

Il est intéressant de noter d'abord les zones de recirculation qui existent sur les sections plates situées entre deux lits dans chacun des trois cycles. Cette recirculation entraîne une destruction complète des polluants dans la zone puisque le temps de résidence est très élevé. Elle diminue toutefois le volume utile de la chambre de combustion, ce qui diminue d'autant le temps de résidence de l'écoulement principal dans la chambre. Il existe aussi une seconde zone de recirculation plus petite à la sortie de la chambre de combustion dans la partie intérieure de l'écoulement. Tel qu'illustré à la figure 4-17, toutes ces zones de recirculation ont tendance à augmenter la turbulence dans son entourage. On remarque aussi sur les figure 4-14 à 4-16 le délai d'allumage dans la combustion du benzène, suivi d'une rapide oxydation. Sur les isolignes de CO, on remarque dans chacun des cycles une isoligne centrale circulaire qui correspond à un maximum de CO et qui coïncide avec la région ou le benzène est complètement transformé en CO. Les isolignes de température permettent d'observer la localisation du brûleur qui correspond à une source d'enthalpie. C'est à cet endroit que la température est maximale, elle est respectivement de 935 °C, 914 °C et 934 °C pour les cycles 1, 2 et 3. Cette température constitue la température moyenne pour une tranche de la chambre de combustion mesurant 62,8 cm de profondeur. Bien entendu, la température directement à la sortie du brûleur est bien plus élevée (1963 °C). Les isolignes de température présentent un aspect semblable aux isolignes de CO puisque la température est inversement proportionnelle à la concentration de CO et de benzène.



min : 0,13 kJ/kg max : 6,32 kJ/kg; delta : 0,13 kJ/kg

Figure 4-17 : Isolignes d'énergie cinétique de turbulence, cycle 2

Les isolignes de CO permettent de comparer l'efficacité de destruction dans chacun des cycles. Le tableau 4-6 rapporte l'efficacité de destruction, la température de sortie et le pourcentage de nœuds contrôlés par le taux de réaction de Magnussen pour chacun des trois cycles. Le calcul de l'efficacité de destruction tient compte du fait que 24 % du débit dans le lit de sortie est recirculé dans l'incinérateur. Le taux de destruction est donc égal à :

$$1-\frac{\text{Masse de polluants à la cheminée}}{\text{Masse de polluants à l'entrée de l'incinérateur}}$$

Pour calculer la masse de polluants, on calcule en fait la masse de carbone qui est sous forme de polluants. On remarque sur le tableau 4-6 que le cycle 1 est passablement plus efficace que les deux autres cycles. On pouvait s'attendre à ce résultat puisque le temps de résidence dans ce cycle est environ deux fois plus long que celui des deux autres cycles.

Tableau 4-6 : Résultats pour la coupe verticale dans la partie affectée

Cycle	Efficacité de destruction (%)	Température de sortie (K)	Pourcentage du domaine de calcul contrôlé par le taux de réaction de Magnussen (%)
1	99,70	1051,6	50,4
2	95,67	1065,9	64,4
3	97,86	1070,8	53,5

L'efficacité de destruction du cycle 3 est supérieure à celle du cycle 2 dans cette simulation. Nous verrons au cours des prochaines pages que ce n'est pas toujours le cas pour les différentes simulations. Plusieurs facteurs peuvent influencer le taux de destruction. L'emplacement du brûleur est un de ces

facteurs. Dans le cycle 2, les fumées sont chauffées par le brûleur presqu'à la sortie de la chambre de combustion alors que dans le cycle 3, les fumées sont chauffées dès leur entrée dans la chambre. Ceci confère aux fumées du cycle 3 un temps « efficace » de résidence plus long, i.e. un temps de résidence où la température des fumées est plus élevée. La turbulence et conséquemment le taux de réaction de Magnussen sont probablement plus élevés dans le cycle 3 que dans le cycle 2, ce qui expliquerait pourquoi la réaction est contrôlée à 64,4 % par la turbulence dans le cycle 2 alors qu'elle ne l'est qu'à 53,5 % dans le cycle 3. L'écoulement parallèle de la purge et des fumées dans le cycle 3 pourrait expliquer cette augmentation de turbulence. Le trajet plus long parcouru par les fumées de purge qui contiennent encore une certaine quantité de polluants dans le cycle 3 est également un facteur qui peut influencer le taux de destruction. Toutefois, en comparant les isolignes de CO des figures 4-15 et 4-16, on observe que le temps de résidence de l'écoulement principal est plus faible dans le cycle 3 que dans le cycle 2 à cause de l'écoulement parallèle des fumées et de la purge dans la chambre. Il est donc très difficile d'expliquer avec certitude pourquoi le cycle 3 procure dans cette simulation un meilleur rendement que le cycle 2.

Comme on peut le constater au tableau 4-6, il existe une certaine incohérence entre le taux de destruction et la température de sortie. Ceci s'explique par le fait que la concentration moyenne est pondérée sur la surface et le débit massique alors que la température moyenne à la sortie n'a été pondérée que sur la surface. Ceci n'affecte toutefois aucunement la simulation puisque que la température moyenne à la sortie n'a aucune fonction dans la simulation sauf celle d'informer l'utilisateur.

4.4.3 Coupe verticale de l'écoulement non-affecté par le brûleur

La figure 4-18 présente les dimensions de cette coupe verticale de la chambre de combustion représentant le volume de l'écoulement qui n'est aucunement affecté par le brûleur. Les figures 4-19 à 4-21 reprennent les même éléments que les figures 4-14 à 4-16 mais elles concernent cette fois-ci l'écoulement qui n'est pas affecté par le brûleur.

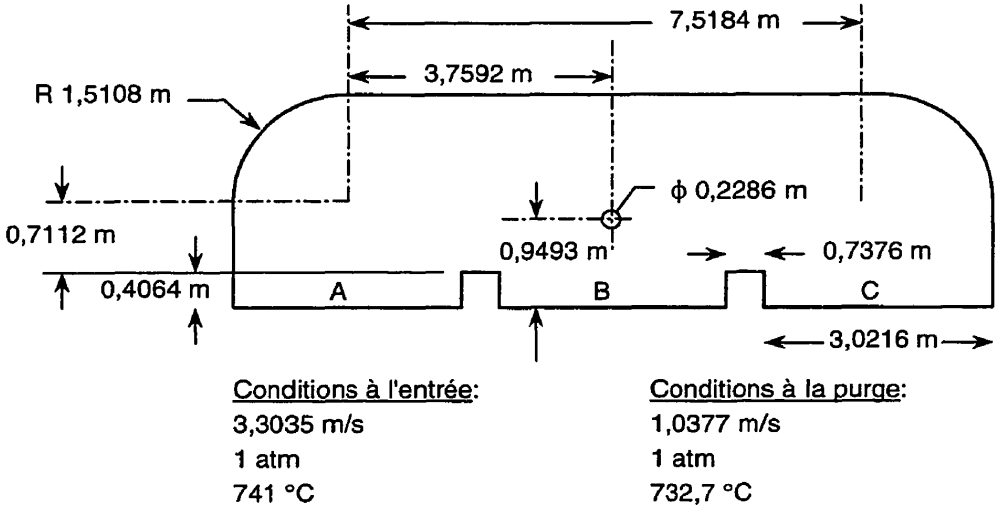
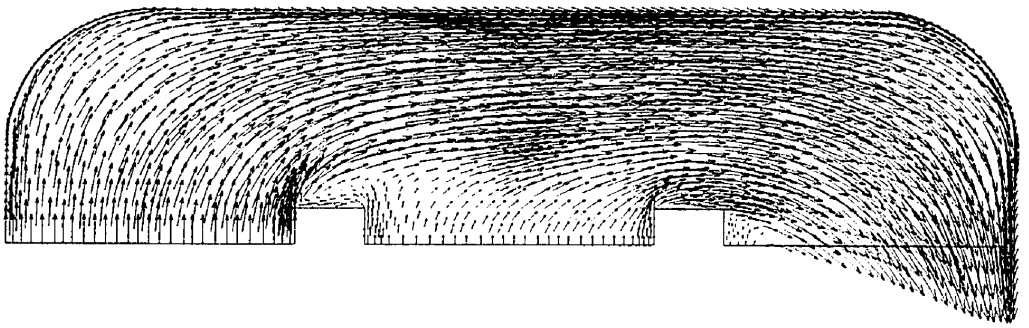
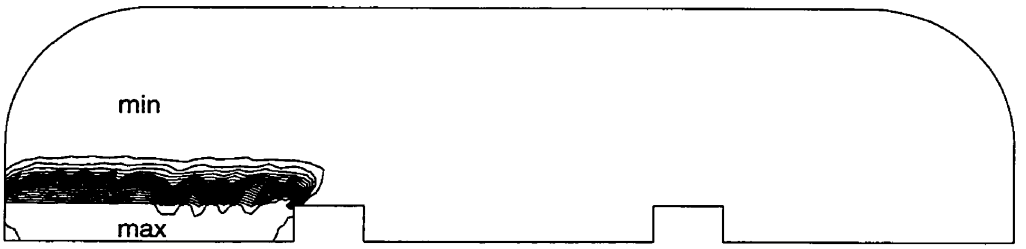


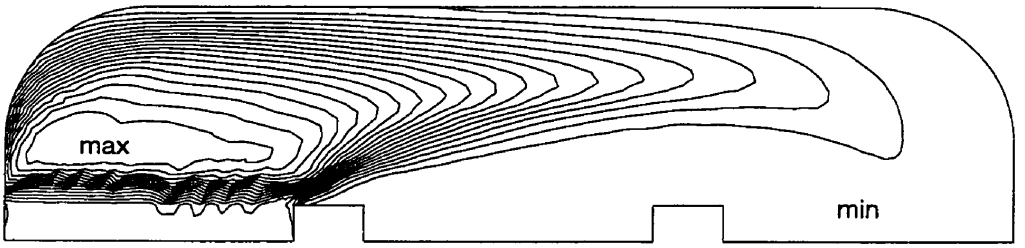
Figure 4-18 : Schéma de la coupe verticale de l'écoulement non-affecté par le brûleur



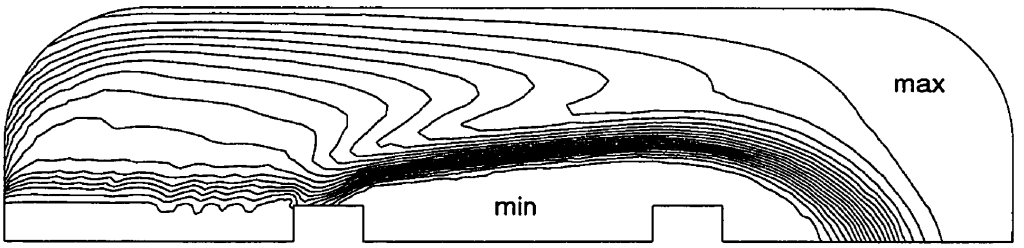
Champs de vecteurs-vitesse



Isolignes de concentration de C_6H_6, min : 8,4 E-7 kmol/kg; max : 1,68 E-5 kmol/kg; delta : 8,4 E-7 kmol/kg

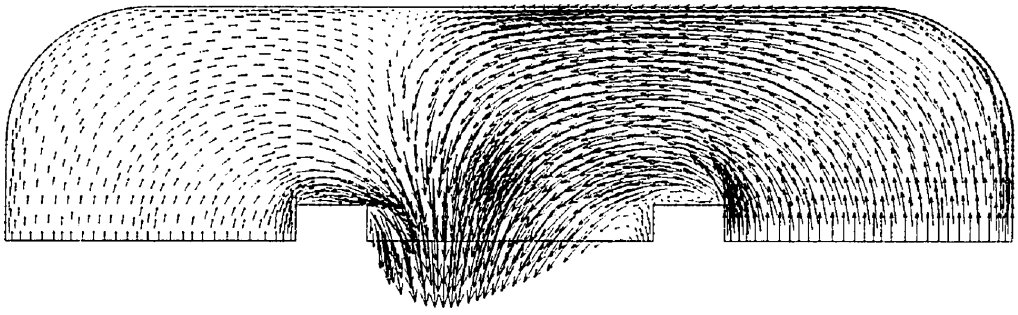


Isolignes de concentration de CO, min : 6,9 E-6 kmol/kg; max : 1,32 E-4 kmol/kg; delta : 6,9 E-6 kmol/kg

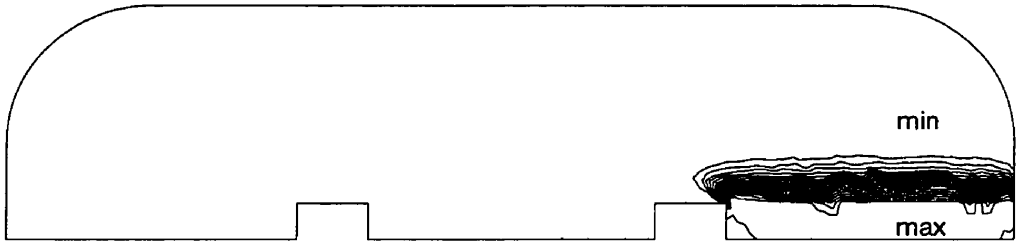


Isolignes de température, min : 1009 K; max : 1067 K; delta : 3,2 K

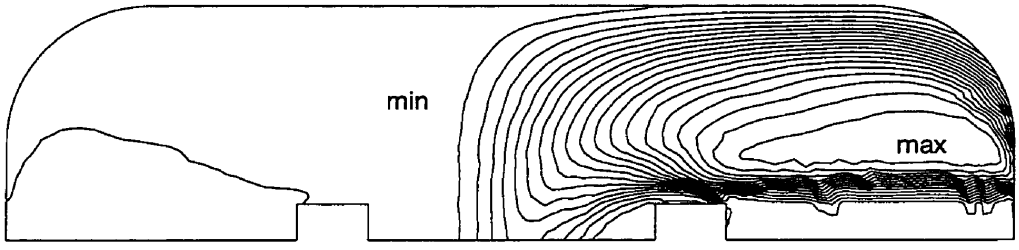
Figure 4-19 : Coupe verticale dans la section non-affectée par le brûleur, cycle 1



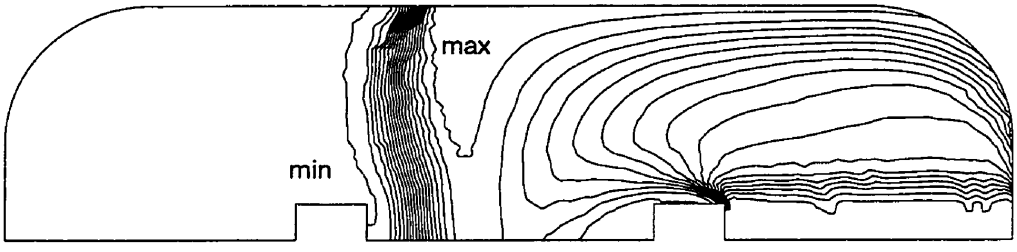
Champs de vecteurs-vitesse



Isolignes de concentration de C_6H_6, min : 8,4 E-7 kmol/kg; max : 1,68 E-5 kmol/kg; delta : 8,4 E-7 kmol/kg

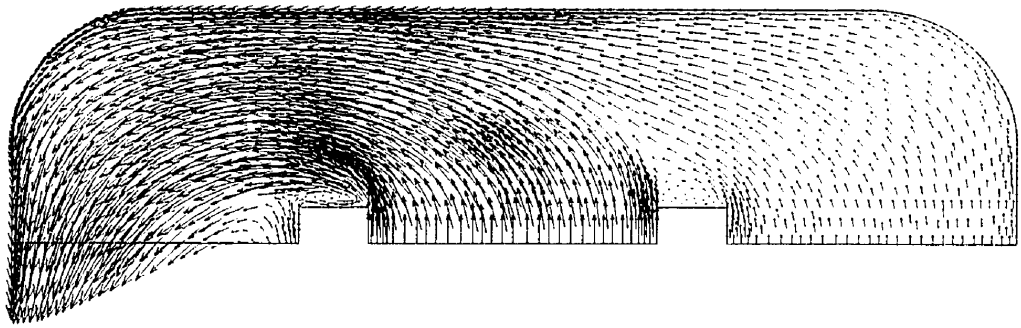


Isolignes de concentration de CO, min : 6,9 E-6 kmol/kg; max : 1,32 E-4 kmol/kg; delta : 6,9 E-6 kmol/kg

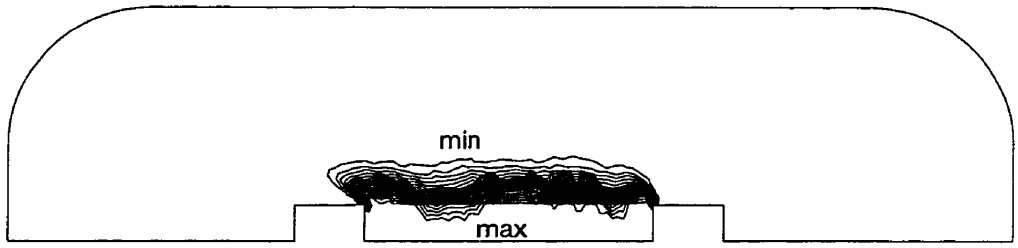


Isolignes de température, min : 1009 K; max : 1067 K; delta : 3,2 K

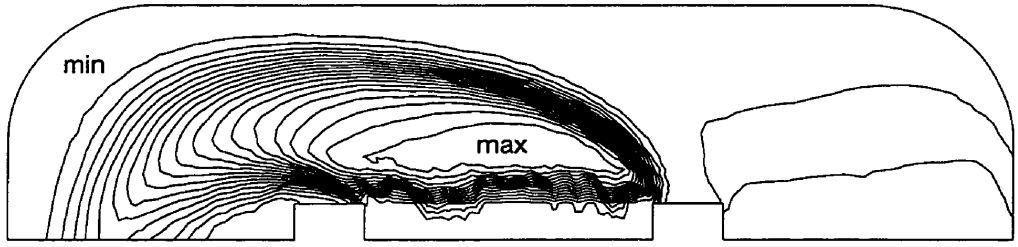
Figure 4-20 : Coupe verticale dans la section non-affectée par le brûleur, cycle 2



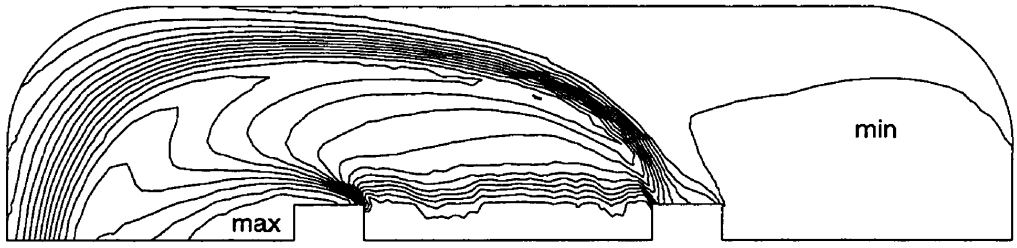
Champs de vecteurs-vitesse



Isolignes de concentration de C_6H_6, min : 8,4 E-7 kmol/kg; max : 1,68 E-5 kmol/kg; delta : 8,4 E-7 kmol/kg



Isolignes de concentration de CO, min : 6,8 E-6 kmol/kg; max : 1,29 E-4 kmol/kg; delta : 6,8 E-6 kmol/kg



Isolignes de température, min : 1009 K; max : 1067 K; delta : 3,2 K

Figure 4-21 : Coupe verticale dans la section non-affectée par le brûleur, cycle 3

On observe généralement les mêmes tendances que dans l'écoulement affecté par le brûleur. Les différences majeures se situent au niveau des isolignes de températures et du classement dans l'efficacité des trois cycles. On remarque qu'il n'y a aucune source d'enthalpie sur les isolignes de température. Ceci permet de mieux discerner le champ de températures puisqu'il n'y a pas de forts gradients concentrés de température. Le tableau 4-7 montre que le cycle 1 est toujours le cycle le plus efficace mais cette fois-ci, le cycle 3 est le moins efficace. La géométrie de la chambre qui est différente par rapport à la coupe précédente peut expliquer en partie ce renversement mais l'absence du brûleur est un facteur non-négligeable. On observe enfin que les zones de recirculation sur les paliers horizontaux sont moins importantes que dans la coupe précédente (dû au fait que les paliers sont moins larges) mais les zones de recirculation à la sortie sont plus fortes dans cette coupe non-affectée par le brûleur.

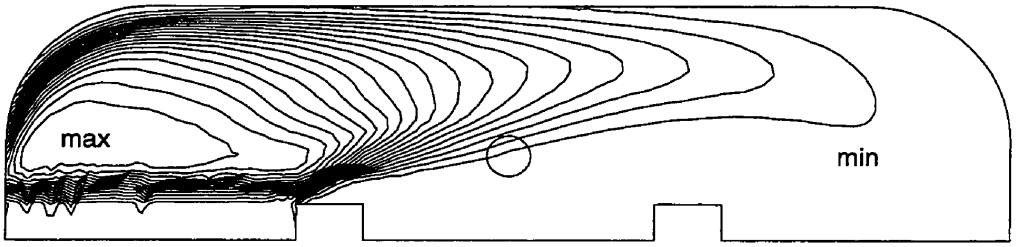
Tableau 4-7 : Résultats pour la coupe verticale dans la partie non-affectée

Cycle	Efficacité de destruction (%)	Température de sortie (K)	Pourcentage du domaine de calcul contrôlé par le taux de réaction de Magnussen (%)
1	98,86	1035,3	56,8
2	91,12	1055,5	79,4
3	86,70	1059,7	66,8

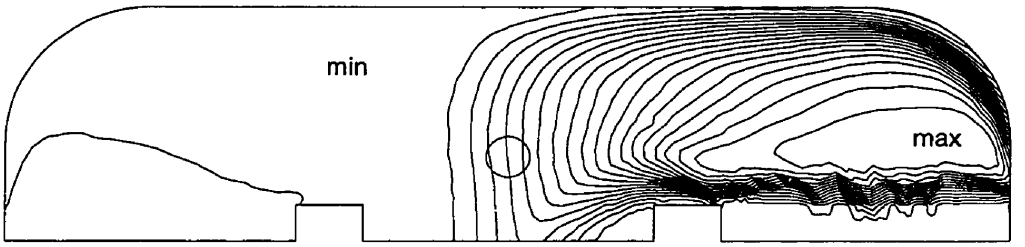
4.4.4 Coupe verticale centrale

Une troisième coupe a été simulée afin de modéliser l'écoulement général dans la chambre de combustion. Cette coupe est effectuée au centre de la chambre de combustion. Le schéma de la coupe se trouve à la figure 4-2. La valeur de « L » utilisée dans l'équation (2-14) pour établir le volume de fumées qui capte la chaleur du brûleur est de 2,86 m, soit la distance entre la sortie du brûleur et la paroi opposée de la chambre de combustion.

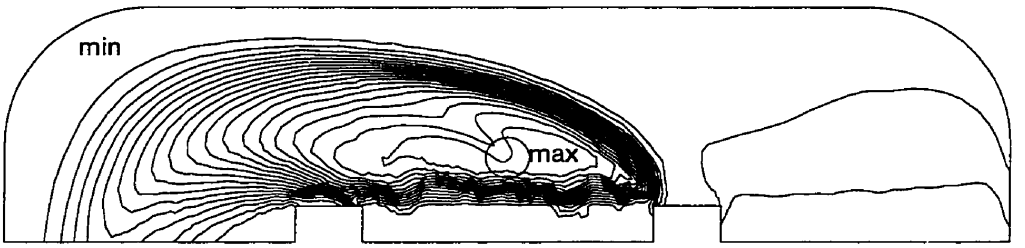
La figure 4-22 illustre les isolignes de concentration du CO pour chacun des trois cycles dans la coupe centrale. Le cercle indique l'emplacement du brûleur. Dû à une erreur d'interprétation, le diamètre de ce cercle à l'affichage n'est pas à l'échelle mais plutôt deux fois plus gros. Cette erreur n'affecte toutefois par le calcul mais seulement l'affichage. On peut voir très clairement sur le cycle 3 l'influence du brûleur sur la concentration du CO. Le CO brûle plus rapidement à cet endroit ainsi que sur la ligne de courant passant par le brûleur étant donné que la température et le nombre de radicaux OH sont plus élevés. Le tableau 4-8 résume les performances de l'écoulement simulé par cette coupe. On observe que les résultats diffèrent peu de ceux obtenus par la coupe verticale de l'écoulement non-affecté par le brûleur malgré le fait que la coupe centrale simule l'apport du brûleur. Deux raisons expliquent ce résultat. Premièrement, la géométrie des deux coupes diffère peu étant donné qu'elles ne sont distantes que de 20 cm. Deuxièmement, le brûleur ne fonctionne qu'à 2% de sa capacité totale. Il ne procure à l'écoulement qu'un apport d'énergie de 32 kW environ. De plus, pour les besoins de cette simulation, cette énergie est absorbée par les fumées sur une profondeur de 2,86 m. L'apport sur la quantité totale de masse à chauffer est donc presque négligeable.



Cycle 1, min : 6,9 E-6 kmol/kg; max : 1,31 E-4 kmol/kg; delta : 6,9 E-6 kmol/kg



Cycle 2, min : 6,9 E-6 kmol/kg; max : 1,31 E-4 kmol/kg; delta : 6,9 E-6 kmol/kg



Cycle 3, min : 6,8 E-6 kmol/kg; max : 1,30 E-4 kmol/kg; delta : 6,8 E-6 kmol/kg

Figure 4-22 : Isolignes de concentrations de CO dans la coupe verticale centrale

Tableau 4-8 : Résultats pour la coupe verticale dans la partie centrale

Cycle	Efficacité de destruction (%)	Température de sortie (K)	Pourcentage du domaine de calcul contrôlé par le taux de réaction de Magnussen (%)
1	99,19	1037,0	59,0
2	91,60	1056,4	78,4
3	87,86	1060,8	66,1

4.5 Conclusion

Ce chapitre a permis de constater d'abord que le taux de pénétration de l'écoulement provenant du brûleur n'est pas très important. Par rapport à la distance totale entre la tête du brûleur et la paroi opposée de la chambre, le jet du brûleur ne pénètre qu'à 15,4%. L'aéraulique de l'écoulement principal est donc faiblement perturbé par le jet du brûleur. Cette perturbation se fait encore moins sentir dans les régions qui ne sont pas situées directement devant le brûleur. Pour la simulation des coupes verticales de la chambre, seule la source de chaleur provenant du brûleur a été modélisée, la source de masse ne pouvant l'être puisqu'elle est dans un plan normal au plan de l'écoulement. Il est cependant justifiable de ne pas simuler cette source de masse, étant donné le faible degré de pénétration et de perturbation sur l'écoulement principal. Le jet provenant du brûleur ne représente qu'environ 0,2% du débit volumique des fumées.

La figure 4-23 résume le rendement de destruction de chacune des simulations présentées dans ce chapitre alors que le tableau 4-9 présente les rendements moyens de chacune des coupes. On observe également sur ce tableau une moyenne pondérée sur le débit volumique circulant dans les coupes affectées et non-affectées par le brûleur. Cette moyenne de 93.11% est celle qui est la plus représentative du rendement global de l'incinérateur. Le cycle 1 est sans contredit le cycle le plus efficace alors que le rendement des deux autres cycles semble être plus sensible aux modifications géométriques et thermiques, spécialement pour le cycle 3. Le rendement moyen de chacun des cycles 1, 2 et 3 pondéré sur le débit volumique des volumes affectés et non-affectés par le brûleur est respectivement de 98,99%, 91,85% et 88,49%.

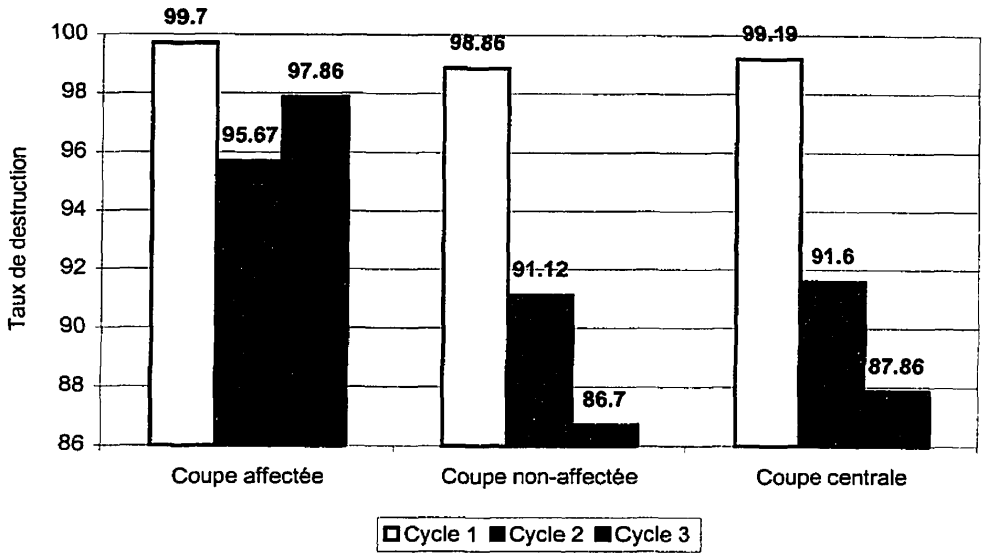


Figure 4-23 : Taux de destruction des polluants dans les coupes verticales

Tableau 4-9 : taux de destruction moyen de chacune des coupes

Endroit	Taux de destruction moyen
Coupe affectée par le brûleur	97,74 %
Coupe non-affectée par le brûleur	92,23 %
Moyenne globale	**93,11 %**
coupe centrale	92,88 %

Tel que mentionné dans l'introduction, l'objectif principal de ce mémoire n'est pas de développer un modèle de combustion qui permettra de prédire avec exactitude le taux de destruction des composés chimiques, mais plutôt d'optimiser ce taux de destruction et observer les tendances générales au niveau des champs de vitesse, de température et de concentration des polluants. Bien que ce ne soit pas le but visé, le modèle semble refléter très

bien la réalité puisque le rendement global de 93,11 % mentionné au tableau 4-9 s'approche du rendement mesuré expérimentalement sur l'incinérateur B20 simulé dans le cadre de ce mémoire, soit un rendement de 92,1%.

Il a été mentionné au chapitre 3 qu'en absence de production de CO, un facteur de relaxation de 30% sur l'équation de transport du CO est suffisant pour assurer la convergence de la solution. Il en est autrement différent pour les solutions obtenues dans le présent chapitre. La production parfois brusque et la destruction de CO dans la chambre de combustion rendent très instable l'équation de transport. Ainsi, un facteur de relaxation de 1 % a été nécessaire dans la majorité des cas et ce facteur a parfois même dû être diminué aux alentours de 0,5%. Une telle relaxation de l'équation de transport augmente énormément le temps de calcul nécessaire à l'obtention d'une solution. Le critère de convergence utilisé est toutefois très sévère. Ce critère mentionne que la solution n'a pas convergée tant que le rapport défini ci-dessous n'est pas inférieur à 1E-5.

$$\frac{\text{Plus grande correction de CO sur le domaine de calcul}}{\text{valeur moyenne de CO}} \leq 1\text{E}-5$$

Certains auteurs utilisent la correction moyenne sur le domaine de calcul plutôt que la correction la plus importante.

Ce chapitre a permis d'observer les tendances. Le prochain chapitre tentera d'optimiser le rendement de destruction en analysant l'influence que provoquent certaines modifications des paramètres dans la chambre de combustion sur le taux de destruction.

CHAPITRE 5 : OPTIMISATION DU RENDEMENT DE DESTRUCTION

LA VALIDITÉ DES MODÈLES de combustion pour des fins d'ingénierie a été démontrée dans le chapitre 3. Ceci nous a permis de passer à l'étape suivante dans le chapitre 4, soit celle d'observer les tendances générales dans la chambre de combustion en ce qui concerne les champs de vecteurs, les isolignes de concentration, de température et d'énergie cinétique de turbulence. La validation des modèles et la concordance des résultats obtenus dans la chambre de combustion de l'incinérateur avec les taux de destruction expérimentaux, nous permettent maintenant de passer à l'étape finale, c'est-à-dire l'optimisation du rendement de destruction des polluants.

5.1 Description des modifications sur la chambre de combustion

Toutes les simulations réalisées dans ce chapitre sont effectuées sur la coupe verticale centrale décrite au chapitre précédent. Cette coupe permet d'obtenir un aperçu général de l'écoulement dans la chambre de combustion. En plus de la simulation étalon qui sert de base de comparaison pour les autres simulations, un total de 10 modifications apportées sur les paramètres de la

chambre de combustion sont simulées et analysées sommairement. Les modifications portent sur l'emplacement du brûleur, la géométrie de la chambre et le débit de purge. Les prochaines sous-sections décrivent chacune de ces modifications.

5.1.1 Simulation étalon

Les conditions utilisées pour la simulation dans le chapitre 4 sont celles d'une installation où la concentration de polluants est plus élevée qu'à l'habitude. Tel que mentionné dans le chapitre précédent, le brûleur sur cette installation ne fonctionne qu'à 2% de sa capacité. Afin d'être un peu plus représentatif des installations normales mais surtout afin de mesurer de façon plus précise l'impact de l'enthalpie provenant du brûleur, il a été décidé pour ce chapitre de porter la puissance au brûleur à une valeur d'environ 128 kW, soit quatre fois supérieure à celle utilisée pour la simulation au chapitre 4. Cette simulation où tous les paramètres sont identiques à la simulation de la coupe centrale du chapitre 4 à l'exception de la puissance du brûleur constitue la simulation étalon sur laquelle toutes les autres modifications sont comparées. La figure 5-1 reprend les dimensions utilisées pour le modèle étalon.

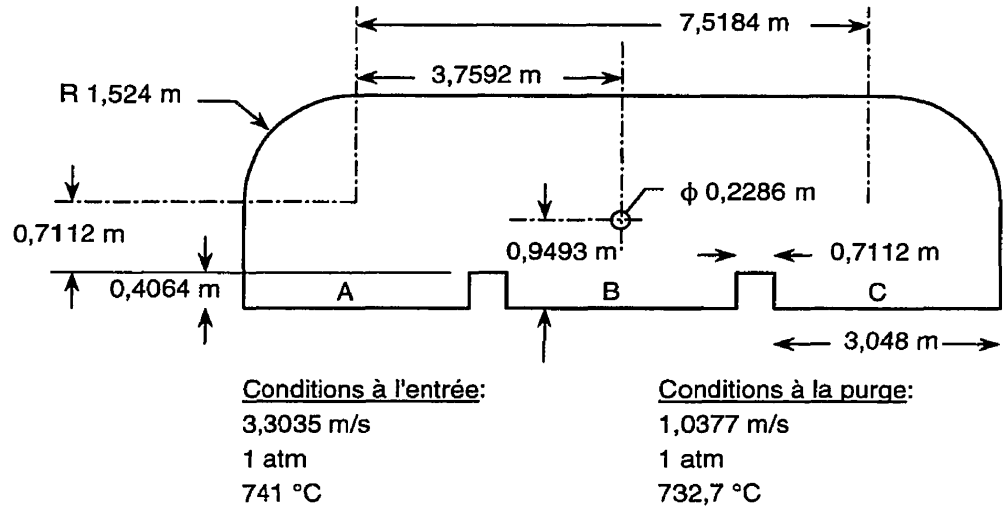


Figure 5-1 : Schéma de la coupe verticale de la chambre de combustion pour la simulation étalon

5.1.2 Essai 1 : brûleur positionné plus haut

Pour cet essai, le brûleur est déplacé sur un axe vertical de 45 cm vers le haut. Cette modification permettra de juger de l'impact de la flamme provenant du brûleur sur le taux de destruction des polluants. Rappelons que le taux de réaction des combustibles pour les nœuds de calculs situés en face du brûleur est plus élevé que pour ceux situés ailleurs dans la chambre de combustion. La température plus élevée mais surtout la présence plus importante de radicaux OH est responsable de cette modification du taux de réaction. La figure 5-2 illustre le nouvel emplacement du brûleur.

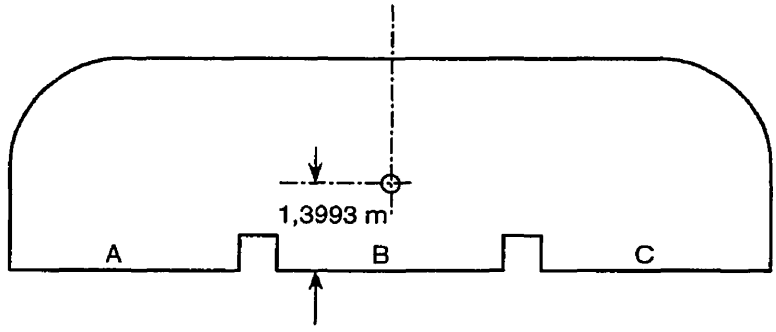


Figure 5-2 : Schéma de l'essai 1 : brûleur plus haut

5.1.3 Essai 2 : brûleur positionné plus bas

La modification pour cet essai est semblable à la modification précédente sauf que cette fois-ci, le brûleur est positionné 45 cm plus bas que le modèle étalon. La figure 5-3 illustre la position du brûleur.

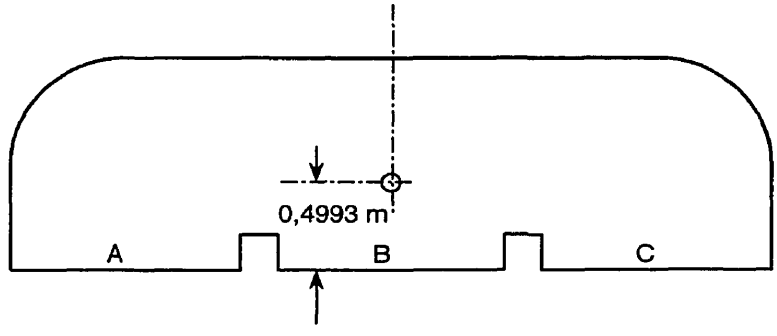


Figure 5-3 : Schéma de l'essai 2 : brûleur plus bas

5.1.4 Essai 3 : Débit de purge plus grand

La purge constitue l'écoulement secondaire de gaz dans la chambre de combustion. Son débit est normalement fixé à une valeur oscillant entre 15 et 25 % du débit de l'écoulement dans le lit de sortie. Cet essai consiste à vérifier l'impact d'une modification de ce débit de purge. Le pourcentage de débit de purge est doublé par rapport au modèle étalon. Il est porté de 24% à 48 % du débit de l'écoulement dans le lit de sortie. La valeur numérique du débit passe ainsi de 8077 Nm^3/h à 23612 Nm^3/h. Au niveau des conditions frontières sur la simulation, le changement se situe au niveau de la vitesse d'entrée à la purge qui passe alors de 1,0377 m/s à 3,0341 m/s.

5.1.5 Essai 4 : Débit de purge plus faible

La modification dans cet essai est semblable à celle de l'essai précédent sauf que cette fois-ci, le débit de purge est porté à 12 % du débit de l'écoulement dans le lit de sortie. Le débit de purge est donc de 3245 Nm^3/h. La condition frontière sur la vitesse à l'entrée de purge est de 0,417 m/s.

5.1.6 Essai 5 : Chambre de combustion plus grande

Cet essai sert à mesurer l'impact d'une modification de la hauteur de la chambre de combustion sur l'écoulement des fumées et de façon ultime sur le

taux de destruction. Le toit de la chambre de combustion est rehaussé de 2 pieds (60,96 cm). La figure 5-4 illustre cette modification.

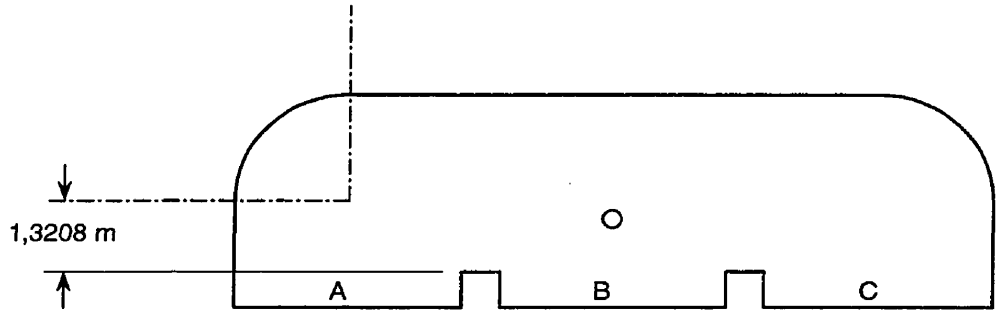


Figure 5-4 : Schéma de l'essai 5 : chambre de combustion plus grande

5.1.7 Essai 6 : Chambre de combustion plus petite

Dans cet essai, le toit de la chambre de combustion est rabaissé de 2 pieds (60,96 cm). La figure 5-5 illustre la modification.

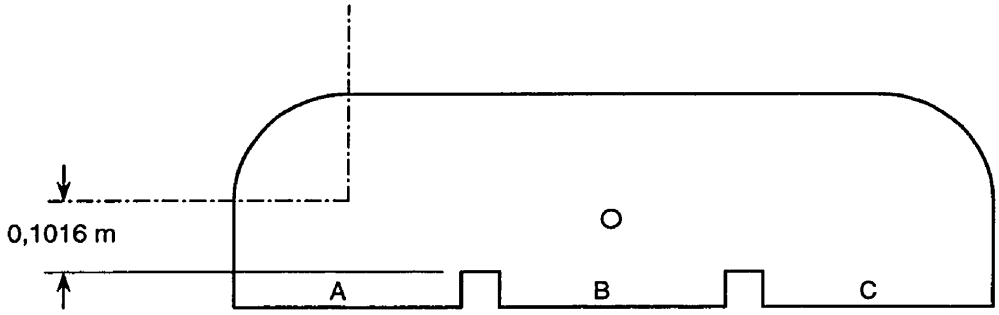


Figure 5-5 : Schéma de l'essai 6 : chambre de combustion plus petite

5.1.8 Essai 7 : Chambre de combustion plus large

Les lits de l'incinérateur sont éloignés d'une certaine distance l'un de l'autre. Le but des deux prochains essais est de modifier cette distance entre les lits. Pour cet essai, les lits sont éloignés l'un de l'autre de 2 pieds (60,96 cm) supplémentaires. La figure 5-6 présente la modification.

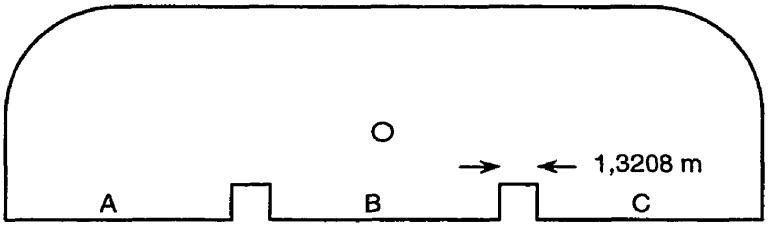


Figure 5-6 : Schéma de l'essai 7 : Chambre de combustion plus large

5.1.9 Essai 8 : Chambre de combustion plus étroite

Au lieu d'éloigner les lits comme dans l'essai précédent, cet essai consiste à rapprocher les lits de 16 pouces (42,64 cm). La distance entre les lits est donc de 12 pouces (30,48 cm). Cette distance constitue le minimum permis physiquement puisque l'isolant à l'intérieur de chacun des lits mesure 6 pouces (15,24 cm) d'épaisseur. La figure 5-7 illustre la dimension modifiée pour cet essai.

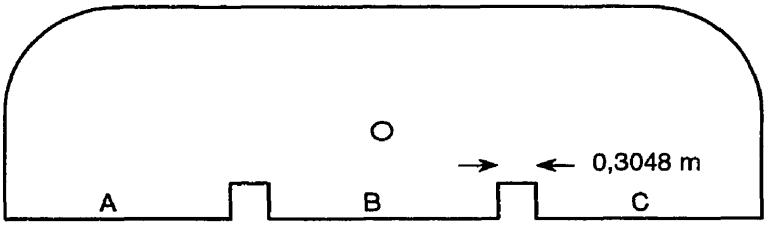


Figure 5-7 : Schéma de l'essai 8 : Chambre de combustion plus étroite

5.1.10 Essai 9 : Lit de l'incinérateur plus grand

Il existe un espace libre dans le haut des lits de l'incinérateur ou il n'y a pas de sellettes de céramique. La frontière inférieure de la chambre de combustion débute justement à cette limite des sellettes de céramique. Les deux derniers essais consistent à modifier cette hauteur libre des lits de l'incinérateur, sans modifier la hauteur des sellettes de céramique. Dans l'essai 9, les lits sont agrandis de 16 pouces (40,64 cm). Le brûleur n'est pas déplacé mais puisque sa position est déterminée par rapport à la frontière inférieure de la chambre de combustion, la figure 5-8 procure sa nouvelle cote de positionnement.

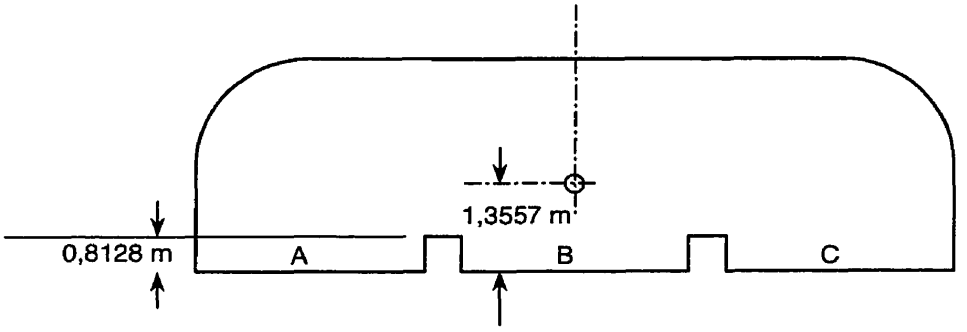


Figure 5-8 : Schéma de l'essai 9 : lit plus grand

5.1.11 Essai 10 : Lit de l'incinérateur plus petit

Ce dernier essai consiste à diminuer la hauteur du lit de 16 pouces (40,64 cm). Étant donné que l'espace libre dans le haut du lit est de 16 pouces sur le modèle étalon, la hauteur libre au-dessus des lits a une valeur nulle dans cet essai. La frontière inférieure de la chambre de combustion est donc située au même niveau que le plateau situé entre les lits tel qu'illustré sur la figure 5-9.

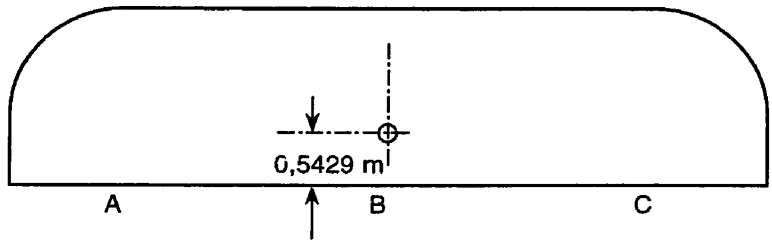
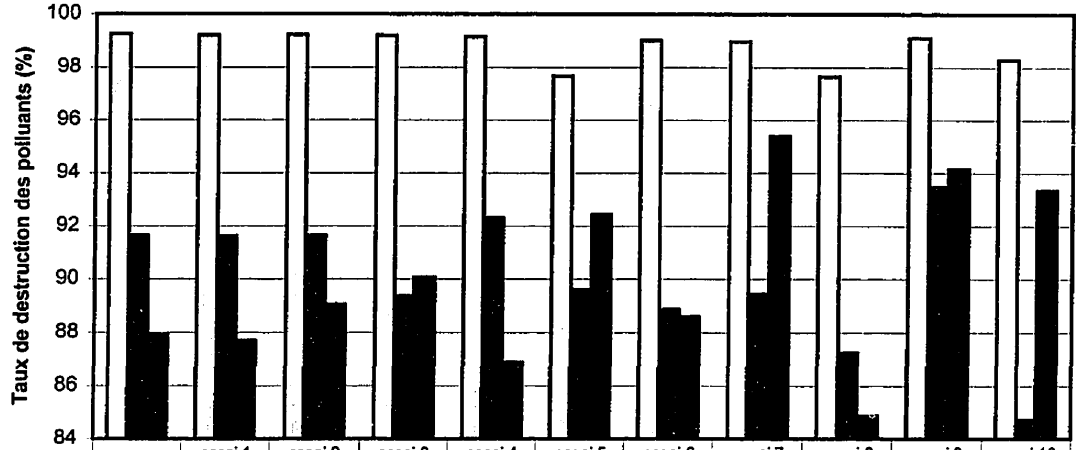


Figure 5-9 : Schéma de l'essai 10 : lit plus petit

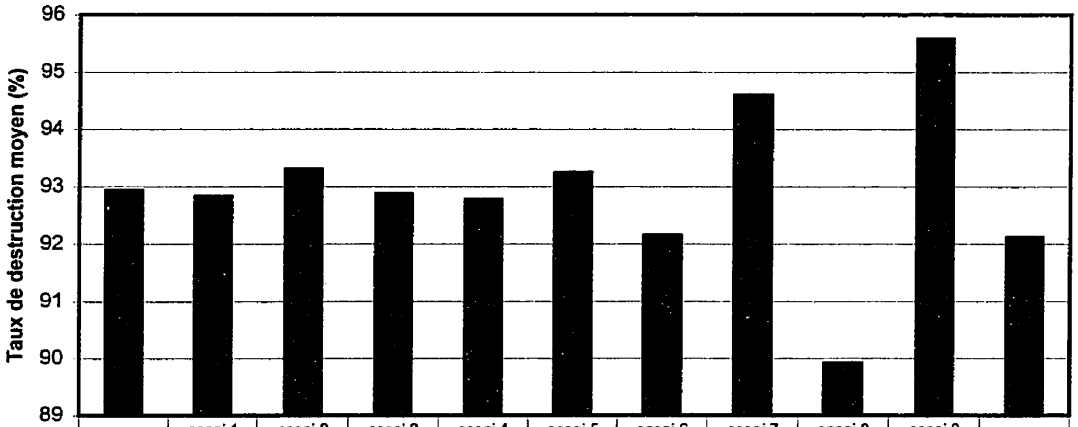
5.2 Analyse des résultats

Puisque l'objectif premier de ce chapitre est d'optimiser le rendement de destruction des polluants dans la chambre de combustion, le critère de comparaison des différentes modifications sera le taux de destruction. Le tableau 5-1 résume les taux de destruction obtenus pour chacun des cycles et chacune des modifications. Le tableau 5-2 montre la moyenne sur les trois cycles du taux de destruction pour chacune des modifications. La première observation qui ressort du tableau 5-1 est la supériorité du cycle 1 par rapport aux deux autres cycles, peu importe la modification simulée. Le temps de résidence supérieur que procure ce cycle semble expliquer ce rendement élevé. En effet, ce cycle est le seul qui présente une entrée des fumées à une extrémité de la chambre (lit A) et une sortie des fumées à l'autre extrémité (lit C). La modification des différents paramètres a peu d'impact sur le cycle 1 puisque les fumées sont presque complètement détruites bien avant la sortie de la chambre de combustion. Les figures A-1 à A-22 de l'annexe A permettent au lecteur, intéressé d'en savoir un peu plus, d'observer les isolignes de concentration du CO ainsi que les vecteurs vitesses pour chacun des cycles de chacun des essais. On remarque clairement sur ces figures que peu importe l'essai, la destruction est presque complète dans le cycle 1.



	Étalon	essai 1 Brûleur plus haut	essai 2 Brûleur plus bas	essai 3 Grande purge	essai 4 Petite purge	essai 5 Chambre plus haute	essai 6 Chambre plus basse	essai 7 Chambre plus large	essai 8 Chambre plus étroite	essai 9 Lit plus grand	essai 10 Lit plus petit
□ cycle 1	99,24	99,20	99,22	99,20	99,14	97,67	99,01	98,96	97,65	99,11	98,30
■ Cycle 2	91,63	91,62	91,64	89,37	92,29	89,61	88,86	89,43	87,24	93,48	84,71
■ Cycle 3	87,94	87,68	89,04	90,06	86,88	92,43	88,59	95,39	84,87	94,16	93,33

Tableau 5-1 : Taux de destruction des polluants en fonction des cycles et des modifications



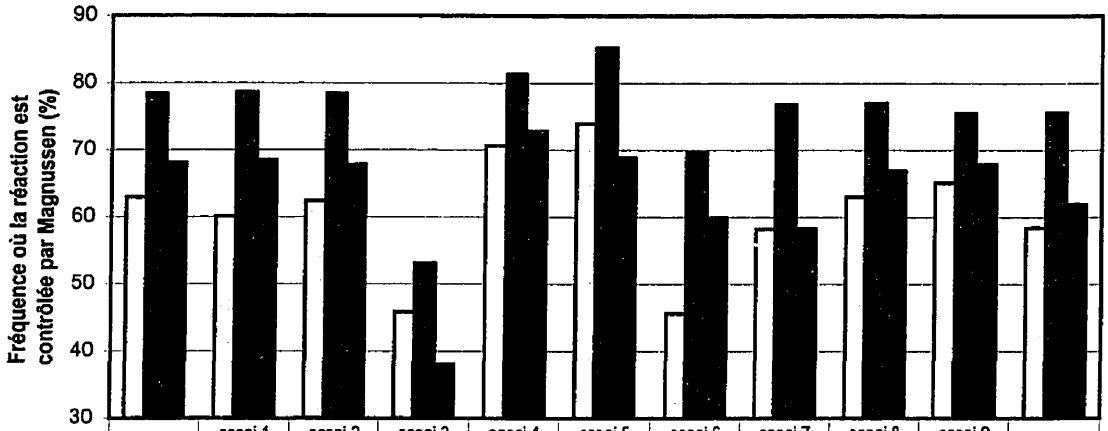
	Étalon	essai 1 Brûleur plus haut	essai 2 Brûleur plus bas	essai 3 Grande purge	essai 4 Petite purge	essai 5 Chambre plus haute	essai 6 Chambre plus basse	essai 7 Chambre plus large	essai 8 Chambre plus étroite	essai 9 Lit plus grand	essai 10 Lit plus petit
Moyenne	92,94	92,83	93,30	92,88	92,77	93,24	92,15	94,59	89,92	95,58	92,11

Tableau 5-2 : Taux de destruction moyen des polluants en fonction des modifications

Il ressort du tableau 5-1 une seconde observation fort intéressante sur le comportement des cycles 2 et 3. À deux exceptions près, les modifications influencent de façon contradictoire le taux de destruction des cycles 2 et 3. Ainsi, lorsqu'une modification augmente le taux de destruction du cycle 2, le cycle 3 voit son rendement diminuer et vice versa. Seuls les essais 8 et 9, soit une chambre plus étroite et un lit plus grand, ne présentent pas ce comportement étrange. Il est très difficile d'expliquer ce phénomène mais il est certain que le parcours différent emprunté par les fumées dans les cycles 2 et 3 est grandement responsable de cette observation. Les fumées dans le cycle 2 lèchent les parois de la chambre durant presque tout leur séjour dans la chambre tel qu'illustré à la figure 5-10. Dans le cycle 3 par contre, les fumées ne sont jamais en contact avec la paroi supérieure de la chambre mais plutôt avec les gaz de purge tel qu'on peut le constater sur la figure 5-11.

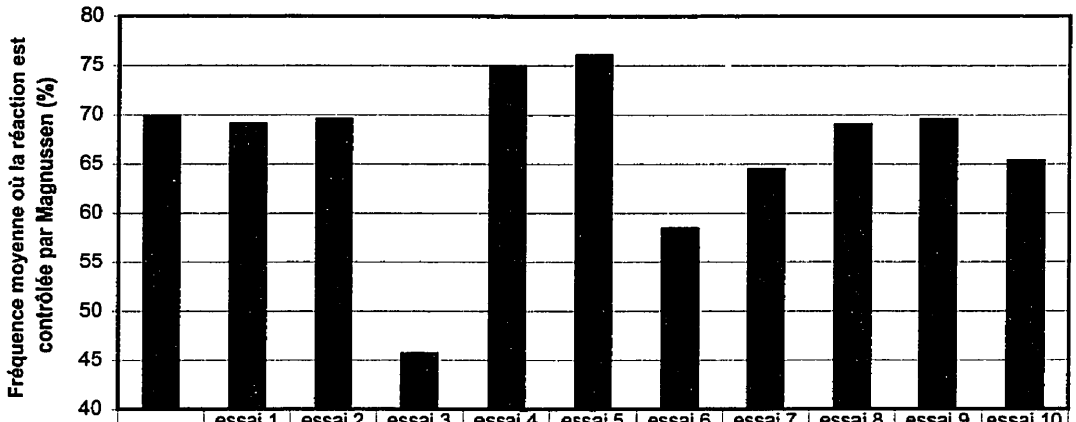
Le tableau 5-2 fournit les résultats les plus concrets et les plus intéressants au niveau de l'ingénierie de la chambre de combustion, le taux de destruction moyen pour chacun des essais. Ce taux permet de quantifier le rendement global de l'incinérateur en fonction de chacune des modifications. Comme on pouvait s'y attendre de façon intuitive, les chambres présentant le plus grand volume ont offert globalement les meilleurs résultats. Ainsi les essais 5, 7 et 9, soit une chambre plus grande, plus large ou des lits plus hauts permettent d'obtenir respectivement un rendement global de 93,24%; 94,59% et 95,58% par rapport à 92,94% pour le modèle étalon. Il est intéressant toutefois de comparer ces rendements en fonction de la quantité de métal additionnel que nécessite chacune de ces trois modifications. Puisque les essais 5, 7 et 9 requièrent respectivement 15,00; 7,57 et 11,67 m^2 de métal additionnel, l'essai 5 apparaît comme le moins intéressant des trois.

La relation proportionnelle entre le taux de destruction global et le volume de la chambre de combustion n'est cependant pas vérifiée pour chacun des cycles. Une augmentation du volume a, par exemple, fait diminuer le rendement du cycle 2 pour les essais 5 et 7. De même, une diminution du volume de la chambre a curieusement amélioré le rendement du cycle 3 dans les essais 6 et 10. Ceci démontre que le rendement n'est pas seulement fonction du temps de résidence mais bien des trois « T », soit le temps, la température et la turbulence. En effet, les différentes modifications influencent le champ de température dans la chambre ainsi que le niveau de mélange et de turbulence des fumées. Le tableau 5-3 illustre d'ailleurs le pourcentage des nœuds de calcul où le taux de réaction de type Magnussen a contrôlé la réaction, pour chacun des cycles et chacune des modifications. On observe sur ce tableau que l'essai 5 pour le cycle 2 est l'essai où la fréquence de contrôle de la réaction par le niveau de turbulence est la plus élevée. Accroître la hauteur de la chambre augmente donc le temps de résidence dans la chambre de combustion mais diminue le niveau de turbulence dans la chambre. Ceci provient du fait que la paroi supérieure de la chambre se trouve plus éloignée de l'entrée. Or, cette paroi supérieure est responsable de la bifurcation de l'écoulement. La figure 5-10 illustre d'ailleurs le parcours suivi par les fumées dans le cycle 2 de l'essai 5. Plus cette paroi est éloignée, plus le rayon de courbure de l'écoulement est élevé et plus faible est le niveau de mélange entre les gaz brûlés et le combustible. La paroi joue aussi le rôle de freiner l'écoulement étant donné les forces visqueuses provoquées par le frottement sur la paroi. Cette paroi intérieure de la chambre de combustion est d'ailleurs fort rugueuse puisqu'elle est recouverte de blocs isolants composés de fibres de céramique. L'influence de cette modification dans l'essai 5 a été peu marquée sur le cycle 3 puisque l'écoulement principal est séparé de la paroi supérieure par l'écoulement secondaire de purge tel qu'illustré par la figure 5-11.



	Étalon	essai 1 Brûleur plus haut	essai 2 Brûleur plus bas	essai 3 Grande purge	essai 4 Petite purge	essai 5 Chambre plus haute	essai 6 Chambre plus basse	essai 7 Chambre plus large	essai 8 Chambre plus étroite	essai 9 Lit plus grand	essai 10 Lit plus petit
Cycle 1	62,9	60,1	62,4	45,8	70,6	73,9	45,6	58,2	63,0	65,1	58,4
Cycle 2	78,4	78,6	78,4	53,1	81,3	85,3	69,6	76,8	77,0	75,5	75,6
Cycle 3	68,1	68,5	67,8	38,0	72,8	68,8	59,9	58,3	66,9	67,9	61,9

Tableau 5-3 : Fréquence où la réaction est contrôlée par Magnussen en fonction des cycles et des modifications



	Étalon	essai 1 Brûleur plus haut	essai 2 Brûleur plus bas	essai 3 Grande purge	essai 4 Petite purge	essai 5 Chambre plus	essai 6 Chambre plus	essai 7 Chambre plus	essai 8 Chambre plus	essai 9 Lit plus grand	essai 10 Lit plus petit
Moyenne	69,8	69,1	69,5	45,6	74,9	76,0	58,4	64,4	69,0	69,5	65,3

Tableau 5-4 : Fréquence moyenne où la réaction est contrôlée par Magnussen en fonction des modifications

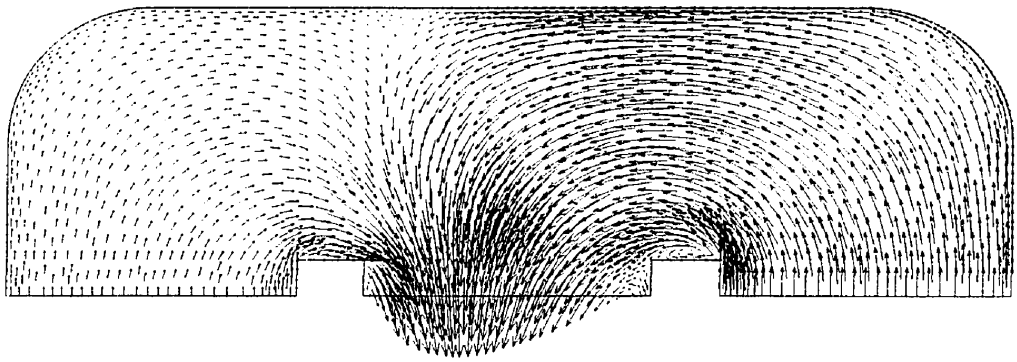


Figure 5-10 : Champ de vecteurs-vitesse, cycle 2, essai 5 : chambre plus haute

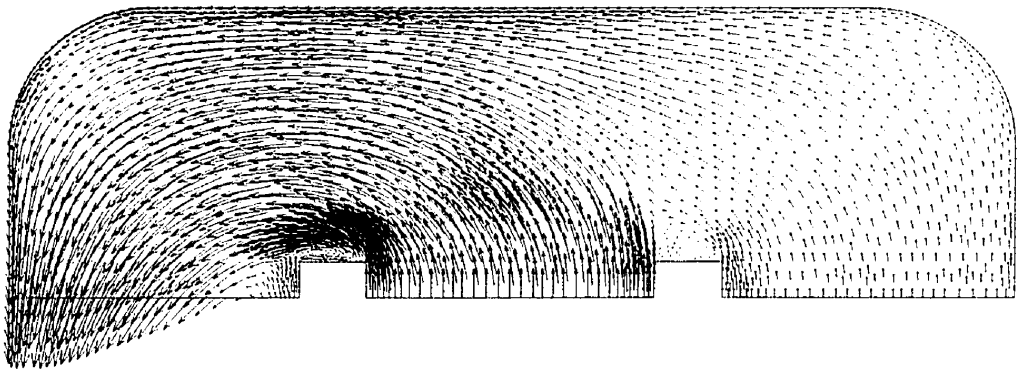


Figure 5-11 : Champ de vecteurs-vitesse, cycle 3, essai 5 : chambre plus haute

Comme le souligne le tableau 5-1, la modification du débit de purge n'a pas un impact significatif sur le taux de destruction du cycle 1 étant donné le rendement déjà très élevé de l'essai étalon. Un débit de purge plus élevé diminue toutefois le taux de destruction des polluants pour le cycle 2 mais procure un effet inverse sur le cycle 3. D'autre part, une diminution du débit de purge augmente

le rendement de destruction du cycle 2 mais diminue celui du cycle 3. Le comportement du cycle 2 s'explique par le fait qu'une augmentation du débit de purge diminue le volume de la chambre de combustion disponible pour l'écoulement principal et conséquemment le temps de résidence diminue d'autant. Le comportement inverse du cycle 3 pourrait provenir du fait qu'une augmentation du débit de purge provoque une augmentation de la turbulence. En effet, l'écoulement principal des fumées dans le cycle 3 côtoie presque tout au long de son passage dans la chambre, l'écoulement secondaire de purge. On observe d'ailleurs sur le tableau 5-3 que la fréquence où la réaction est contrôlée par la turbulence dans le cycle 3 est inversement proportionnelle au débit de purge. Ainsi, la réaction a été contrôlée par la turbulence sur 68,1% des nœuds pour l'essai étalon et seulement 38,0% pour l'essai 2, i.e. la purge plus grande. On remarque aussi sur le tableau 5-4 que l'essai 2 est le seul où la réaction a été majoritairement contrôlée par la cinétique de la réaction, c'est-à-dire le modèle d'Arrhénius. En effet, seulement 45,6% des nœuds ont été contrôlé par le modèle de Magnussen.

Le déplacement du brûleur ne semble pas créer un impact significatif sur le taux de destruction sauf pour le cycle 3 de l'essai 2. Le brûleur joue plusieurs rôles. Il procure premièrement une source d'enthalpie aux molécules de gaz situées en face du brûleur. Il modifie aussi le taux de réaction de type Arrhénius puisque la flamme produite par le brûleur augmente considérablement la quantité de radicaux OH. Or, tel que mentionné dans le chapitre 1, les radicaux OH jouent le rôle de catalyseur dans une réaction de combustion. Le brûleur augmente enfin la quantité de combustible brûlé qui peut entrer en contact avec les gaz non-brûlés; il améliore donc le taux de réaction de type Magnussen. Toutefois, la surface du brûleur est très faible soit 0,16% de la surface totale de la chambre calculée sur la coupe verticale centrale. Malgré le fait que l'on ait multiplié par quatre la puissance du brûleur par rapport à la simulation du

chapitre 4, il n'en demeure pas moins qu'une puissance de 128 kW n'a pas un impact majeur sur un débit de 33650 Nm^3/h. L'impact a été surtout marqué sur le cycle numéro 3 puisque le brûleur est situé au-dessus du lit B et les fumées pénètrent dans la chambre de combustion par le lit B dans le cycle 3. Déplacer le brûleur vers le bas a permis aux fumées d'entrer en contact plus tôt avec le brûleur. Ce contact a légèrement augmenté la température des fumées situées en face du brûleur et a aussi augmenté le taux de gaz brûlés. Les fumées ainsi réchauffées et les gaz brûlés ont augmenté le taux de réaction du combustible adjacent tout au long du séjour dans la chambre de combustion. Dans le cycle 2 par contre, les fumées ne croisent le brûleur qu'à la sortie de la chambre de combustion. L'influence en cascade sur l'ensemble des fumées est donc négligeable.

On remarque enfin que le taux de destruction pour l'essai étalon a peu augmenté par rapport à la simulation de la coupe centrale dans le chapitre 4, même si le brûleur est 4 fois plus puissant. Par rapport aux résultats du tableau 4-8, l'augmentation a été de moins de 0,1%. Cette augmentation aurait été supérieure en réalité puisque la température à l'entrée devrait normalement augmenter avec une augmentation du débit au brûleur. En effet, les lits de sellettes de céramique situés sous la chambre de combustion agissent comme un échangeur de chaleur. Une augmentation de la température des gaz à la sortie de la chambre de combustion devrait normalement engendrer une augmentation de la température à l'entrée de celle-ci. Étant donné que cette hausse de température est difficilement calculable, la température à l'entrée n'a pas été modifiée.

5.3 Conclusion

L'objectif de ce chapitre était d'optimiser le rendement de combustion d'un incinérateur régénératif. La modification de différents paramètres a permis de déceler les configurations les plus prometteuses au niveau du rendement de destruction des polluants. Ainsi, on observe sur le tableau 5-2 que les essais 7 et 9, soit une chambre plus large et des lits plus hauts, sont les plus prometteurs. Le déplacement du brûleur vers le bas semble aussi donner des résultats intéressants. La combinaison des différentes modifications n'a pas été simulée mais il est raisonnable de croire qu'elle aurait un effet additif. Le débit de purge ne semble pas affecter de façon appréciable le taux de destruction des polluants. On remarque aussi avec l'essai 8 qu'il faut éviter de diminuer l'espace entre les lits. Une simple diminution de 16 pouces (40,64 cm) fait chuter le taux de destruction de 92,94% à 89,92 %.

Bien que la simulation n'ait pas été effectuée, on peut supposer que l'ajout d'un brûleur au-dessus du lit C permettrait d'augmenter de façon appréciable le taux de destruction pour le cycle 2.

Si l'objectif principal n'est pas d'augmenter le taux de destruction mais plutôt de diminuer la consommation de gaz naturel au brûleur, les modifications suggérées dans ce chapitre devraient normalement permettre de légèrement diminuer la consommation tout en maintenant le rendement de destruction au niveau initial. Tel que mentionné dans ce chapitre, il faut cependant se rappeler qu'une modification de la puissance du brûleur devrait normalement entraîner une modification de la température d'entrée des fumées. Or, la température est reliée à la concentration de gaz brûlés par une double-exponentielle. Il faut donc modifier la puissance du brûleur avec prudence.

Ces conclusions ne doivent cependant pas être suivies à la lettre étant donné la multitude de sources d'erreurs engendrées par les différents modèles. Car ce sont bien des modèles que l'on utilise ici et par définition, un modèle est une représentation simplifiée d'un processus. Il tente de reproduire, d'imiter, de simuler la réalité le plus fidèlement possible. Parmi ces sources d'erreurs, on retrouve :

- Le modèle de turbulence
- Le modèle de combustion
- La simulation bi-dimensionnelle d'un phénomène tridimensionnel
- La négligence du rayonnement provoqué par la flamme du brûleur
- La négligence des pertes de chaleurs à travers les parois
- La caractérisation des composés chimiques à l'entrée de la chambre

CONCLUSION

ON NE RETROUVE PAS DANS LA LITTÉRATURE d'article traitant de la simulation numérique de l'écoulement réactif dans la chambre de combustion d'un incinérateur de fumées et encore moins d'un incinérateur régénératif. Il a donc fallu déterminer les éléments représentatifs des polluants, les modèles de combustion applicables, les taux de réactions appropriés ainsi que les coupes bi-dimensionnelles les plus représentatives du phénomène tridimensionnel. Tout ce travail a porté fruit puisqu'il a permis de répondre aux cinq objectifs fixés dans l'introduction de ce mémoire :

1. Vérifier s'il existe un précédent dans la littérature au sujet de la simulation des écoulements réactifs dans la chambre de combustion d'incinérateur de fumées.
2. Étudier et sélectionner un ou plusieurs modèles de combustion applicables à l'oxydation des gaz polluants dans un incinérateur.
3. Simuler en régime permanent l'écoulement réactif se produisant dans la chambre de combustion d'un incinérateur régénératif.
4. Développer un outil permettant d'améliorer la conception de chambres de combustion d'incinérateurs régénératifs.
5. Observer l'influence de l'emplacement du brûleur et d'une modification de la géométrie de la chambre sur le taux de destruction des gaz polluants.

Ce mémoire a démontré que le modèle de combustion à taux de réaction fini faisant intervenir une combinaison du modèle d'Arrhénius et de Magnussen offre le plus de potentiel. Ce modèle a permis de simuler avec satisfaction deux cas-tests de flammes de pré-mélange dans des conditions ressemblant à celles qui prévalent dans la chambre de combustion de l'incinérateur. Les conditions particulières à la chambre de combustion de l'incinérateur correspondent à une flamme de pré-mélange à moyenne température d'un mélange gazeux qui est en dehors des limites d'inflammabilité.

Le modèle de combustion retenu a aussi permis de simuler avec satisfaction l'écoulement réactif en régime permanent qui existe dans la chambre de combustion de l'incinérateur. Le taux de destruction global des polluants obtenu par la simulation se situe passablement près du taux de destruction mesuré expérimentalement sur une installation existante, l'écart n'étant que de 1 %. Il est raisonnable de poser que les champs de vitesse, de température et de concentration obtenus par la simulation sont plausibles et correspondent au moins qualitativement à ce que l'on retrouve dans la chambre de combustion.

La simulation a démontré que la réaction dans la chambre de combustion était majoritairement contrôlée par le mélange turbulent des fumées. Il est raisonnable de croire toutefois qu'une baisse de quelques dizaines de degrés Celcius au niveau de la température d'entrée ferait basculer ce contrôle au profit de la cinétique de la réaction. En effet, il a été démontré au chapitre 3 qu'une baisse de la température d'entrée de 755 °C à 690 °C pour la combustion du CO peut conduire une réaction contrôlée à 87 % par le mélange turbulent vers une réaction contrôlée à 99 % par la cinétique de la réaction.

Le modèle de combustion retenu et combiné au logiciel VF a surtout permis d'observer l'influence de modifications géométriques sur le taux de destruction

des polluants. Il est dorénavant possible avec cet outil de concevoir de façon plus scientifique une chambre de combustion optimisée pour la destruction des polluants et la consommation de gaz d'appoint. On a ainsi pu remarquer dans ce mémoire que le fait d'élargir l'espace entre les lits ou d'augmenter la hauteur de l'espace libre au-dessus des lits permettaient d'augmenter sensiblement le taux de destruction. Le déplacement du brûleur vers la bas semble aussi être profitable au taux de destruction globale des polluants. Ces simulations ont aussi permis de constater que le cycle 1 est le cycle le plus performant. Le cycle 2 ou le cycle 3 occupe le second rang en terme de performance tout dépendant des modifications apportées à la géométrie.

À titre de recommandation, il est suggéré de calculer la température à la sortie par le biais d'une moyenne pondérée par la surface et le débit massique. Une simple moyenne sur la surface a été utilisée dans ce mémoire. Cette façon de faire a nui à l'élaboration de corrélations entre le taux de destruction et la température de sortie. Le tableau ci-dessous reprend en partie le tableau 4-8 et fourni en plus la température moyenne pondérée par la surface et le débit massique tel qu'elle aurait dû être calculée pour l'élaboration de ce mémoire.

Tableau 6-1: Température de sortie calculée de deux façons différentes pour la coupe verticale dans la partie centrale

Cycle	Efficacité de destruction (%)	Température de sortie pondéré par la surface (K)	Température de sortie pondéré par la surface et le débit massique (K)
1	99,19	1037,0	1056,5
2	91,60	1056,4	1054,0
3	87,86	1060,8	1053,1

Ce Tableau illustre bien la corrélation qui doit exister entre le taux de destruction des composés chimiques et la température moyenne à la sortie de la chambre de combustion. L'énergie libérée par la destruction des polluants fait augmenter la température moyennes des gaz à la sortie de la chambre de combustion. Plus le taux de destruction est élevé, plus la température moyenne à la sortie est élevée.

BIBLIOGRAPHIE

AMERICAN GAS ASSOCIATION (1965). **Gas engineers hanbook, fuel gas engineering practices,** The Industrial Press, New York, première édition.

ARRHENIUS, S. (1889). **Über die reaktions geschwindigkeit bei der inversion von rohrzcken durck sauren**, *Z. phys. Chem.*, vol 4, p 226

BEÉR, J.M. (1994). **Minimizing NO_x emissions from stationary combustion; reaction engineering methodology**, *Chemical Engineering Science*, Vol 49, pp. 4067-4083

BIOTHERMICA (1996). **Biotox®, procédé d'oxydation régénérative**, dépliant publicitaire de la compagnie

BORGHI, R. et P. MOREAU (1977). **Turbulent combustion in a premixed flow**, *Acta Astronautica*, Vol. 4, pp. 321-341

BRAY, K.N.C. et J.B. MOSS (1977). **A unified statistical model of the premixed turbulent flame**, *Acta Astronautica*, Vol. 4, pp. 291-319

BURGESS et al. (1982). **Flammability of mixed gases**, Bureau of mines, report of investigations 8709.

CARVALHO et al. (1988). **A three-dimensional modelling of an industrial glass furnace**, *Journal of the Institute of Energy*, septembre

CHEREMISINOFF, P. N. et R. A. Young (1977). **Air pollution control and design handbook**, part 1, Dekker

CROSBY et al. (1954). **NFPA Handbook of fire protection**, NFPA, onzième édition

CUSHING, B.S. et al. (1967). **Turbulent mass transfer and rates of combustion in confined turbulent flames (2)**, *Eleventh Symposium (International) on Combustion*, pp. 817-824, The Combustion Institute

DELLINGER, B. et al. (1990). **Development of thermal stability ranking of hazardous organic compound incinerability**, *Environ. Sci. Technol.*, Vol. 24, March, pp. 316-328

DONLEY, E. et D. LEWANDOWSKI (1995). **Optimized design and operating parameters for minimizing emissions during VOC thermal oxidation**, 95-WA78A.03, 88 th annual meeting of the AWMA, San Antonio, Texas, June 18-23.

DRYER, F. L. et I. GLASSMAN (1973). **High-temperature oxidation of CO and CH_4**, *Fourteenth Symposium (International) on Combustion*, pp. 987-1003, The Combustion Institute

DUTERQUE, J. et al. (1981). **Study of quasi-global schemes for hydrocarbon combustion**, *Comb. Sci. and Tech.*, vol. 26, pp. 1-15

GORDON, S. ET B.J. MCBRIDE (1971). **Computer program for calculation of complex chemical equilibrium composition, rocket performance, incident and reflected shock and Chapman Jouguet detonations**, NASA-sp 273

HEYWOOD, J.B. (1988). **Internal Combustion Engine Fundamentals**, McGraw-Hill

HJERTAGER, B.H. et B.F. MAGNUSSEN (1982). **Computer simulation of flow, heat transfer and combustion in three-dimensional furnaces**, *Physico Chemical Hydrodynamics,* Vol 3, No 3-4, pp. 231-250

HOWE, N.M., jr et al. (1963). **Turbulent mass transfer and rates of combustion in confined turbulent flames**, *Ninth Symposium (International) on Combustion*, pp. 36-47, The Combustion Institute

HUTCHINSON, P. et al. (1976). **The calculation of furnace-Flow Properties and their experimental verification**, *Journ. of Heat Transfer*, mai, pp. 276-283

JONES, W.P. (1979). **Models for turbulent flows with variable density and combustion, prediction methods for turbulent flows**, Lecture series 1979-2, *Von Karman Institute for Fluid Dynamics*, Jan 15-19

JOUVAUD, D. et al. (1988). **Glass melting with pure oxygen combustion: modeling of convective and radiative heat transfer**, *Ceram. Eng. Sci. Proc.*, 9 [3-4], pp. 221-231

KHALIL, E.E. et al., (1975). **The calculation of local flow properties in two-dimensional furnaces**, *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol 18, pp775-791

KHALIL, E.E., (1982). **Modeling of furnaces and combustors**, Energy and engineering science series, Abacus Press, Kent

LEE, K.-C. et al. (1982). **Revised model for the prediction of the time-temperature requirements for thermal destruction of dilute organic vapors and its usage for predicting compound destructibility**, 75 th Annual meeting of the APCA, New Orleans, June 20-25

MAGNUSSEN, B.F et B.H. HJERTAGER (1976). **On mathematical modeling of turbulent combustion with special emphasis on soot formation and combustion**, *Sixteenth Symposium (International) on Combustion*, pp. 719-729, The Combustion Institute

MAGNUSSEN, B.F. (1981). **On the structure of the turbulence and a genealized eddy dissipation concept for chemical reaction in turbulent flow**, 19th AIAA aerospace meeting, St-louis, 12-15 Jan.

MASON, H.B. et D.B. SPALDING (1973). **Prediction of reaction-rates in turbulent premixed boundary-layer flows**, Combustion Institute European Symposium, pp. 601-606

MAY, H.-O. (1994). **A three-dimensional numerical model of a waste incinerator**, *Procc. Instn. Mech. Engrs.* Vol 208

MCKENTY, F., (1992). **Modèles de combustion pour la simulation numérique d'écoulements réactifs en atmosphère confinée**, Thèse de Doctorat, École Polytechnique de Montréal, décembre.

MORETTE, E.C. et W. MUKHOPADHYAY (1993). **VOC control: Current practices and future trends**, *Chemical Engineering Progress*, July

NASSERZADEH, V. et al. (1991). **Design optimization of a large municipal solid waste incinerator**, *Waste Management*, Vol 11, pp. 249-261

PENNER, S.S. et B.P. MULLINS (1959). **Explosions, detonations, flammability and ignition**, Pergamon Press, New York.

POPE, B. (1977). **The implications of the probability equations for turbulent combusting flows**, *Combus. Flame,* 29 p.235

RAVICHANDRAN, M. et F.C. GOULDIN (1992). **Numerical simulation of incinerator overfire mixing**, *Combust. Sci. and Tech.*, vol. 85, pp. 165-185

RAVICHANDRAN, M. et F.C. GOULDIN (1993). **Residence time calculations using the numerical simulation of incinerator flows**, *Combust. Sci. and Tech.*, vol. 91, pp. 257-269

RIDA, S. (1993). **Méthode de volumes finis pour la simulation numérique d'écoulements turbulents sur des maillages non structurés**, mémoire de Maîtrise, École Polytechnique de Montréal, juin

ROLKE, R. W. et al. (1972). **Afterberber systems study**, Shell Development Company, Emeryville, CA, prepared for U.S. EPA, Research Triangle Park, EPA-R2-72-062, August.

SPALDING, D.B. (1971). **Mixing and chemical reaction in steady confined turbulent flames**, *Thirteenth Symposium (International) on Combustion*, The Combustion Institute, pp 649-657

SPALDING, D.B. (1976). **Development of the Eddy-break-up model of turbulent combustion**, *Sixteenth Symposium (International) on Combustion*, The Combustion Institute, pp. 1657-1663

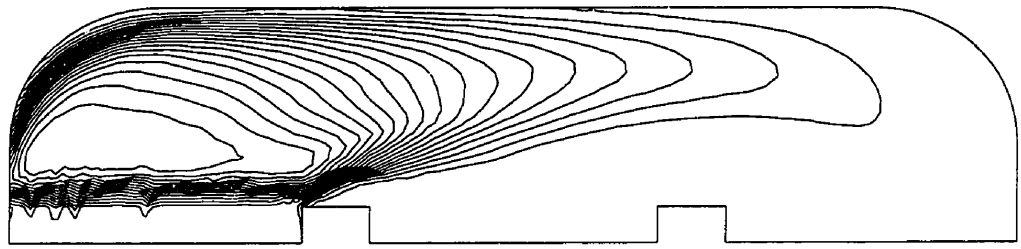
SPEIGHT, J. G. (1980). **The chemistry and technology of petroleum**, Marcel Dekker inc, New York.

US-EPA (1976). **Control of Volatile organic emissions from existing stationary sources - Vol. 1: control methods for surface-coating operations**, Research Triangle Park, EPA-450/2-76-028, November.

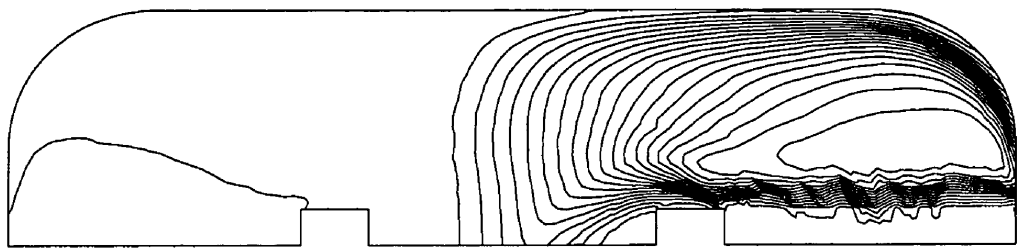
WESTBROOK, C.K. et al. (1977). **A numerical model of chemical kinetics of combustion in a turbulent flow reactor**, *The Journal of Physical Chemistry*, Vol. 81, No. 25, pp. 2542-2554.

VAN DER VAART, D. R. et al. (1991). **Thermal and catalytic incinerators for the control of VOCs**, *Journal of AWMA*, January, Vol 41, No 1, pp. 92-98.

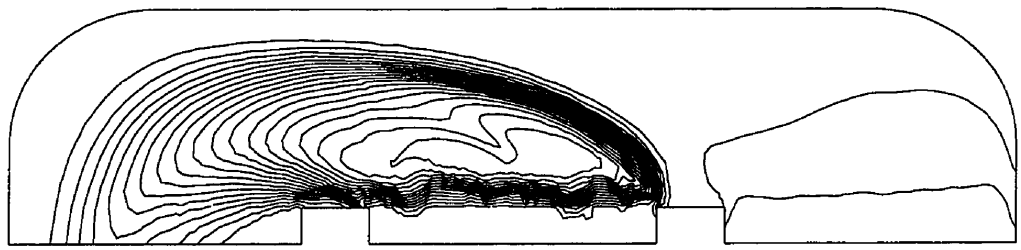
ANNEXE A



Cycle 1

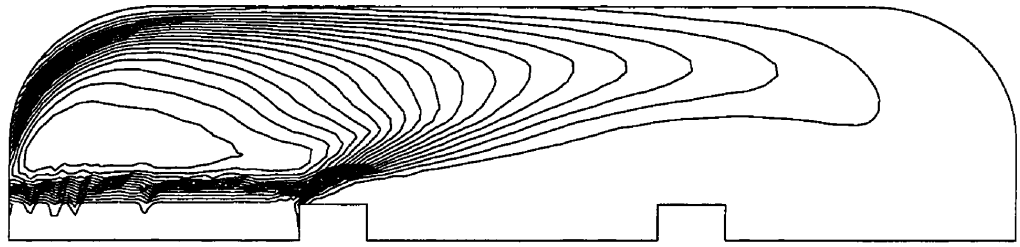


Cycle 2

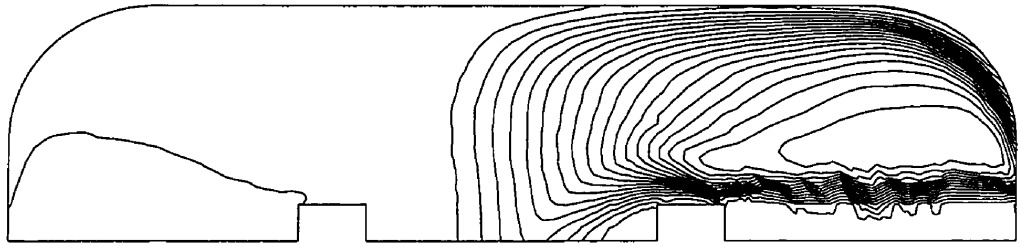


Cycle 3

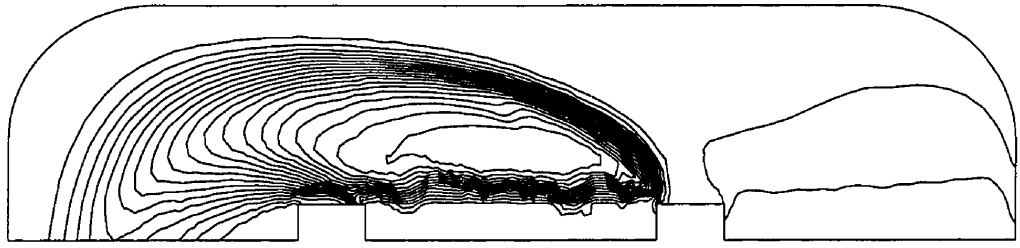
Figure A-1 : Isolignes de concentration de CO, modèle étalon



Cycle 1

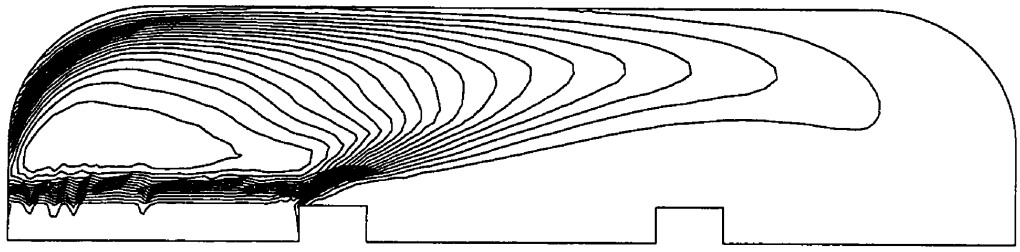


Cycle 2

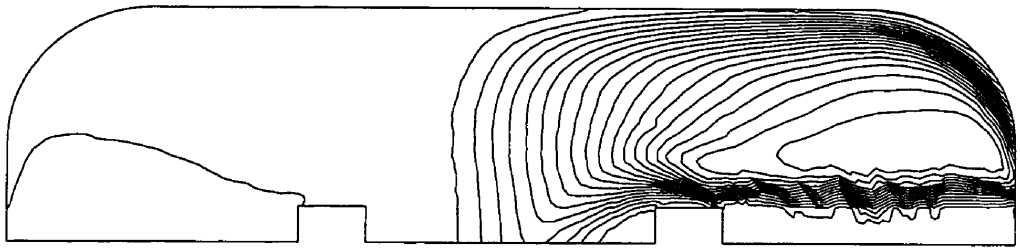


Cycle 3

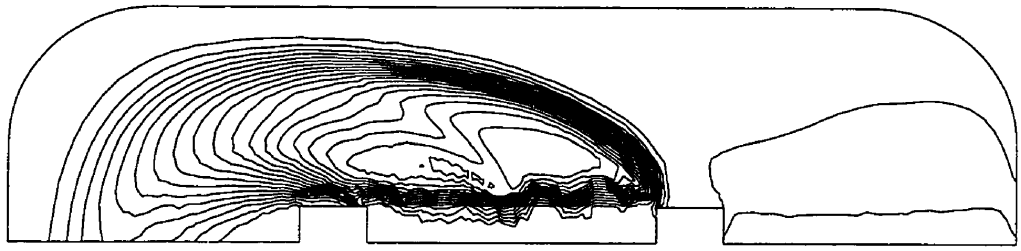
Figure A-2 : Isolignes de concentration de CO, essai 1 : brûleur plus haut



Cycle 1

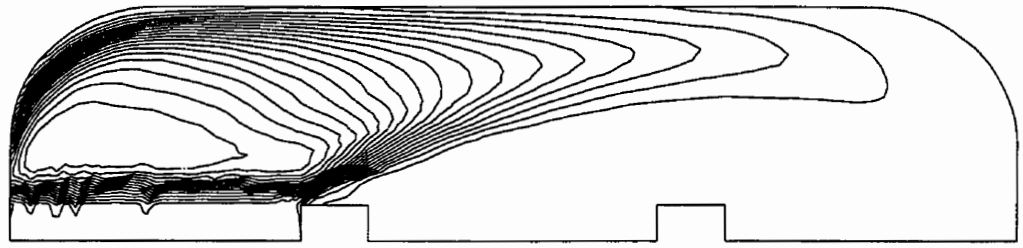


Cycle 2

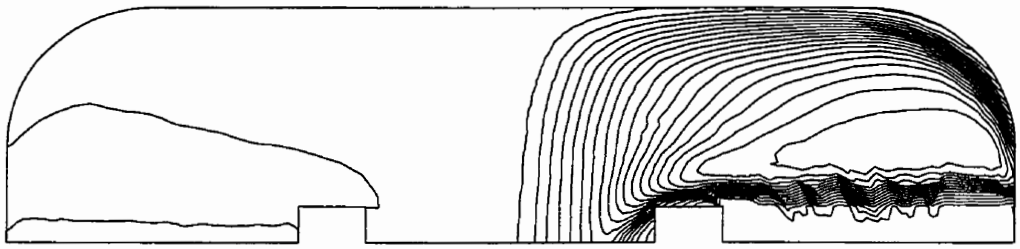


Cycle 3

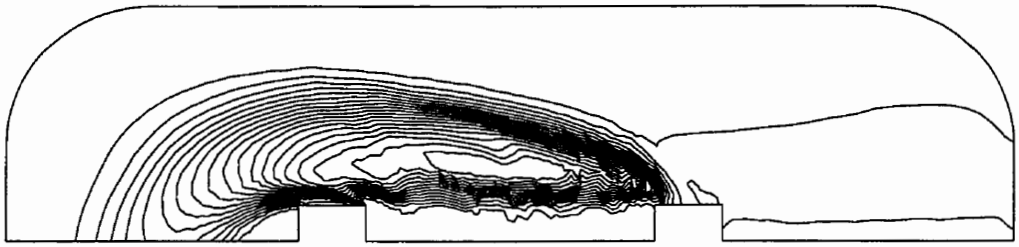
Figure A-3 : Isolignes de concentration de CO, essai 2 : Brûleur plus bas



Cycle 1

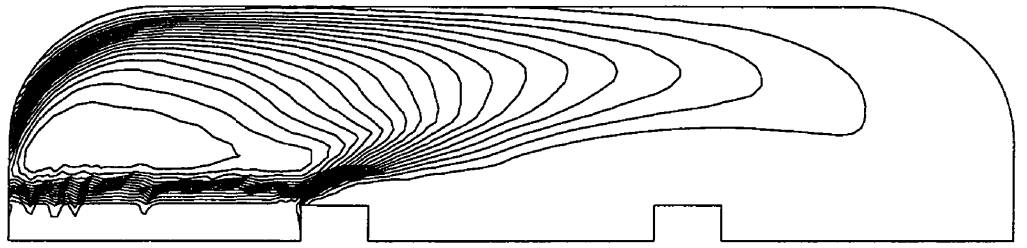


Cycle 2

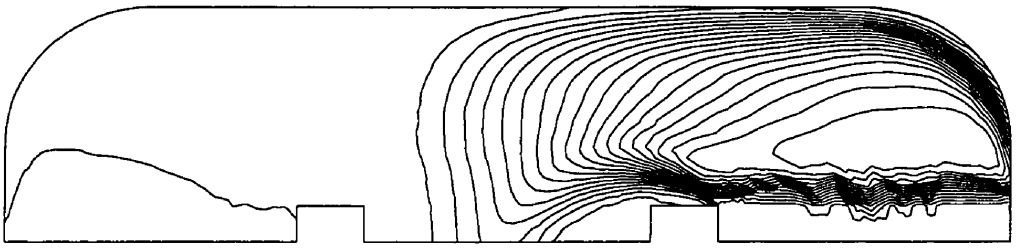


Cycle 3

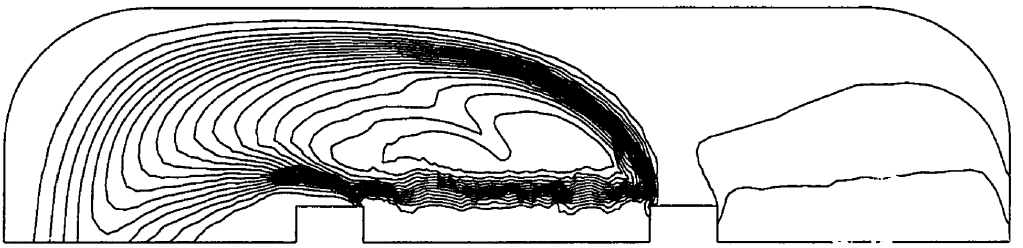
Figure A-4 : Isolignes de concentration de CO, essai 3 : grande purge



Cycle1

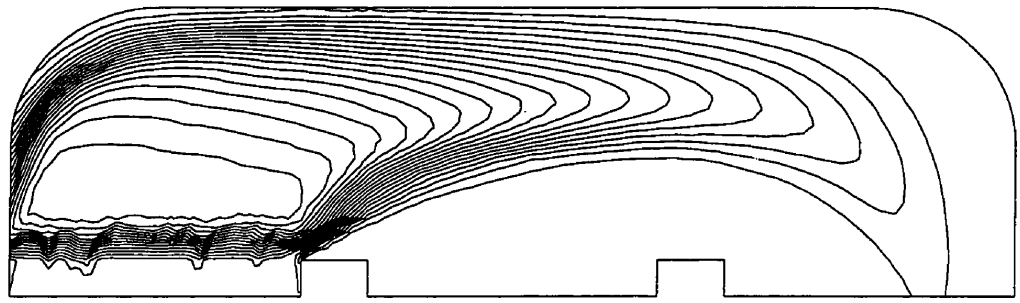


Cycle 2

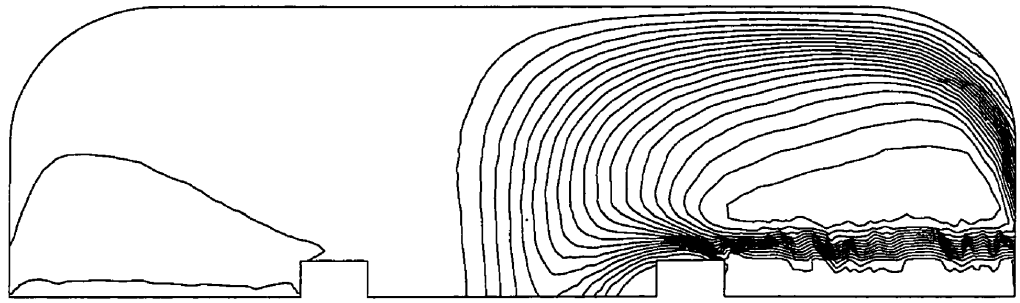


Cycle 3

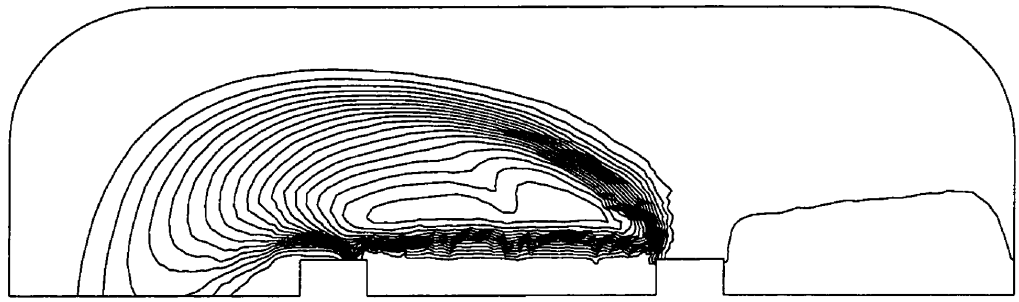
Figure A-5 : Isolignes de concentration de CO, essai 4 : petite purge



Cycle 1



Cycle 2



Cycle 3

Figure A-6 : Isolignes de concentration de CO, essai 5 : chambre plus haute

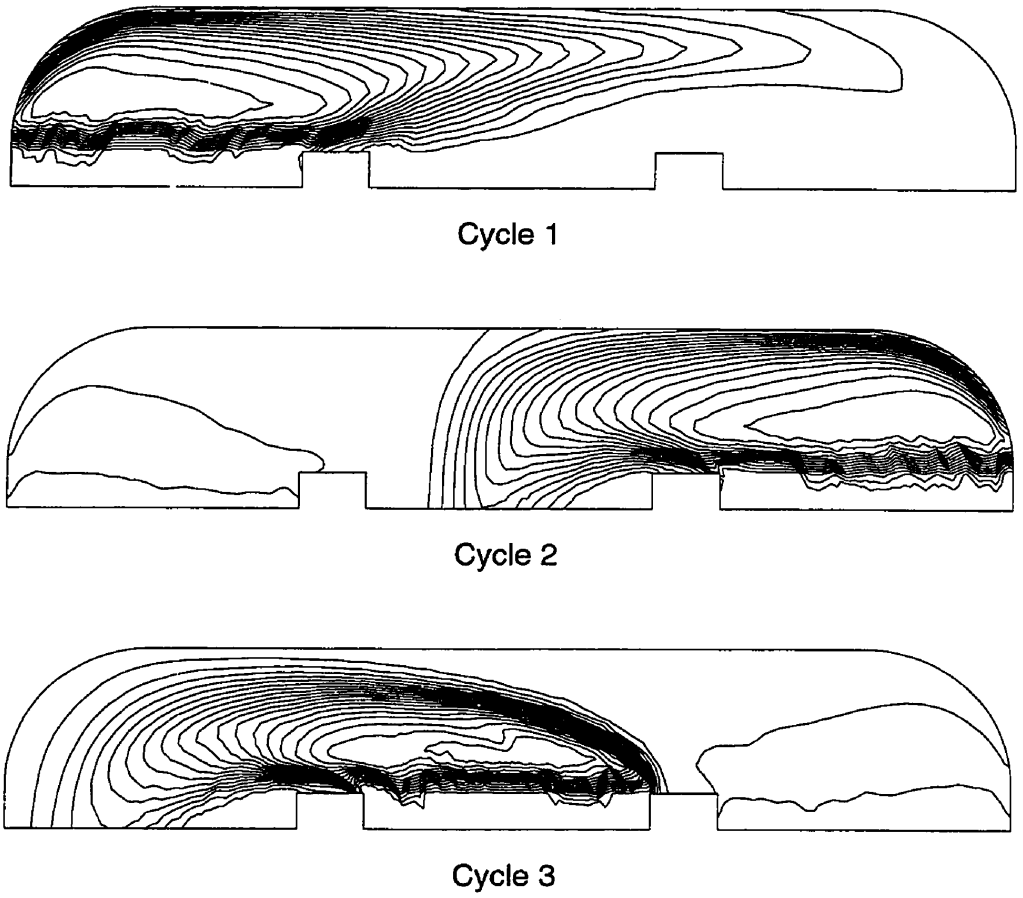
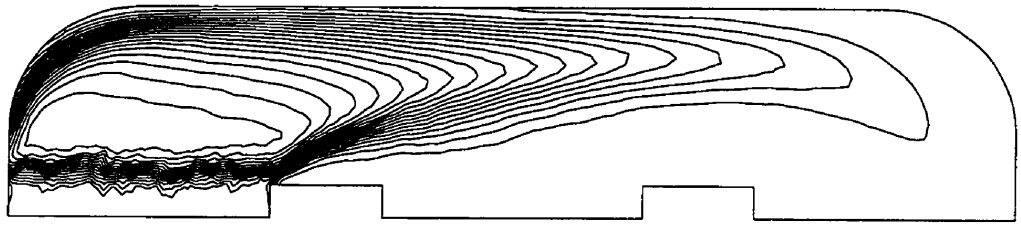
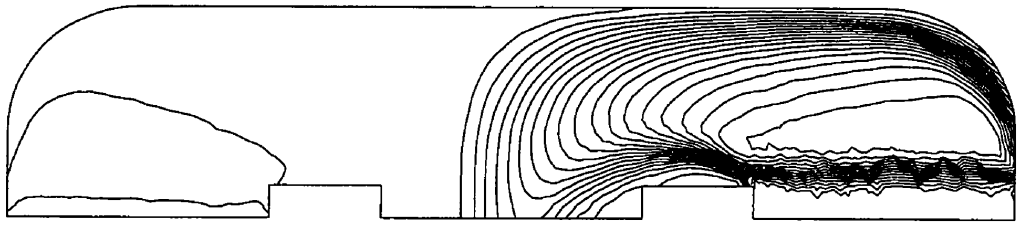


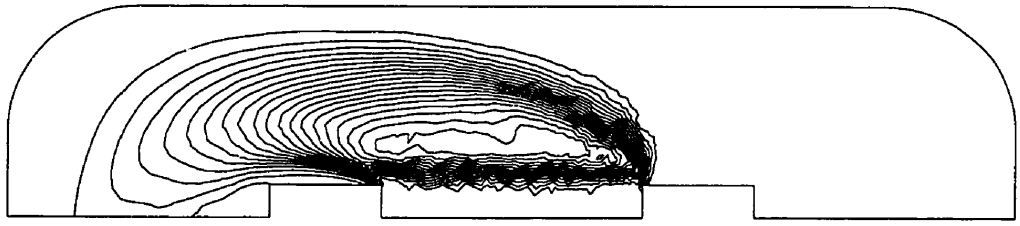
Figure A-7 : Isolignes de concentration de CO, essai 6 : chambre plus basse



Cycle 1

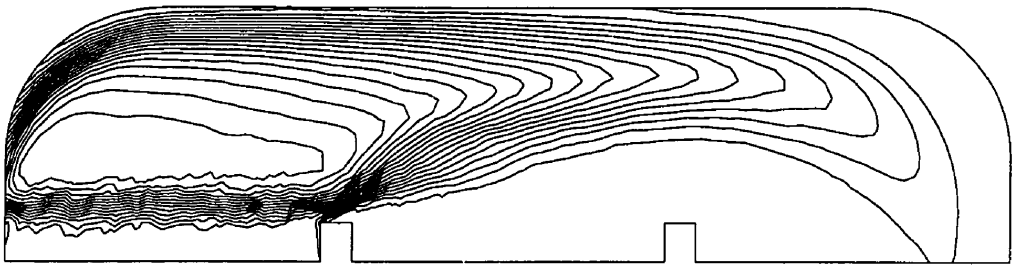


Cycle 2

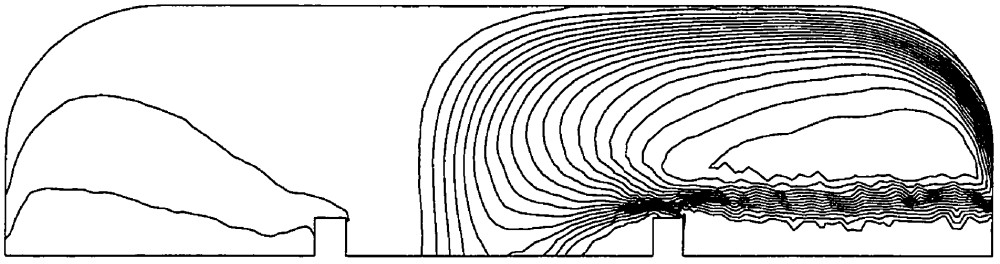


Cycle 3

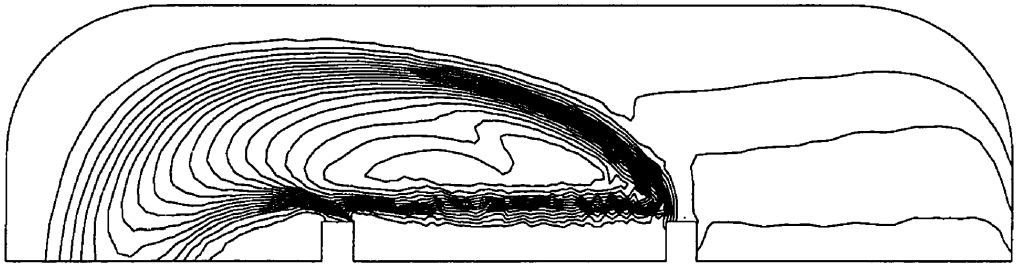
Figure A-8 : Isolignes de concentration de CO, essai 7 : chambre plus large



Cycle 1

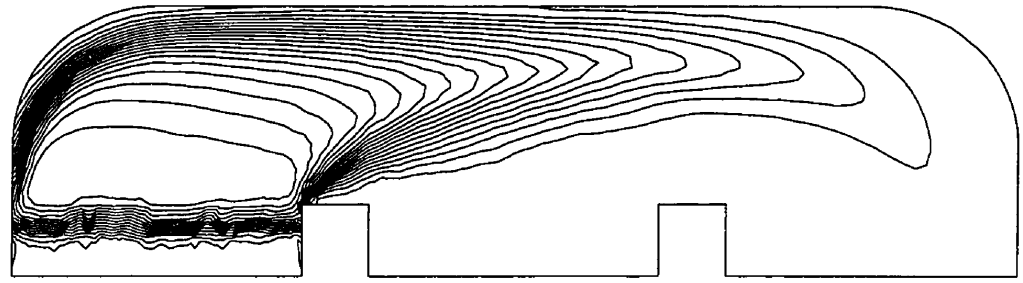


Cycle 2

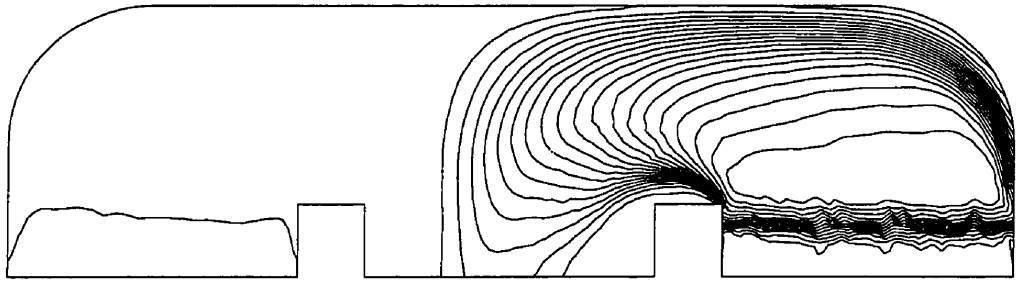


Cycle 3

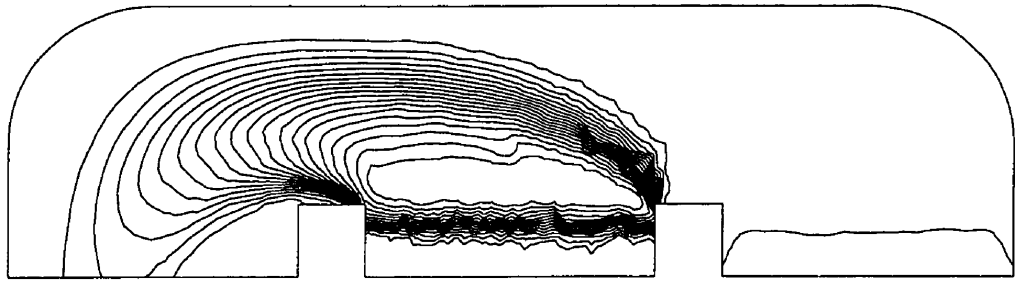
Figure A-9 : Isolignes de concentration de CO, essai 8 : chambre plus étroite



Cycle 1

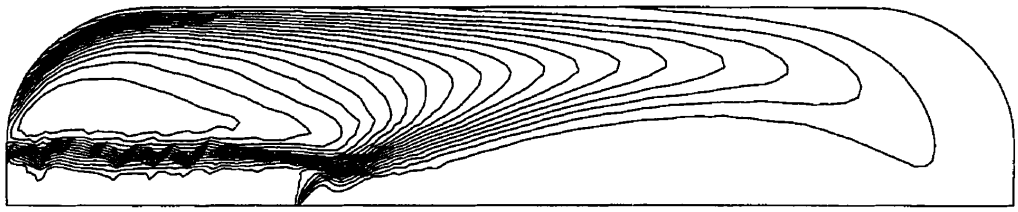


Cycle 2

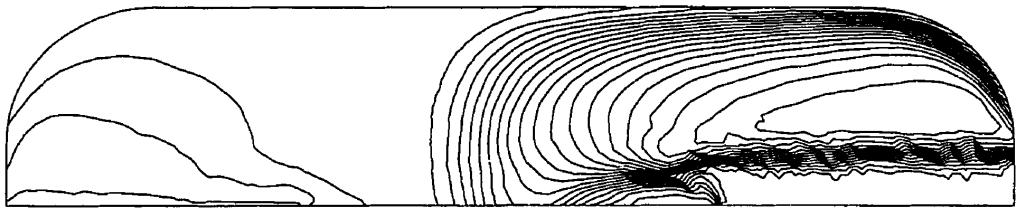


Cycle 3

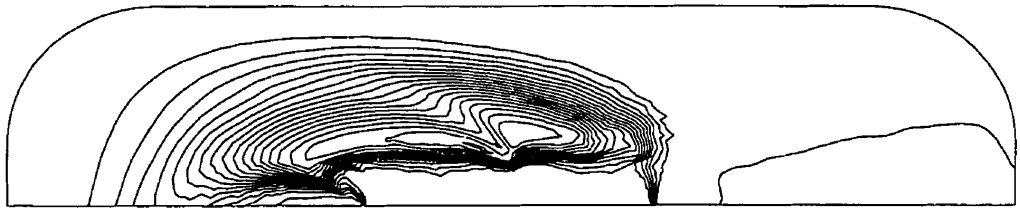
Figure A-10 : Isolignes de concentration de CO, essai 9 : lit plus grand



Cycle 1

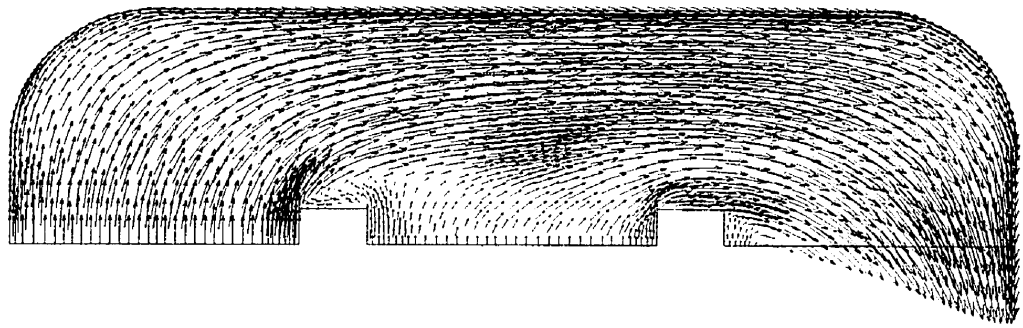


Cycle 2

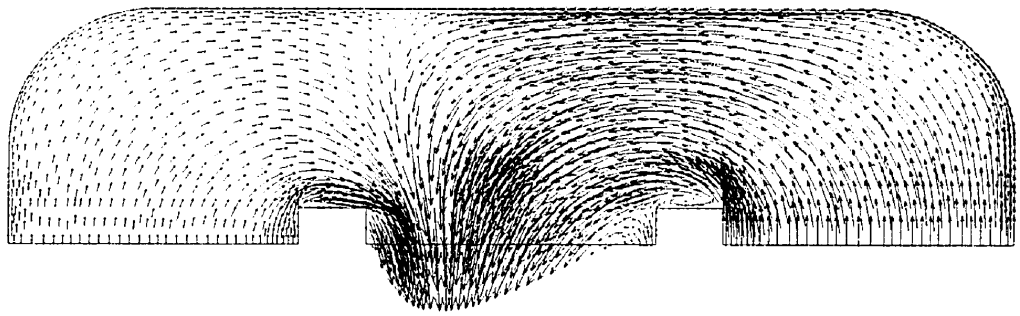


Cycle 3

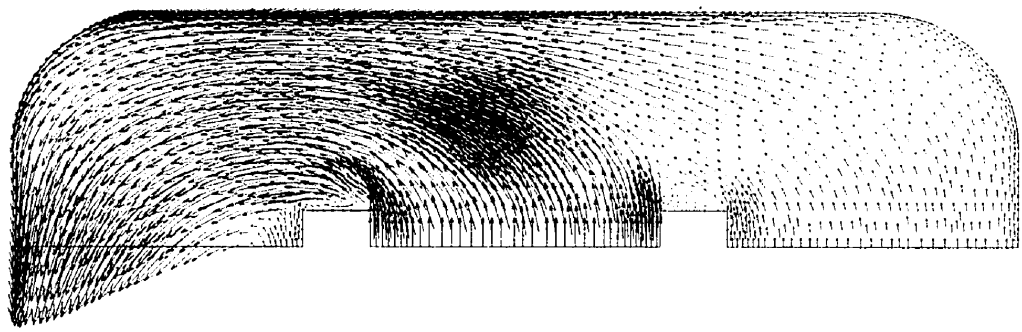
Figure A-11 : Isolignes de concentration de CO, essai 10 : lit plus petit



Cycle 1

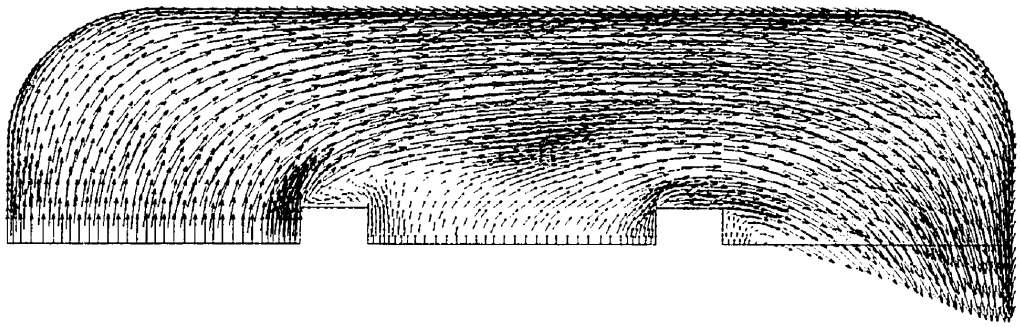


Cycle 2

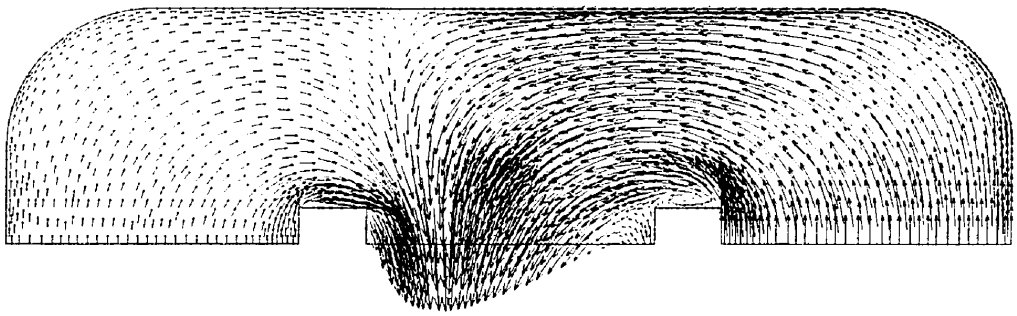


Cycle 3

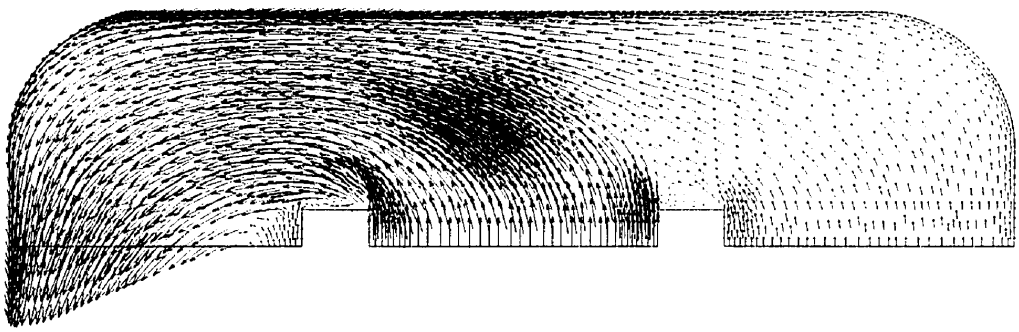
Figure A-12 : Champ de vecteurs-vitesse, modèle étalon



Cycle 1

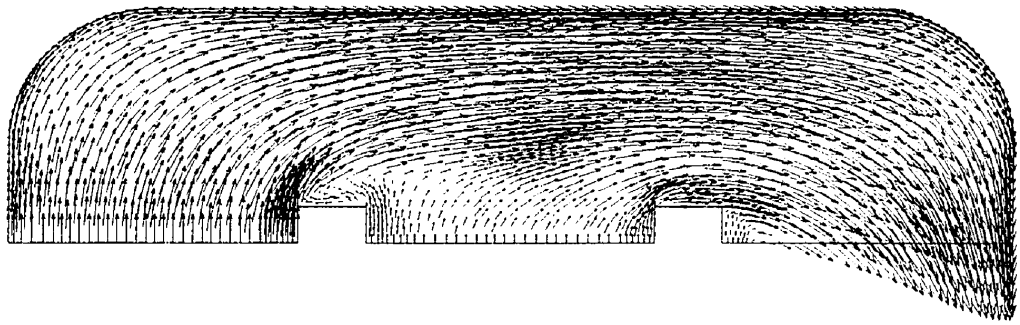


Cycle 2

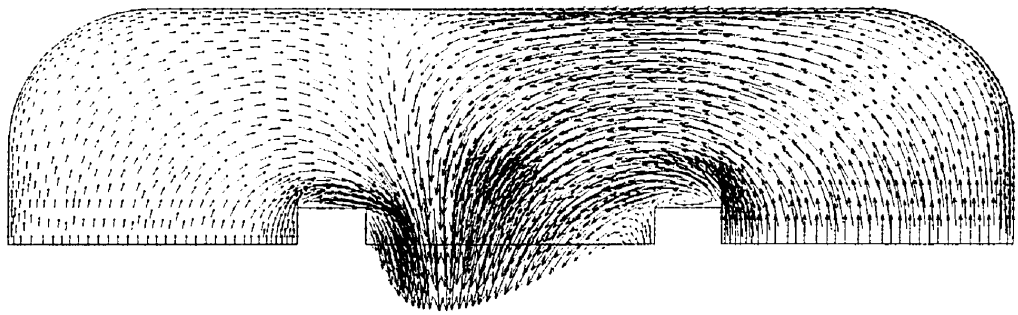


Cycle 3

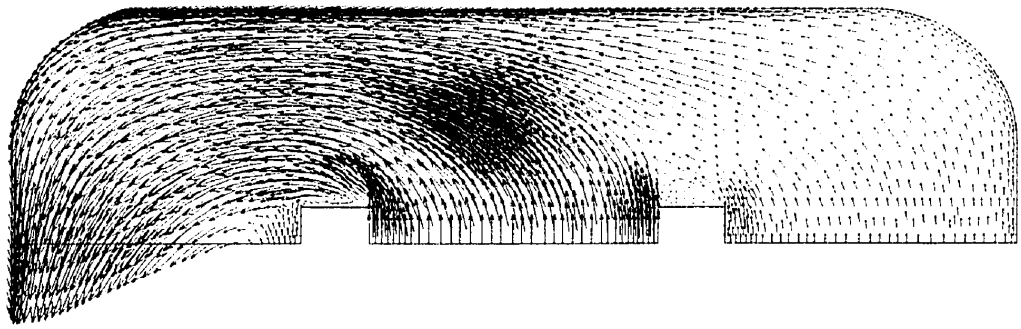
Figure A-13 : Champ de vecteurs-vitesse, essai 1 : brûleur plus haut



Cycle 1

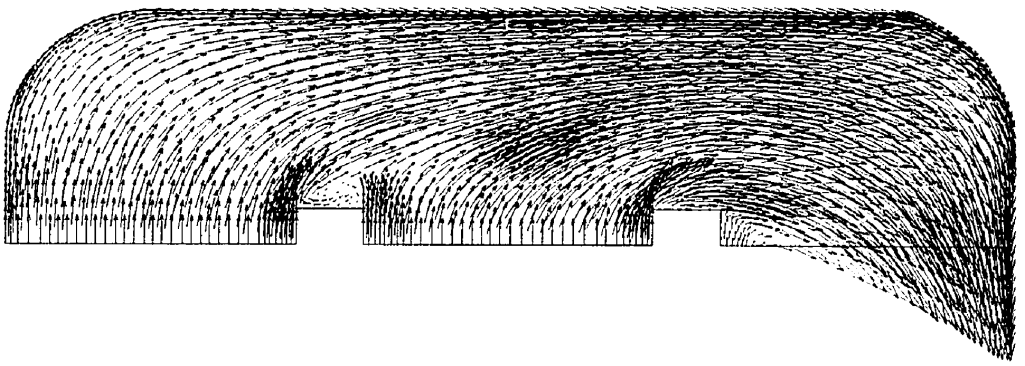


Cycle 2

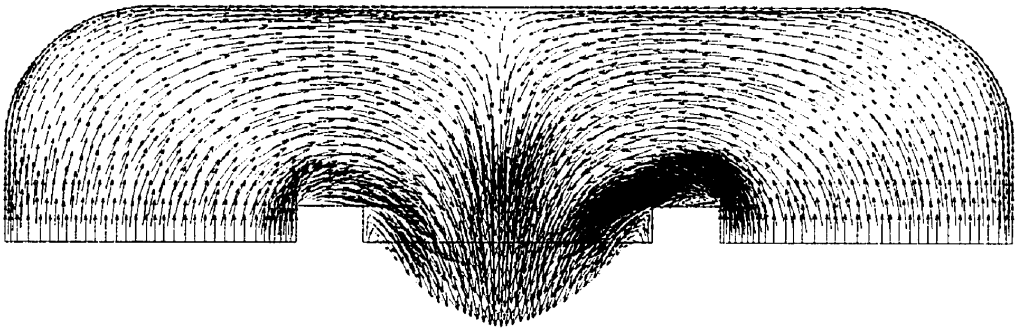


Cycle 3

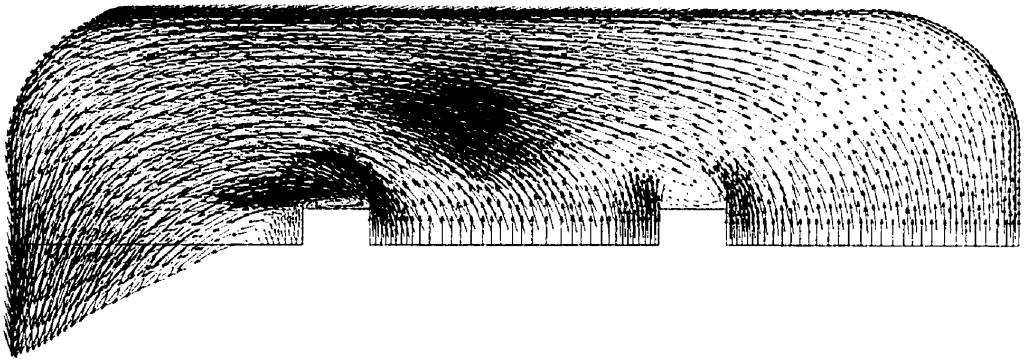
Figure A-14 : Champ de vecteurs-vitesse, essai 2 : Brûleur plus bas



Cycle 1

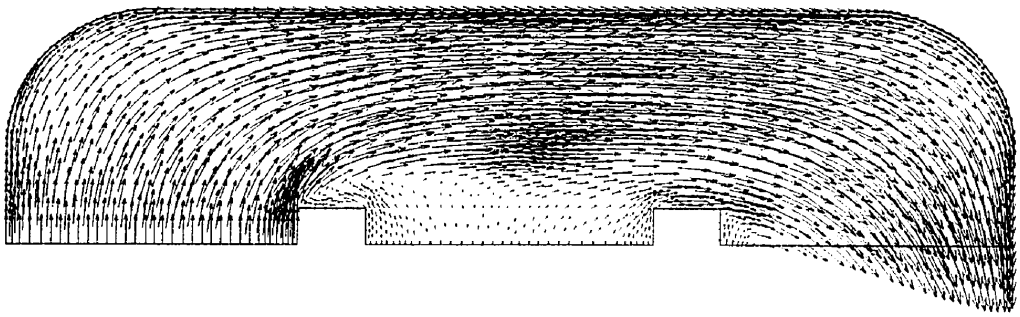


Cycle 2

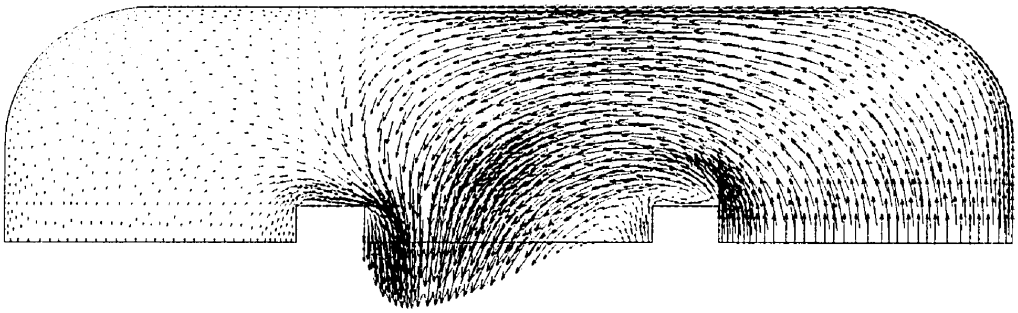


Cycle 3

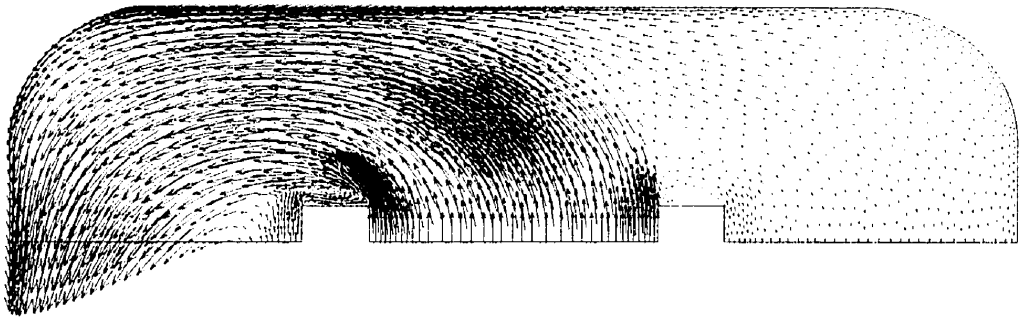
Figure A-15 : Champ de vecteurs-vitesse, essai 3 : grande purge



Cycle1

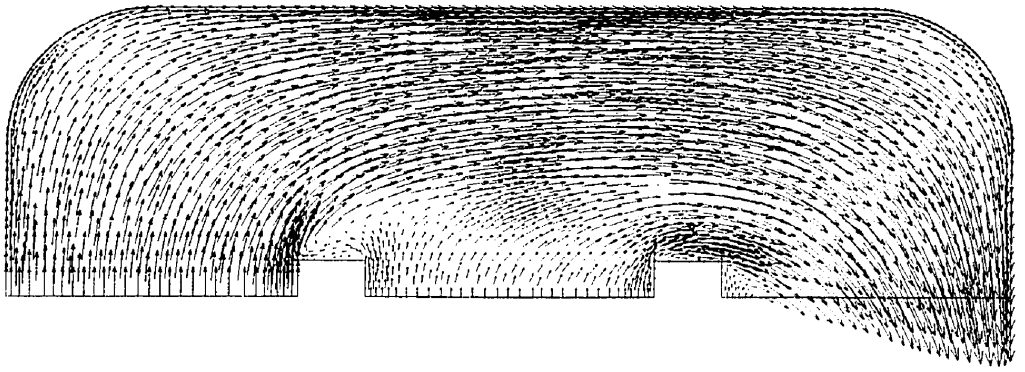


Cycle 2

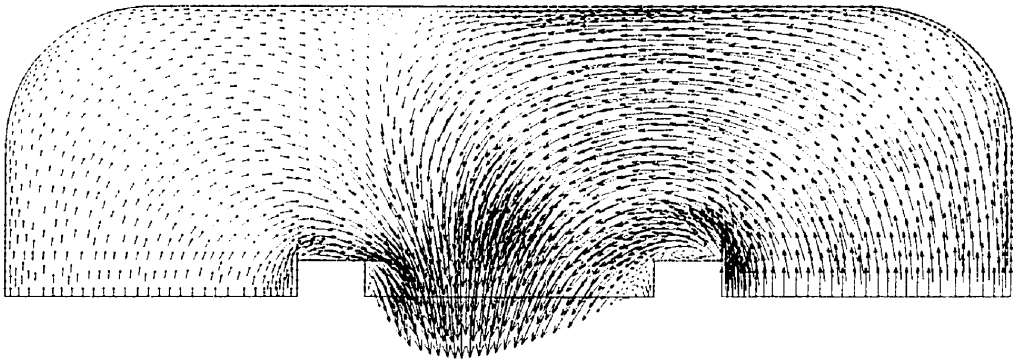


Cycle 3

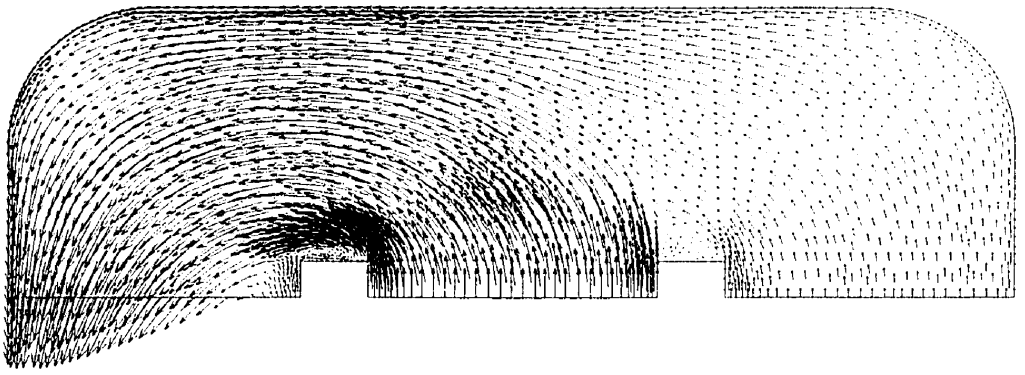
Figure A-16 : Champ de vecteurs-vitesse, essai 4 : petite purge



Cycle 1

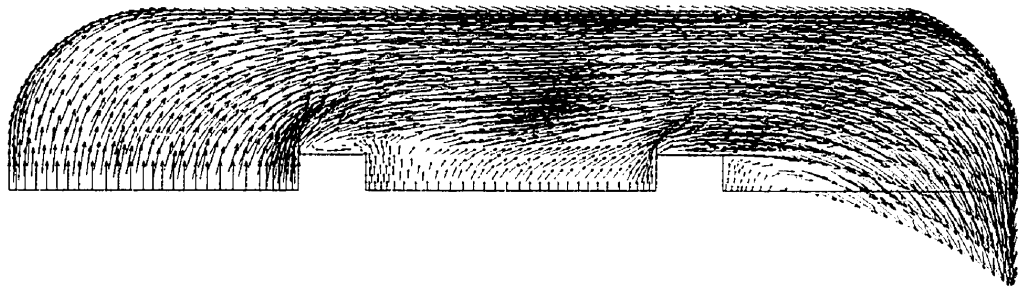


Cycle 2

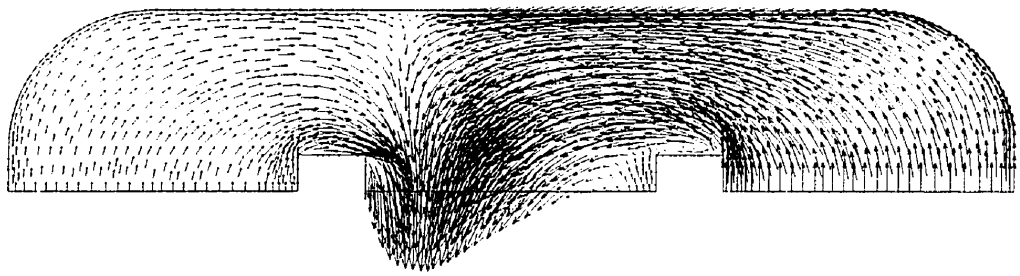


Cycle 3

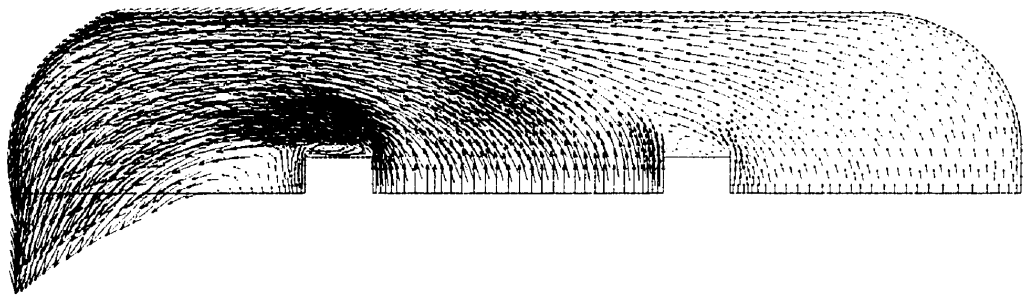
Figure A-17 : Champ de vecteurs-vitesse, essai 5 : chambre plus haute



Cycle 1

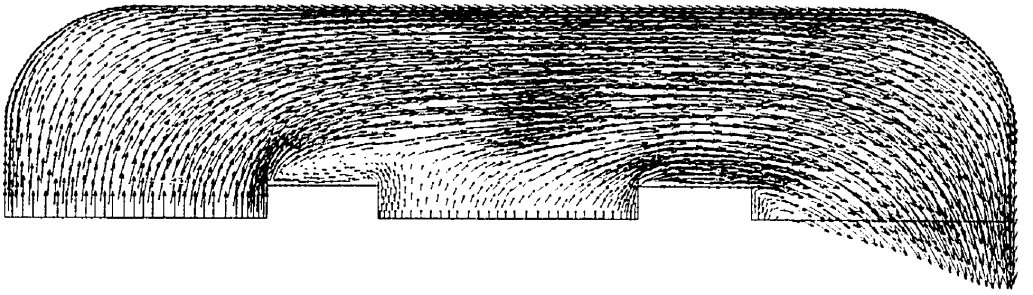


Cycle 2

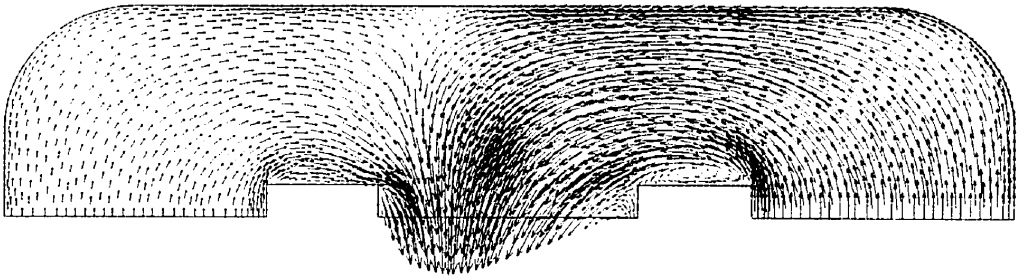


Cycle 3

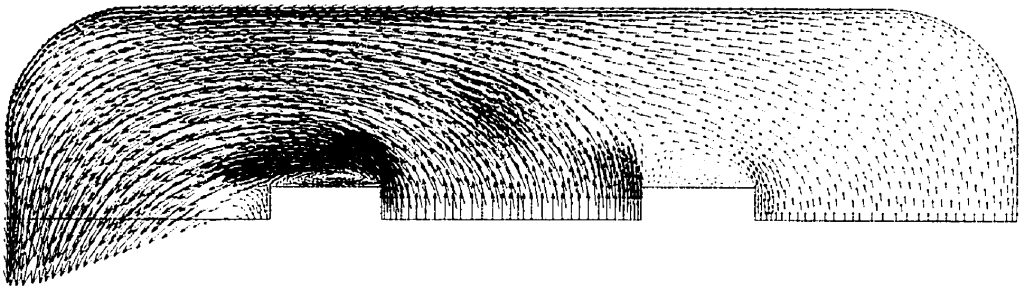
Figure A-18 : Champ de vecteurs-vitesse, essai 6 : chambre plus basse



Cycle 1

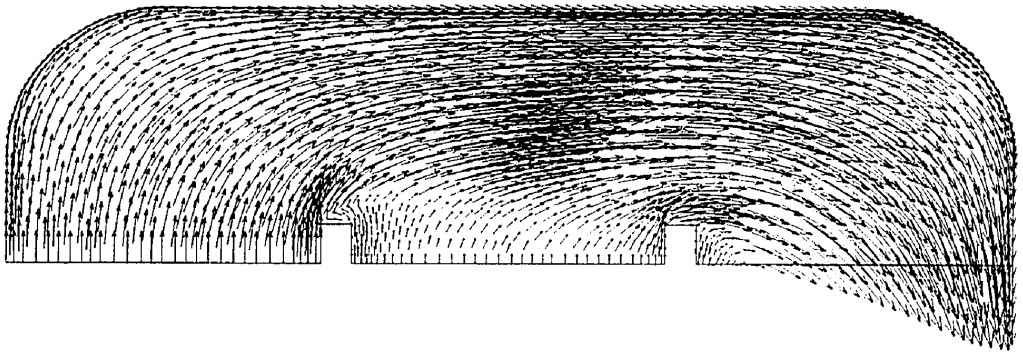


Cycle 2

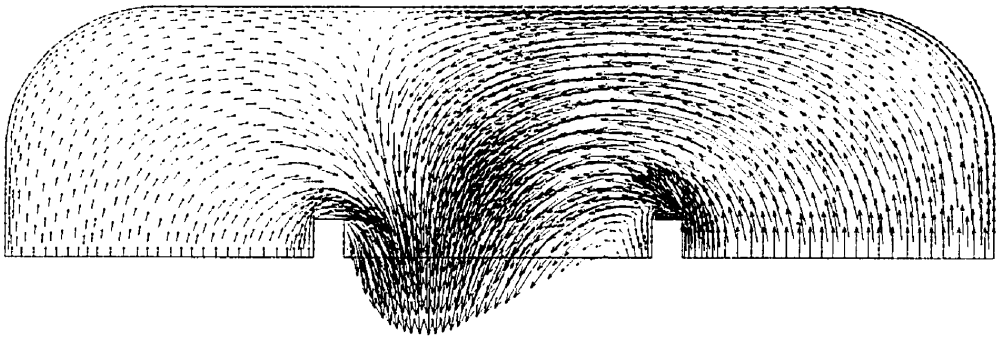


Cycle 3

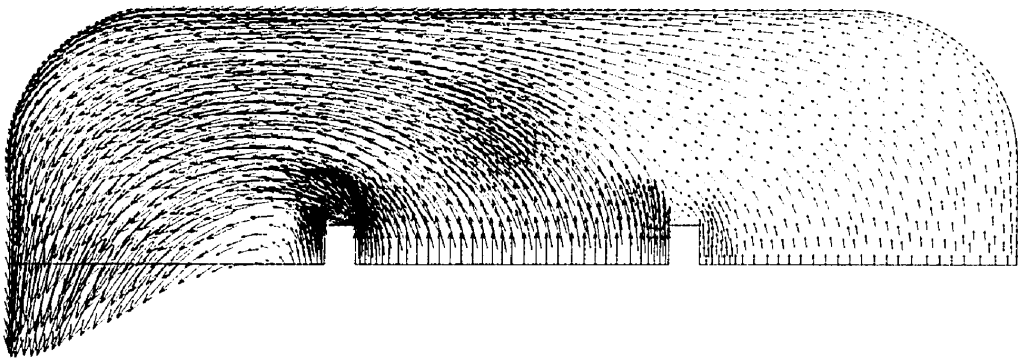
Figure A-19 : Champ de vecteurs-vitesse, essai 7 : chambre plus large



Cycle 1

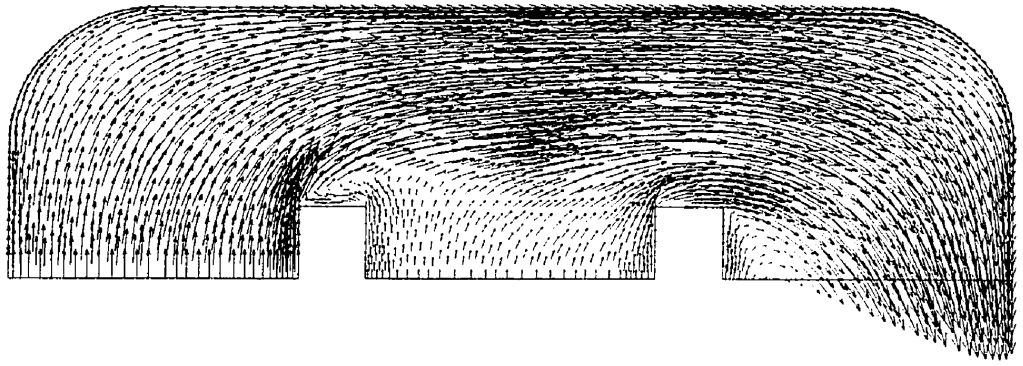


Cycle 2

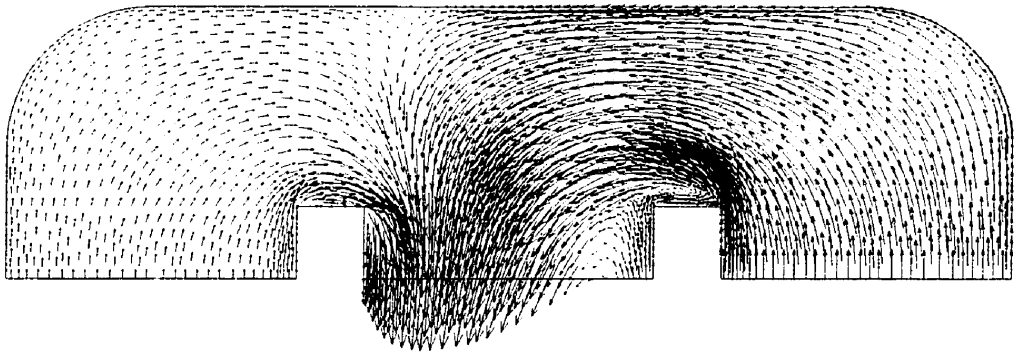


Cycle 3

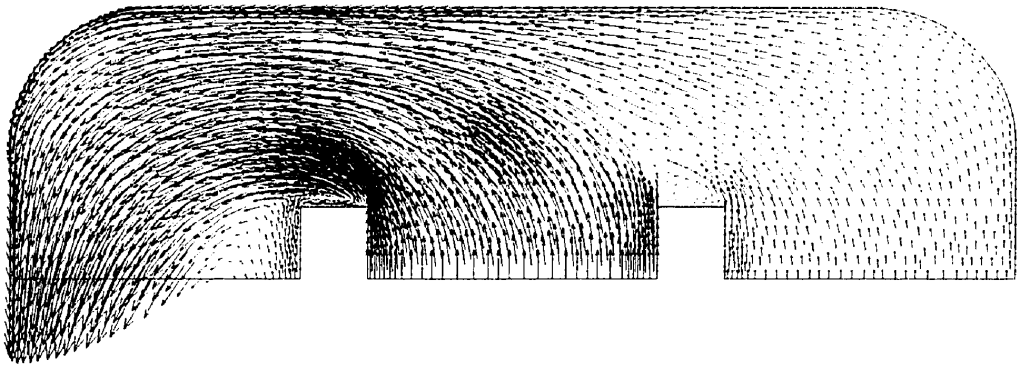
Figure A-20 : Champ de vecteurs-vitesse, essai 8 : chambre plus étroite



Cycle 1

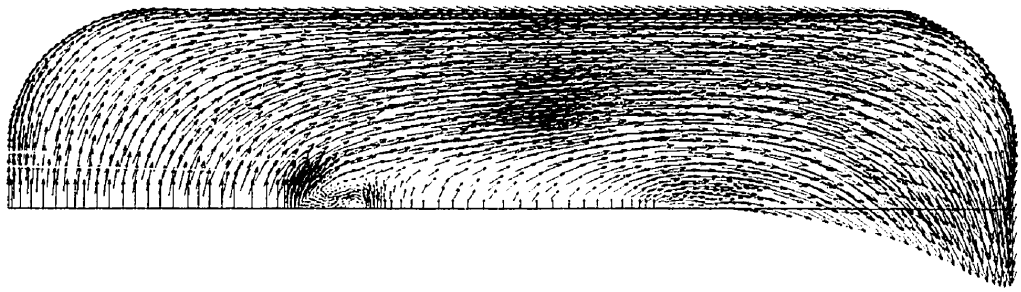


Cycle 2

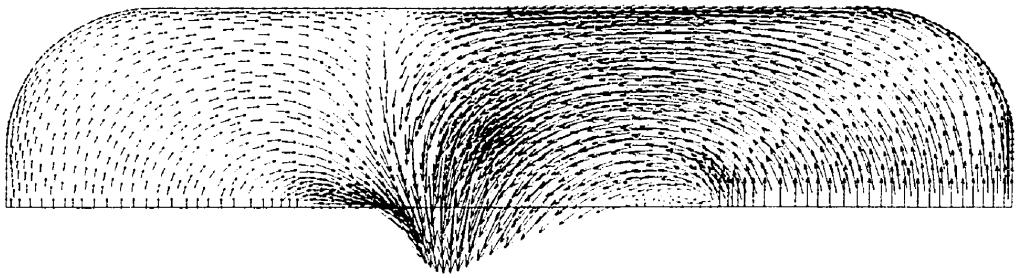


Cycle 3

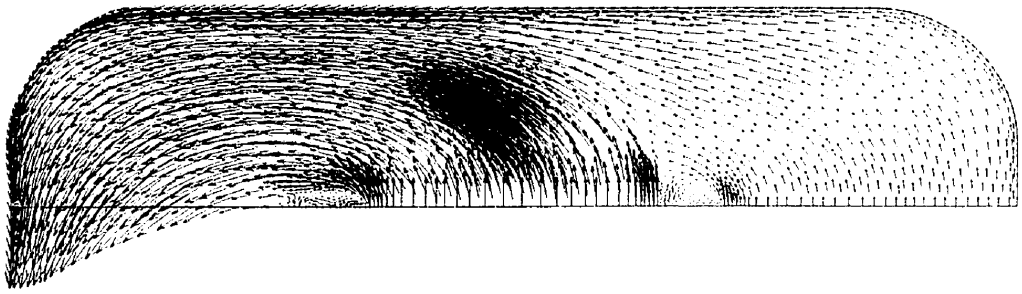
Figure A-21 : Champ de vecteurs-vitesse, essai 9 : lit plus grand



Cycle 1



Cycle 2



Cycle 3

Figure A-22 : Champ de vecteurs-vitesse, essai 10 : lit plus petit