

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE  
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE  
SCIENTIFIQUE



UNIVERSITE SAAD DEHLEB BLIDA  
Faculté des Sciences de l'Ingénieur  
Département : Aéronautique



Mémoire pour l'obtention  
du diplôme d'ingénieur d'état en Aéronautique  
Option : construction aéronautique

## THEME

Etude de la flamme laminaire prémélangée

**PRESENTE PAR :**

M<sup>r</sup> : BOUKACEM  
M<sup>r</sup> : TAHIMI

ABDESLAM  
ABDELADHIM

**ENCADRE PAR :**

M<sup>r</sup> : CHEGRANI. A

ANNEE UNIVERSITAIRE 2005 /2006

## Remerciements

*Au terme de ce travail, nous tenons à remercier en premier lieu, le bon dieu(Allah) qui nous a donné la force, la volonté et le courage pour terminer ce projet de fin d'étude.*

*Nous tenons à exprimer nos profondes à notre promoteur Monsieur Chegrani pour ces aides précieuses qu'il nous a offerts et sa disponibilité à tout moment pour l'élaboration de ce travail.*

*Nous remercions également les enseignants de département d'Aéronautique et toutes les personnes qui nous a assistées soutenues de près ou de loin. Sans oublier nos amis qui restent dans l'ombre que nous n'oublierons guère.*

*Enfin, nous présentons tous nos vifs et sincères remerciements à monsieur le président et les membres du Jury qui ont accepté d'honorer par leur présence notre travail.*

## *Dédicaces*

*C'est avec une grande joie que je dédie ce modeste travail à ma mère et mon père.*

*A mes frères et mes sœurs.*

*A mes petits neveux surtout ROZALIA.*

*A tout mes amis et amies zakia, aida et surtout nora.*

*A la mémoire de mon frère faycel qui repose en paix et j'espère que son âme est au paradis.*

*A celui que j'estime beaucoup pour son esprit sportif et dynamique.*

*ABDESLAM.*

# Dédicaces

C'est avec une grande joie que je dédie ce modeste travail à ma mère (Aïcha) que j'aime infiniment à mon père, mon frère et toutes mes sœurs, en particulier la petite Prima.

À ma grande mère Fekra qui repose en paix, à mon grand père, mes tantes Nacira, Hamida, à tous mes proches et mes enseignants.

À tous et toutes mes amis que j'aime et je respecte beaucoup, à Hassiba en particulier pour ces aides précieuses que j'oublierai jamais.

. Abdeladhim

## **Résumé :**

L'objet de ce travail est de réaliser un programme permettant d'étudier la variation de la température de fin de combustion, la vitesse et l'épaisseur de flamme laminaire prémélangée dans le cas d'un écoulement unidimensionnel en fonction de la richesse en utilisant le modèle de Zeldovitch ainsi que l'évolution de la composition massique de différents espèces chimiques le long de l'axe de mouvement pour un mélange pauvre, stoechiométrique et riche. Pour cette fin et après avoir présenté l'aspect thermodynamique et chimique de combustion, on a entamé l'étude de la flamme prémélangée laminaire en citant quelques modèles thermiques et diffusionnelles qui existent dans la littérature. L'introduction de la notion de scalaire passif et de chimie infiniment rapide nous a permis d'étudier la flamme laminaire non prémélangée qui est fréquemment rencontrée dans l'industrie.

## **Abstract:**

The object of this work is to carry out a program making it possible to study the variation in the temperature of combustion, the speed and the laminar thickness of flame premixed in the case of a unidimensional flow according to the wealth of using the model of Zeldovitch, as well as the evolution of the mass composition of different chemical species along the axis from movement for a poor, stoichiometric and rich mixture respectively. For this and after having to present the thermodynamic and chemical aspect of combustion, one started the study of laminar flame of premixing by quoting some thermal and diffusional models which exist in the literature. The introduction of the concept of passive scalar and infinitely fast chemistry us A makes it possible to study the laminar flame not premixed which is frequently met in industry.

## Nomenclature

Symbole	signification
$A^a$	Coefficient pré exponentiel.
$C_p$	Capacité calorifique massique.
$D_T$	Diffusivité thermique.
$D_{ij}, D_{AB}$	Diffusivité massique de l'espèce A (ou i) vers B (ou j).
$E$	Energie interne
$E_A, E_B$	Energie interne de gaz dans l'état A, B respectivement
$E_a$	Energie d'activation.
$F$	Fuel
$G$	Enthalpie libre.
$H$	Enthalpie standard.
$H_A, H_B$	Enthalpie standard de gaz dans l'état A, B respectivement
$H_R$	Enthalpie standard de mélange réactif.
$h$	Enthalpie massique
$H_p$	Enthalpie standard des produits de combustion.
$K$	Constante de vitesse.
$K_p$	Constante d'équilibre d'une réaction chimique.
$m_{vc}$	Masse de gaz dans le volume de contrôle.
$\dot{m}$	Débit massique.
$\dot{m}_{diff}$	Flux de diffusion de l'espèce i.
$O$	Oxydant
$P$	Pression statique.
$Q$	Quantité de chaleur.
$Q_p$	Quantité de chaleur dégagée à pression constante.
$Q_v$	Quantité de chaleur dégagée à volume constante.
$\dot{Q}$	Flux de chaleur.
$Q_{ram}$	Probabilité de ramification par collision.
$Q_{rup}$	Probabilité de rupture par collision.
$R$	Constante des gaz parfaits.
$rc$	Richesse.
$\dot{R}$	Radicaux libres.
$S$	Entropie.
$Sl$	Vitesse de la flamme.
$t$	Temps.
$T$	Température.
$T_o$	Température de référence.
$T_1, T_2$	Température des gaz frais et brûlés respectivement.
$U, U_x$	Vitesse.
$V$	Volume de contrôle.
$V_{ram}$	Vitesse de ramification.
$V_{rup}$	Vitesse de rupture.
$W$	Travail.
$\dot{W}$	Taux de réaction.
$\bar{W}$	Taux de réaction moyen.

$W_{ve}$	Travail effectué par le gaz dans le volume de contrôle.
$X_R$	Concentration des radicaux libres.
$Y_A, Y_B$	Fraction massique de l'espèce A, B respectivement.
$Z, Z_\delta$	Nombres de collisions
$Z_F$	Scalaire passif
$\Delta E$	Variation de l'énergie interne.
$\Delta G$	Variation de l'enthalpie libre.
$\Delta H$	Variation de l'enthalpie.
$\Delta S$	Variation de l'entropie.
$\theta$	Température adimensionnelle
$\rho$	Masse volumique
$\Sigma$	Surface du front de flamme
$\lambda$	Conductivité thermique
$\delta$	Épaisseur de la flamme
$\nu$	Coefficient stoechiométrique massique
$\tau$	Tenseur de force
$\sigma$	Système
$\phi$	Le rapport d'équivalence de la réaction chimique

# Sommaire

## Introduction Générale

### Chapitre I : Aspect thermodynamique de la flamme

I.1-Les principes de la thermodynamique.....	1
I.1.1-Définition.....	1
I.1.2-Le premier principe.....	2
I.1.3-Le deuxième principe.....	3
I.1.4-Transformations réversibles et irréversibles.....	4
I.2-Réactions chimiques de la combustion.....	4
I.2.1-Notions générales.....	4
I.2.1.1-Energie de démarrage.....	4
I.2.1.2-Les différents aspects de la combustion.....	5
I.2.2-Données théoriques de la combustion des hydrocarbures.....	6
I.3-Température et composition des produits de combustion.....	8
I.3.1-Conditions d'équilibre thermodynamique.....	8
I.3.2-Calcul de la température de combustion.....	9
I.3.2.1-Carburant et comburant ayant une même température.....	9
I.3.2.2-Combustion à volume constant.....	10
I.3.2.3-Combustion à pression constante.....	11

### Chapitre II : Aspect cinétique chimique de la flamme

Introduction.....	13
II.1-Généralités et définitions.....	13
II.2 Définition de la vitesse de réaction.....	15
II.2.1-Influence de la concentration des réactifs.....	15
II.2.2-Influence de la température et relation d'Arrhenius.....	16
II.3 Le mécanisme réactionnel de la combustion.....	16
II.4-Phénomène de transport de masse, de quantité de mouvement et d'énergie.....	18
II.4.1-Equation de conservation de masse(continuité).....	18
II.4.2-Conservation des espèces.....	20
II.4.2.1-La loi de Fick.....	20



II.4.2.2-Equation de conservation des espèces.....	21
II.4.3-Equation de conservation de quantité de mouvement.....	23
II.4.4-Equation de conservation d'énergie.....	24
II.5-Nombres sans dimension.....	26

### **Chapitre III : Flamme laminaire prémélangée**

III.1-Définitions.....	27
III.1.1-Déflagration.....	27
III.1.2-Détonation.....	27
III.1.3-Epaisseur de la flamme.....	27
III.2-Equation de l'onde de combustion et courbe d'Hugoniot.....	28
III.3-Propagation d'une flamme laminaire.....	34
III.4-Théorie de flamme de pré mélange laminaire.....	35
III.4.1-Théorie thermique.....	35
III.4.1.1-Théorie de Mallard et Le Chatelier.....	35
III.4.1.2-Théorie de Zeldovitch, Franck-Kaneneski et Semenov.....	37
III.4.1.3-Hypothèses simplificatrices.....	38
III.4.1.4-Equations de bilan.....	38
III.4.1.5-Détermination de la vitesse de flamme.....	38
III.4.1.6-Théorie de Zeldovitch améliorée.....	41
III.4.2-Théorie diffusionnelle.....	42
III.5-Approches récents.....	44
III.6-Autres approches.....	45

### **Chapitre IV : Flamme de diffusion laminaire**

IV.1-Généralités.....	46
IV.1.1-Situations génériques.....	46
IV.1.2-Interet des flammes de diffusion laminaire.....	47
IV.1.3-Analyse qualitative de la structure d'une flamme de diffusion Laminaire.....	48
IV.2-Calcul simplifié d'une flamme de diffusion laminaire.....	48

IV.2.1-Equations de base.....	49
IV.2.1.1-Equation de transport des réactifs .....	49
IV.2.1.2-Equation de transport des produits de combustion.....	49
IV.2.2-Scalaire passif.....	51
IV.2.3-Chimie infiniment rapide.....	53
IV.2.4-Dernière étape de résolution.....	55
 <b>Chapitre V : Présentation du modèle étudié</b>	
V.1-Hypothèses adoptées.....	58
V.2-Les équations de conservations.....	58
V.2.1-Conservation de masse.....	58
V.2.2-Conservation des espèces.....	58
V.2.3-Conservation d'énergie.....	59
V.3-Détermination des vitesses de propagation de flamme et de son épaisseur.....	61
V.4-Equation de la température et de fractions massiques.....	63
V.4.1-Equation de température.....	63
V.4.2-Equation des fractions massiques.....	65
V.5-Température de flamme adiabatique.....	66
V.5.1-Equations de combustion pour différents richesses.....	66
V.5.2-Calcul de la température de flamme adiabatique.....	67
V.5.2.1-Calcul de l'enthalpie du mélange frais.....	68
V.5.2.2-Calcul de l'enthalpie des produits.....	69
V.5.2.3-Algorithmme de Dichotomie.....	69
V.6- Organigramme.....	70
<b>Chapitre VI : Résultats et interprétations</b> .....	73
 <b>Conclusion Générale</b>	
<b>Références Bibliographiques</b>	
<b>Annexe A</b>	
<b>Annexe B</b>	
<b>Annexe C</b>	



# *Introduction Générale*

## INTRODUCTION GENERALE

Les flammes sont les manifestations pratiques d'interactions entre des phénomènes de nature chimique et physique plus particulièrement la mécanique des fluides. Suivant le sens communément admis, l'aspect chimique est constitué par la combustion, qui met en jeu des réactions chimiques nombreuses et pas toujours bien connues. L'aspect physique est constitué par les transferts de chaleur et de masse, la conduction, la diffusion moléculaire, le rayonnement et les phénomènes de changement de phase. Les mouvements des gaz, soit provoqués par les augmentations de température, soit par les conditions externes qui ont une influence sur les flammes, c'est l'interaction de ces trois aspects qu'il faut faire intervenir et pas uniquement leur juxtaposition.

La théorie de la flamme a débuté réellement vers la fin du siècle dernier (à l'époque de Mallard et Le Chatelier, vers 1880) ; elle était liée aux problèmes d'explosions. Elle s'est beaucoup développée depuis le début du XX<sup>e</sup> siècle, en relation avec le développement des moteurs à combustion de tout types et l'utilisation de l'énergie tirée des combustibles fossiles. T. von Karman et Y. Zeldovitch ont probablement été les deux chercheurs auxquelles la théorie des flammes doit le plus. Le premier a posé les équations générales, ce qui l'a conduit à inventer le vocable d'aerothermochimie pour désigner le domaine d'étude des écoulements réactifs avec transferts de chaleur et de masse, ce domaine est occupé en grande partie par la théorie des flammes. Le second a mis en évidence la spécificité des flammes à être régies par des lois physiques qui sont représentables par des fonctions fortement non linéaires de la température. Cette caractéristique, conduit à une structure de flamme composée de deux zones d'échelles très différentes, qui constitue le point de départ d'une approche théorique générale des flammes de prémélange. Aujourd'hui, la formulation d'une théorie décrivant les phénomènes de flammes est un objectif atteint dans de nombreux cas. Par exemple, les flammes se développant dans les milieux exclusivement gazeux, en écoulement laminaire, sont presque parfaitement décrites par la théorie.

Ceci, bien sûr, n'est pas dû uniquement aux théoriciens des flammes. Depuis 50 ans, l'analyse expérimentale des flammes a aussi fait des progrès très importants. Alors qu'au début, seules des mesures détaillées du champ de vitesse, de la température, des concentrations au sein des flammes ont été progressivement mises en œuvre et sont aujourd'hui largement utilisées. Les méthodes d'analyses qualitatives et quantitatives des flammes se sont développées grâce aux performances toujours croissantes des lasers et aux moyens modernes d'acquisition et de traitement des images. Ainsi l'analyse fine des champs thermo-chimiques dans les flammes, même en régime instationnaire, est maintenant possible dans de nombreux cas. Il est clair que le développement et la validation d'une théorie concernant un phénomène dépend essentiellement de la connaissance expérimentale que l'on peut en avoir et, à ce titre, les méthodes expérimentales mises au point ont joué un grand rôle dans l'établissement des théories et modèles de flammes actuels. Par ailleurs, les méthodes de calcul numérique des équations aux dérivées partielles, comportant à la fois de fortes non-linéarités et des termes ayant des temps caractéristiques très différents ont

fait beaucoup de progrès après les années 1950. Bien sur, c'est la connaissance de la physique impliquée qui est à la base de toute théorie, mais la disposition d'outils mathématiques et numériques fiables et efficaces peut découplé les possibilités de compréhension finale des objectifs physiques tels que les flammes, qui mettent en jeu de nombreux couplages de phénomènes plus élémentaires.

L'objectif de cette étude est donné une théorie générale sur les flammes laminaires et d'élaborer un programme permettant de calculer la température de la flamme et la composition massique des produits de combustion complète d'un hydrocarbure  $C_nH_m$  avec l'air, puis la vitesse de propagation de la flamme et son épaisseur.

Et comme application, nous avons choisi comme combustible, le méthane, le propane qui sont appliqués au différent four et à cause du manque de donne de kérosène comme l'énergie d'activation, on a choisi le n-decane qui a une formule approché au kérosène.

Nous avons commencé cet exposé par des rappels sur les principes de thermodynamique et quelques généralités sur la combustion avec les réactions chimique dans des différents cas et la température adiabatique de fin de combustion d'un hydrocarbure.

Le second chapitre traite l'aspect cinétique chimique de la flamme, ou nous avons donné quelques généralités sur la cinétique chimique de la combustion, la vitesse d'une réaction chimique et les réactions en chaînes.

Le troisième chapitre est consacré à une étude théorique d'une flamme laminaire prémélangée. Au début, nous avons défini les équations de l'onde de combustion avec les différents bilans, ce qui nous a permet d'avoir une idée sur la propagation d'une flamme laminaire et en fin nous avons donné quelques modèles sur la théorie de flamme.

Le quatrième chapitre traite un autre type de flamme qui est la flamme de diffusion laminaire avec sa théorie.

Le cinquième chapitre est consacré sur le modèle étudié, l'organigramme et le programme élaboré.

Les résultats obtenus par le programme sont présentés dans le dernier chapitre.

En fin, une conclusion termine notre étude.

*Chapitre I :*  
*Aspect thermodynamique*  
*De la flamme*

## I.1 Les principes de la thermodynamique

### I.1.1 Définitions

**Un système :** C'est une portion d'Univers découpée de façon convenable. L'extérieur (ou environnement) de ce système sera le reste de l'Univers.

**L'état d'un système :** Il est caractérisé par les valeurs que prennent un certain nombre de grandeurs mesurables, dites variables d'état (volume, température, pression, composition chimique, etc.).

On peut classer ces variables d'état en deux catégories :

— les unes dépendent de l'étendue (extension) du système et s'additionnent lorsqu'on réunit deux systèmes (masse, volume, etc.) de telles variables sont appelées extensives.

— les autres sont indépendantes de l'étendue du système (pression, température, etc.) et sont appelées variables intensives.

Au cours des transformations que subit le système, tout ou partie des variables d'état se modifie. On appelle fermées (ou cycliques) les transformations qui amènent toutes les variables à reprendre leurs valeurs initiales et ouvertes les autres transformations.

Une transformation quasi statique est telle que l'on peut définir à tout moment les variables d'état (en particulier les variables intensives, mais en réservant le cas de la température), qu'une modification très légère de l'une d'elles, convenablement choisie, inverse le sens de la transformation. Une parcelle d'énergie de forme déterminée (pour le moment non calorifique) en transit à travers la frontière d'un système peut se mettre sous la forme :

$$\delta W = X dX \tag{I.1}$$

X : étant une variable intensive.

dX : la variation algébrique de la variable extensive correspondante.

Un cas particulier très important pour les fluides est l'énergie de compression :

$$\delta W = -P dV \tag{I.2}$$

Le signe moins provient de la convention prise habituellement pour comptabiliser l'énergie (une énergie reçue par un système est comptée positivement et une énergie fournie par un système est comptée négativement), voir la figure (1.1).

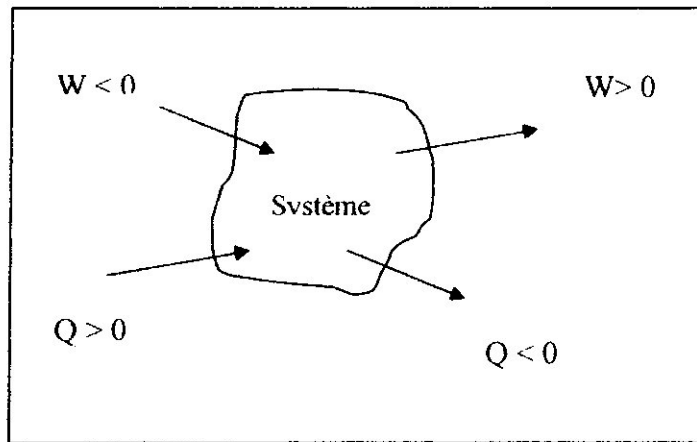


Fig. 1.1. La convention de signe de l'énergie du système

### 1.1.2. Le premier principe

Il exprime la conservation de l'énergie entre deux états, l'état final et l'état initial effectué pour un système.

Lorsqu'un système effectue une transformation fermée en échangeant avec l'extérieur :

$$(W+Q)_{\text{cycle}} = 0 \quad (1.3)$$

Lorsque le système effectue une transformation ouverte, la somme algébrique du travail et de la quantité de chaleur échangés avec l'extérieur est constante et ne dépend que des états initial et final. On peut donc définir une fonction d'état, appelée énergie interne, qui prend les valeurs bien déterminées, dans l'état initial et dans l'état final et telle que :

$$\Delta E = E_B - E_A = Q + W \quad (1.4)$$

Il résulte de la propriété de fonction d'état que la variation de l'énergie interne est une différentielle totale exacte. c'est cette propriété mathématique qui permet d'exprimer le premier principe.

Exemple :

si le travail échangé est un travail de compression, correspondant à une variation du volume:

$$dE = \delta Q - PdV \quad (1.5)$$

$$\text{Soit : } Q = \Delta E + \int_A^B PdV$$



Dans une transformation isochore (volume constant).

$$dV = 0$$

$$Q = \Delta E \tag{I.6}$$

Dans une transformation isobare (pression constante).

$$Q = \Delta E + P(V_B - V_A) \tag{I.7}$$

On voit ainsi s'introduire la fonction d'état enthalpie

$$H = E + PV \tag{I.8}$$

### 1.1.3 Le deuxième principe

La température est la tension de l'énergie calorifique, son extensité est appelée entropie. On peut donc écrire, de manière analogue à la formule (I.1) pour la quantité de chaleur échangée par un système à la température T :

$$\delta Q = T dS \tag{I.9}$$

Si l'on met en relation avec un autre système  $\sigma_1$  à une température  $T_1$ , inférieure à T, en supposant isoler l'ensemble du système, la quantité de chaleur reçue par le système  $\sigma_1$  est :

$$\delta Q = T_1 dS_1.$$

$$\text{Donc: } +T dS + T_1 dS_1 = 0 \tag{I.10}$$

Comme  $T > T_1$ ,  $dS < dS_1$

$$\text{Donc } dS' = dS + dS_1 > 0 \tag{I.11}$$

Ainsi la variation d'entropie de l'ensemble isolée est positive. La chaleur est donc la forme d'énergie dont l'extensité peut être créée, ce qui entraîne la possibilité du récepteur monotherme. L'ensemble  $\sigma$  et  $\sigma_1$  étant thermiquement isolé, l'effet thermique se réduit à la quantité de chaleur échangée entre ces deux systèmes. De plus le système échange l'énergie non calorifique. On a alors :

$$\Delta E_\sigma = Q + W \quad (\text{Premier principe}) \tag{I.12}$$

$$\text{Et } \Delta S' = \Delta S_\sigma + \Delta S_{\sigma_1} \geq 0 \quad (\text{deuxième principe}) \tag{I.13}$$

Avec  $\Delta S_{\sigma_1} = -\frac{Q}{T_1}$

### I.1.4 Transformations réversibles et irréversibles

Lorsque l'expression (I.13) est une inégalité,  $\Delta S'$  est strictement positive et on ne peut donc utiliser la formule (I.13) pour calculer  $\Delta S$ . si, en revanche, on s'arrange pour que  $\Delta S'$  soit nulle, alors :

$$\Delta S_{\sigma} = \frac{Q}{T_1} = S_B - S_A \quad (I.14)$$

Car l'entropie de système est une fonction d'état (ce qui entraîne que  $dS$  est une différentielle totale exacte). L'annulation de  $\Delta S'$  correspond au cas des transformations réversibles. Ces transformations sont des cas très particuliers puisqu'elles correspondent à une extensité calorifique conservative. Elles ont l'immense intérêt de ne pas définir l'entropie, mais de permettre le calcul de sa variation entre les états A et B, d'après la relation (I.14). Ainsi, on aura résolu le calcul de la variation de l'entropie chaque fois que l'on aura pu imaginer une transformation qui fait passer réversiblement de A à B.

## I.2. Réactions chimiques de la combustion :

### I.2.1. Notions générales.

La combustion est une réaction chimique exothermique résultant de la combinaison d'un corps appelé combustible avec l'oxygène appelé comburant. Celle-ci ne peut s'amorcer qu'en présence d'une énergie dite "de démarrage", c'est la source de chaleur.

Le combustible se présente sous l'un des trois états de la matière :

- solide (bois, papiers, chiffons, charbon, ...).
- liquide (les pétroles).
- gazeux (hydrogène, butane, propane, ...)

Plus le combustible est vaporisé, plus la combustion est rapide et complète.

Le comburant : (oxygène, chlore, fluore ... etc.).

#### I. 2.1.1. L'énergie de démarrage

Energie de démarrage est une énergie très variable et elle fournit la chaleur initiale pour la combustion.

- la chaleur (flamme, étincelle)

- un frottement ou un choc.
- une réaction chimique (fermentation).

Toute combustion est accompagnée d'un dégagement de chaleur et de gaz.

La combustion évolue par trois périodes de durée variable, suivant les corps combustibles.

#### **I.2.1.1. 1 La distillation :**

Période pendant laquelle le corps exposé à la source de chaleur (énergie de démarrage) distille des gaz.

#### **I.2.1.1. 2 L'inflammation :**

Les gaz combustibles, mélangés à l'air en proportion convenable, s'enflamment et la combustion se produit.

#### **I.2.1.1. 3 L'incandescence :**

Dès que la plus grande partie des gaz est épuisée, la partie solide du combustible se consomme à son tour sous forme de carbonisation.

### **I.2.1.2 les Différentes aspects de combustion**

Suivant la vitesse, la combustion se présente sous différents aspects :

#### **I.2.1.2. 1 Combustion lente :**

Elle se produit à température assez basse, sans émission de lumière (oxydation du fer, respiration, fermentation...). La chaleur dégagée par cette combustion se dissipe sans échauffement notable du combustible.

#### **I.2.1.2. 2 Combustion vive :**

Il y a émission de lumière, la combustion se fait avec flammes et incandescence. La réaction est rapide; la chaleur dégagée est suffisante pour porter le combustible à incandescence, ce qui se traduit par des flammes.

#### **I.2.1.2. 3 Combustion très vive :**

C'est la déflagration, la vitesse de combustion voisine à celle du son (335 m/s). La pression développée est de 1 à 2 bars.

#### **I.2.1.2. 4 combustions instantanées :**

C'est l'explosion, la vitesse de combustion est de 4000 à 5000 m/s et la pression développée de 20 à 30 bars (gaz de ville, butane, propane...).

#### **I.2.1.2.5 Combustion spontanée :**

C'est une forme de combustion lente au départ et qui devient vive par la suite (matières entassées : chiffons gras, limailles...).

Elle se produit lorsque certaines substances se trouvent emmagasinées en meules ou en tas. L'échauffement initial est souvent dû à l'action de micro-organismes l'augmentation de température entretient le processus d'oxydation alimenté par l'air retenu dans la meule, provoquant ainsi un nouveau dégagement de chaleur.

La chaleur ne pouvant se dissiper à l'extérieur, la température continue à s'élever, activant la vitesse de combustion jusqu'à ce qu'une fois atteinte la température d'ignition, la masse s'enflamme spontanément.

### **I.2.2 Données théoriques de la combustion des hydrocarbures :**

#### **I.2.2.1 Rapport stoechiométrique et richesse :**

Pour que la combustion puisse avoir lieu, il est indispensable de fournir au combustible une quantité d'air déterminée, suivant cette quantité d'air fournie, la combustion peut être complète ou incomplète.

On appelle stoechiométrie, la composition du mélange air- comburant requise pour obtenir une combustion complète.

Le rapport stoechiométrique ( $\nu$ ), appelle aussi ' pouvoir comburivore', est le quotient des masses relatives d'air et de carburant mises en présence :

$$\nu = (\text{masse d'air} / \text{masse du carburant})_{\text{stoech}}$$

Pour les hydrocarbures :  $13 < \nu < 15$

Pour les carburants classiques :  $14.2 < \nu < 14.4$ .

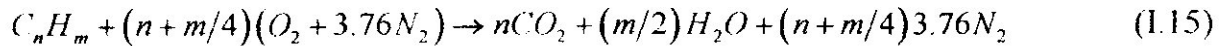
Un mélange stoechiométrique contient donc suffisamment d'oxygène pour oxyder tout le carbone et anhydride carbonique, tout hydrogène en eau sans excès d'air.

En admettant pour l'air la composition volumique suivante :

O<sub>2</sub> : 20.9%

$N_2$  : 79.1 %

La réaction stoechiométrique complète de l'hydrocarbure s'écrit :



Cette composition du mélange correspond à :  $(n+m/4)$  moles d'oxygène par mole de carburant.

Dans les moteurs thermiques, les conditions de combustion des hydrocarbures sont très souvent éloignées de celles correspondant à la stoechiométrie et se caractérisent soit par un excès, soit par un défaut de carburant par rapport à l'oxygène.

La composition de milieu réactionnel s'exprime alors par un paramètre appelé richesse, note ( $rc$ ) et définie par la relation :

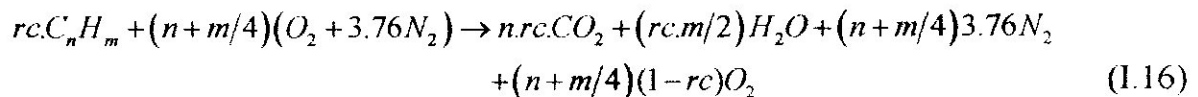
$$r_c = [( \text{masse de carburant} ) / ( \text{masse d'air} )]_{\text{réel}} / [( \text{masse de carburant} ) / ( \text{masse d'air} )]_{\text{stoch}}$$

$$\text{Soit : } r_c = [mc / \text{mair}]_{\text{réel}} \times \nu$$

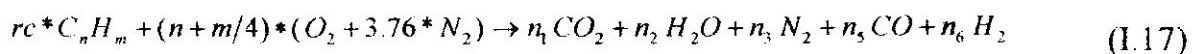
La richesse se rapporte au réactif le plus noble et le mélange est riche ou pauvre selon que le carburant se trouve en excès ou en défaut. On distingue les trois types de mélanges suivants :

- Le mélange stoechiométrique ( $rc=1$ ).
- Le mélange pauvre (avec excès d'air,  $rc < 1$ ).
- Le mélange riche (avec excès de carburant,  $rc > 1$ ).
- Certains auteurs emploient parfois le coefficient d'excès d'air qui est l'inverse de la richesse. Il est noté que cette richesse indique seulement la composition de la charge et nous ne renseigne en rien sur les masses respectives d'air et de carburant qui rentre localement en réaction.

Considérons maintenant une combustion complète d'un hydrocarbure, en présence d'un excès d'air, dans ce cas, l'équation chimique globale de combustion complète s'écrit :



Pour une combustion complète d'un hydrocarbure, en présence d'un excès de carburant, dans ce cas l'équation s'écrit :



### 1.3 Température et composition des produits de combustion :

Après combustion complète du carburant, le carbone se trouve normalement sous forme d'anhydride carbonique et l'hydrogène sous forme d'eau. En réalité, la composition du mélange final est toujours beaucoup plus complexe. En mélange riche par exemple, le système réactionnel ne contient pas suffisamment d'oxygène pour permettre une combustion totale. Il se forme alors en plus des espèces citées précédemment, de l'oxyde de carbone, et de l'hydrogène. Par ailleurs, les produits obtenus peuvent subir un grand nombre de réactions ultérieures (dissociations, combinaisons) dont le degré d'avancement varie avec la pression et la température.

#### 1.3.1 Condition d'équilibre thermodynamique :

Les équations qui régissent la combustion s'obtiennent en exprimant la condition d'équilibre thermodynamique, c'est-à-dire en écrivant que l'enthalpie libre du mélange est minimal. Cette grandeur peut s'écrire :

$$g = \sum G_m n_m \quad (1.18)$$

Le nombre de moles du composé  $m$  est  $n_m$ , l'enthalpie molaire partielle ou potentielle chimique est :

$$G_m = \partial g / \partial n_m \quad (1.19)$$

Pour expliquer les potentiels chimiques, nous admettons que les constituants à l'état gazeux se comportent comme des gaz parfaits :  
L'enthalpie libre du constituant ( $m$ ) à la température  $T$  et à la pression de 1 atm est exprimée par :

$$(G^\circ)_m = (H^\circ)_m - T(S^\circ)_m \quad (1.20)$$

Avec :

$$\Delta H_k(T) = \sum \nu_k \cdot H_i(T) \quad (1.21)$$

$$\Delta S_k^\circ(T) = \sum \nu_k \cdot S_i^\circ(T) \quad (1.22)$$

$$\Delta G_k^\circ(T) = \Delta H_k(T) - T \Delta S_k^\circ(T) \quad (1.23)$$

Les conditions d'équilibres s'écrivent :

$$\ln Kp_k(T) = -\Delta G_k^\circ(T) \quad (1.24)$$

$$\ln Kp_k(T) = (-\Delta H_k(T) + T \Delta S_k^\circ(T)) / RT \quad (1.25)$$

C'est sous cette forme que nous utiliserons les équations exprimant l'équilibre conjointement avec les équations exprimant la conservation du nombre d'atomes constituant le mélange pour déterminer la composition des produits de fin de combustion.

Les constantes d'équilibre ne dépendent que de la température et peuvent être calculées à partir des grandeurs thermodynamiques relatives aux constituants chaque équilibre.

### 1.3.2 Calcul de la température de combustion [3]

#### 1.3.2.1 Carburant et comburant ayant une même température $T_0=298.15$ °K :

- **convention des thermotechniciens :**

Combustible + comburant  $\rightarrow$  produits de combustion +  $\Delta H_R$

La chaleur engendrée par la combustion est :

$$\Delta H_R = -Q.$$

Les thermotechniciens comptent positivement la chaleur de combustion.

Réaction à volume constant :

$$(\Delta H_R)_V = -Q_V$$

Réaction à pression constante :

$$(\Delta H_R)_P = -Q_P$$

Avec :  $\Delta H_R > 0$

- **convention les thermodynamiciens :**

Contrairement à la convention des thermotechniciens qui comptent positivement la chaleur de combustion, la convention des thermodynamiciens comptent négativement la chaleur de combustion.

#### Hypothèses :

La chaleur produite sert uniquement à chauffer les gaz brûlés (combustion adiabatique).

A : mélange carburant - comburant.

B : ensemble des produits de combustion.

D'après le 1<sup>er</sup> principe :

$$W_{AB} + Q_{AB} = \Delta E = E_B - E_A$$

Avec :

$$E_A = \sum n_{A_i} \cdot E_{A_i}$$

$n_{Ai}$  : Nombre de moles du  $i^{\text{ème}}$  constituant.

$E_{Ai}$  : Énergie interne molaire du  $i^{\text{ème}}$  constituant.

Le Même raisonnement pour les produits :  $E_B = \sum n_{Bi} \cdot E_{Bi}$

### 1.3.2 combustion à volume constant :

- combustion isochore :  $W_{AB} = -\int P dV = 0$

- combustion adiabatique :  $Q_{AB} = 0$

$Q_{AB}$  : chaleur échangée avec le milieu extérieur.

$$E_B - E_A = 0 \text{ Où } E_B = E_A$$

L'énergie interne n'est fonction que de la température (loi de joule) pour le cas d'un gaz parfait. Soient :

$T_A$  : température avant combustion.

$T_B$  : température après combustion ou fin de combustion.

$$E_B(T_B) = E_A(T_A)$$

L'énergie interne n'est définie que par rapport à un état de référence.

$$[\Delta E_A]_{T_0}^{T_A} = E_A(T_A) - E_A(T_0)$$

$$[\Delta E_B]_{T_0}^{T_B} = E_B(T_B) - E_B(T_0)$$

Or :

$$E_A(T_A) = E_B(T_B) \Rightarrow [\Delta E_B]_{T_0}^{T_B} = E_A(T_A) - E_B(T_0) \quad (1.27)$$

Ajoutant et retranchant à l'équation  $E_A(T_0)$

$$[\Delta E_B]_{T_0}^{T_B} = \underbrace{E_A(T_A) - E_A(T_0)} + \underbrace{E_A(T_0) - E_B(T_0)} \quad (1.28)$$

$$[\Delta E_B]_{T_0}^{T_B} = [\Delta E_A]_{T_0}^{T_A} + [E_A(T_0) - E_B(T_0)]$$

Or d'après le 1<sup>er</sup> principe :

$$E_B(T_0) - E_A(T_0) = (\Delta E_A^B)_{T_0} = (Q_{AB})_{T_0} \quad (1.29)$$

Chaleur reçue de l'extérieur à la température de référence, c'est-à-dire, changée de signe de chaleur dégagée par la combustion à volume constant.



$$(Q_{AB})_{T_0} = -Q_V$$

D'où :

$$[\Delta E_B]_{T_0}^{T_B} = [\Delta E_A]_{T_0}^{T_A} + Q_V \quad (I.30)$$

Etat initial connue :

$$[\Delta E_A]_{T_0}^{T_A} = E_A(T_A) - E_A(T_0)$$

Connaissant la composition du mélange, on peut calculer la chaleur à volume constant par :

$$[\Delta E_B]_{T_0}^{T_B} = [\Delta E_A]_{T_0}^{T_A} + Q_V$$

Et à partir des tables, on détermine la température de combustion.

### I.3.2.3 Combustion à pression constante :

- 1<sup>er</sup> principe de la thermodynamique (système ouvert) :

$$W_{TAB} + Q_{AB} = \Delta H_A^B \quad (I.31)$$

Avec :

$$W_T = \int_A^B V dp = 0 \text{ Car } p = \text{Cte}$$

- combustion adiabatique (pas d'échange calorifique avec l'extérieur) :

$$Q_{AB} = 0 \Rightarrow H_B = H_A$$

Soit :

$T_A$  : température avant combustion.

$T_B$  : température en fin de combustion.

$$\Rightarrow H_A(T_A) = H_B(T_B)$$

$$H_B = \underbrace{(\Delta H_f)_B^{298.15}}_{\text{Enthalpie de formation à 298 K}} + \underbrace{\int_{T_0}^{T_B} C_p dT}_{\text{enthalpie sensible}} = (\Delta H_f)_B^{298.15} + [\Delta H_B]_{T_0}^{T_B}$$

(I.32)

$$H_A = (\Delta H_f)_A^{298.15} + \int_{T_0}^{T_A} C_p dT = (\Delta H_f)_A^{298.15} + [\Delta H_A]_{T_0}^{T_A}$$

(I.33)

$H_A$  et  $H_B$  : sont des enthalpies standard.

$$H_B - H_A = (\Delta H_f)_B^{298.15} - (\Delta H_f)_A^{298.15} + \int_{T_0}^{T_B} (C_p dT)_B - \int_{T_0}^{T_A} (C_p dT)_A$$

Or :

$$H_A = H_B \Rightarrow (\Delta H_R)_{298.15} + [\Delta H_B]_{T_0}^{T_B} - [\Delta H_A]_{T_0}^{T_A} = 0$$

$$(\Delta H_R)_{298.15} = H_B(T_0) - H_A(T_0) = -Q_p$$

$$\Rightarrow \underbrace{[\Delta H_B]_{T_0}^{T_B}}_{\text{enthalpie sensible(B)}} = \underbrace{Q_p}_{\text{Chaleur de réaction à 298°K}} + \underbrace{[\Delta H_A]_{T_0}^{T_A}}_{\text{enthalpie sensible(A)}} \quad (I.34)$$

$$[\Delta H'_{T_B}]_{T_0}^{T_B} = \sum \frac{n_{A_i}}{n_B} \cdot [\Delta H_{A_i}]_{T_0}^{T_A} + \sum \frac{n_{A_i}}{n_B} \cdot Q_p' \quad (I.35)$$

Avec :

$H'$  : enthalpie molaire

$Q_{p_i}$  : chaleur dégagée à  $T_0$  (°K) à pression constante.

Soient :

Enthalpie des produits :  $H_p$

Enthalpie des réactifs :  $H_R$

D'après l'équation (I.34)  $[\Delta H_B]_{T_0}^{T_B} = [\Delta H_A]_{T_0}^{T_A} + Q_p$

$$[\Delta H_p]_{T_0}^{T_2} = \underbrace{[\Delta H_A]_{T_0}^{T_0}}_{=0} + (Q_p)_{298.25} = (Q_p)_{298.15}$$

la température initiale est  $T_0 = 298.15^\circ\text{K}$

$$Q_p = (\Delta H_p)_{T_2} - (\Delta H_p)_{T_0} = \int_{T_0}^{T_2} \sum n_i C_{p_{pc}} dT = \int_0^{T_2} \sum n_i C_{p_{pc}} dT - \int_0^{T_0} \sum n_i C_{p_{pc}} dT$$

(I.36)

Avec :

$$\int_0^{T_0} \sum n_i C_{p_{pc}} dT : \text{Enthalpie sensible ou thermique d'échauffement.}$$

$$Q_p = \int_{T_0}^{T_2} \sum n_i C_{p_{pc}} dT : \text{Énergie nécessaire pour chauffer les produits de}$$

combustion de  $T_0$  à  $T_2$ .

$$(I.36) \Rightarrow \underbrace{(\Delta H_p)_{T_2}}_{\text{enthalpie sensible des produits de combustion à } T_2=298.15^\circ\text{K}} = \underbrace{(\Delta H_p)_{T_0}}_{\text{enthalpie sensible des produits de combustion à } T_0=298.15^\circ\text{K}} + \underbrace{(Q_p)_{298.15}}_{\text{enthalpie de réaction à } 298.15^\circ\text{K}} \quad (I.37)$$

$(\Delta H_p)_{T_0}$  : Étant calculée, on en déduit par interpolation la température  $T_2$  de combustion.

*Chapitre II :*  
*Aspect cinétique chimique*  
*De la flamme*

## Introduction

La thermodynamique ne donne aucune indication sur le mécanisme de réaction c'est à dire la manière dont les réactifs se transforment en produits. On a vu que des transformations thermodynamiques possibles n'ont aucune chance d'être observées tant que leur vitesse de réaction est infiniment lente, Le facteur temps est très important dans la vie courante, certaines réactions sont rapides et d'autres lentes. La cinétique chimique vient pour compléter la thermodynamique en introduisant le facteur temps ignoré par cette dernière.

### II. 1 Généralités et définitions [6]

La thermodynamique utilise essentiellement des grandeurs comme la température ou les concentrations qui n'ont de sens que pour les systèmes contenant des individus en nombre assez grand pour se prêter aux considérations statistiques. Les symboles chimiques, H, H<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O, CH<sub>4</sub>, etc., y désignent sans la moindre ambiguïté des moles et non des atomes ou des molécules (ce que veut d'ailleurs la notation atomique). Il peut arriver cependant, et on le verra, ce peut être le cas en cinétique chimique, qu'on ait à considérer les individus eux-mêmes, atomes, ions, radicaux ou molécules et qu'on le fasse en utilisant la notation atomique habituelle.

#### Exemple :

Considérons la réaction chimique suivante :



La réaction chimique peut en effet se produire, du moins si les conditions voulues sont réalisées. L'écriture de cette réaction signifie que 16 g de méthane réagissent avec 142 g de chlore, pour donner 12g de carbone et 146 g de HCl. Le premier membre est en somme la photographie du système initial, le second celle du système final, ceci ne montre pas toutes les situations qui peuvent se produire entre ces deux photographies, donc sur l'évolution du système, soit encore sur le passage du système initial, au système final. Ce n'est pas le film des événements. La réaction (II.1) est une réaction de bilan.

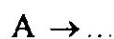
Or au niveau microphysique cela suppose les 4 coupures des 4 liaisons (C—H) de méthane, les 2 coupures des 2 liaisons (Cl—Cl) des deux molécules chlore et la réalisation des 4 liaisons H—Cl dans les 4 molécules de HCl du second membre, ainsi que celles de chaque atome de carbone avec ses plus proches voisins dans carbone solide, donc dans le cas présent d'un solide une espèce de molécule géante contenant beaucoup d'atomes de carbone liés entre eux; chaque atome de carbone a de ce fait n proches voisins, liés à lui par n liaisons: chaque atome de carbone y contribue pour moitié. On peut sans doute imaginer assez facilement que la coupure d'une liaison ait lieu dans une même étape en synchronisme avec la réalisation d'une autre. Mais dès que les opérations deviennent assez nombreuses, comme ce cas, il est assez naturel de penser qu'elles ne peuvent se produire suivant une seule étape. Il faut en imaginer

plusieurs. Chaque étape est appelée réaction élémentaire, leur ensemble constituant le mécanisme cinétique.

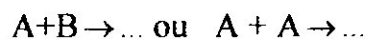
Si on arrive assez facilement aux notions de réaction élémentaire et de mécanisme cinétique, leurs natures ne sont pas connues pour autant. Le mécanisme cinétique découle en effet d'hypothèses qu'il faut ensuite confronter avec les données expérimentales. Notamment les valeurs des vitesses de réaction. Même si la confrontation est satisfaisante, le mécanisme demeure hypothétique: rien ne dit qu'un autre, à découvrir, ne soit pas lui aussi compatible avec les mêmes données expérimentales. Mais il est vrai que plus ces données sont nombreuses, plus le nombre d'hypothèses raisonnables diminue, plus on tend vers l'unicité de la solution au problème posé. Or ce problème du mécanisme cinétique est au coeur de la cinétique chimique.

Pour étudier l'aspect purement thermodynamique de la combustion et calculer les températures adiabatiques atteintes, la connaissance du mécanisme chimique réel de la combustion est inutile. Mais il est nécessaire pour savoir si la combustion peut effectivement avoir lieu dans certaines conditions données, et si elle peut effectivement atteindre l'équilibre chimique complet dans le temps disponible. Ces deux questions importantes demandent absolument la connaissance des réactions élémentaires dans la combustion. Cela va être abordé dans ce second chapitre. La première partie de celui-ci sera consacrée à la définition et l'étude des réactions élémentaires, de la rapidité avec laquelle elles ont lieu, et des lois qui permettent de la calculer. La seconde partie introduira la notion de réactions en chaîne, qui est essentiellement le mécanisme de base des processus de combustion [7].

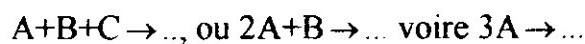
Par définition, la molécularité est le nombre d'espèces chimiques figurant dans le premier membre d'une réaction élémentaire. C'est donc une notion théorique dans la mesure où la notion de réaction élémentaire est elle-même une notion théorique. La molécularité vaut un pour les réactions, dites mono- moléculaires, du type:



Elle vaut 2 pour celles, dites bimoléculaires, du type:



et 3 pour celles, dites trimoléculaires, du type:

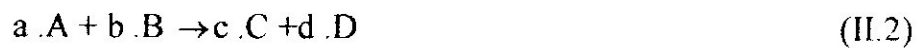


La première valeur suppose que A est instable dans les conditions considérées; cela peut être le cas pour une espèce transitoire qui se modifie ou se décompose une fois produite. La deuxième suppose la rencontre de deux espèces chimiques et la troisième de trois, ce qui est beaucoup plus rare; il faut en effet que pendant la durée, brève en général, de la rencontre de deux espèces, donc avant leur séparation, il en arrive une troisième. La probabilité de rencontre quadruple, donc de molécularité égale à quatre, est tellement faible qu'elle n'est jamais envisagée. Aussi les réactions

élémentaires que nous allons maintenant envisager se limiteront - principalement à des réactions bimoléculaires [7].

## II.2 Définition de la vitesse de réaction [7]

On considère une réaction chimique symbolisée par l'équation suivante :



Les variations des nombres de mole de chaque espèce sont liées à l'avancement de la réaction par la relation :

$$-\frac{dn_A}{a} = -\frac{dn_B}{b} = +\frac{dn_C}{c} = +\frac{dn_D}{d} = \xi \quad (\text{II.3})$$

$\xi$  : est l'avancement de la réaction ;  $0 < \xi < 1$

Le signe moins correspond aux concentrations qui diminuent (réactifs).

Le signe plus correspond aux concentrations qui augmentent (produits).

La relation (II.3) peut s'écrire sous la forme suivante :

$$-\frac{d[A]}{a} = -\frac{d[B]}{b} = +\frac{d[C]}{c} = +\frac{d[D]}{d} = \xi$$

Donc la vitesse de réaction instantanée est définie par la relation :

$$\dot{W} = \frac{d\xi}{dt} \quad (\text{II.4})$$

Et d'après la relation liant l'avancement de la réaction aux concentrations, on peut écrire :

$$\dot{W} = -\frac{1}{a} \frac{d[A]}{dt} = -\frac{1}{b} \frac{d[B]}{dt} = +\frac{1}{c} \frac{d[C]}{dt} = +\frac{1}{d} \frac{d[D]}{dt} = \xi \quad (\text{II.5})$$

La vitesse de réaction s'exprime en nombre de mole ou en Kg par unité de temps et de volume.

### II.2.1 Influence de concentration [6]

Une réaction est influencée par la concentration des réactifs, En effet, les chocs entre particules qui réagissent sont plus fréquents à fortes concentrations cependant la relation liant la concentration à la vitesse de réaction est rarement simple et elle est toujours établie d'une manière expérimentale.

- ordre partiel, ordre global d'une réaction

La vitesse de réaction peut dans de nombreux cas être mise sous la forme :

$$\dot{W} = K [\text{fuel}]^i [\text{oxydant}]^j \quad (\text{II.6})$$

Où les coefficients  $i$  et  $j$  peuvent ne rien avoir avec les coefficients stoechiométriques, ces coefficients sont appelés ordre partiel.

$K$  : constante de vitesse.

$i$  : ordre partiel par rapport au fuel.

$j$  : ordre partiel par rapport à l'oxydant.

$i$  et  $j$  varient d'une réaction à une autre et sont déterminés expérimentalement. La somme  $i+j$  des ordres partiels est appelée ordre global.

### 1.2.2 Influence de la température et relation d'Arrhenius [6]

La vitesse de réaction ou la constante de vitesse est en général très sensible aux variations de température. L'expression de la constante de vitesse  $K$  exprimée par la loi d'Arrhenius :

$$K = A^a \cdot \exp(-E_a/RT) \quad (\text{II.7})$$

$A^a$  : facteur pré exponentiel.

$E_a$  : énergie d'activation.

$R$  : constante des gaz universel.

#### - Définition de l'énergie d'activation

L'énergie d'activation  $E_a$  est la quantité minimale d'énergie que doivent posséder deux molécules pour donner lieu à un choc efficace.

### II.3 Le mécanisme réactionnel de la combustion [7]

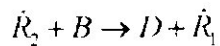
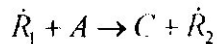
Il est évident que l'expression globale ne rend pas compte du mécanisme réel de la réaction chimique.

#### A. Initiation :

Cette étape d'initiation a comme effet de créer un très petit nombre de radicaux. Une fois que le mécanisme a été « initié » ainsi, le rôle de l'étape d'initiation dans la création de nouvelles radicales sera repris par les étapes de ramification de la chaîne.

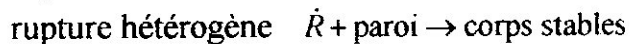
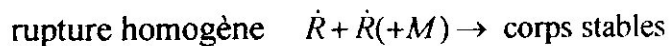
#### B. Propagation de la chaîne :

La propagation de la chaîne se fait suivant le schéma ci-dessous



### C. Terminaison de la chaîne :

La chaîne peut être terminée ou rompue, à savoir par une étape dite de rupture, qui fait disparaître les radicaux  $\dot{R}_1$  ou  $\dot{R}_2$  qui sont les propagateurs de chaîne. Cette rupture peut avoir lieu en phase homogène ou en phase hétérogène lors d'une collision d'un radical sur la paroi du réacteur :

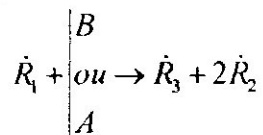


### D. Ramification de la chaîne :

Au cours de la combustion d'autres étapes élémentaires peuvent intervenir qui, à l'instar de l'étape d'initiation, mais avec une vitesse réactionnelle plus élevée, augmentent le nombre de radicaux libres dans le système ; chacun des nouveaux radicaux créés est à même de réaliser le maillon de propagation, de sorte que la chaîne principale se trouve enrichie par des chaînes latérales de propagation. Cette ramification de la chaîne peut se faire de différentes façons :

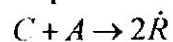
#### - Ramification directe :

La ramification est dite directe lorsqu'elle se fait à partir d'un des réactions primitives.



#### - Ramification indirecte :

Celle-ci se fait à partir d'une espèce intermédiaire élaborée elle-même par les étapes élémentaires de propagation :



Ces ramifications indirectes jouent un rôle important dans l'auto inflammation des hydrocarbures.

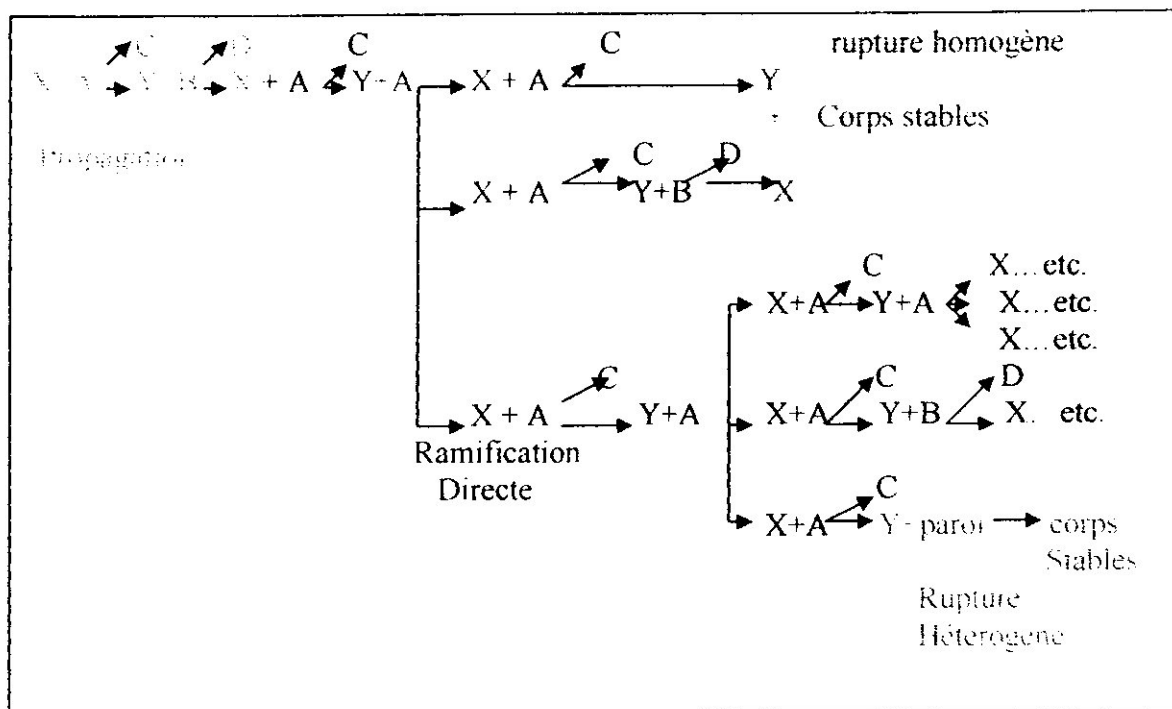
Vérifiez qu'en tout cas, qu'il s'agisse d'une ramification indirecte ou directe, la règle de la parité des valences libres est respectée

X : désigne le radical  $R_1$

Y : désigne le radical  $R_2$

On peut se faire une idée de l'évolution d'une réaction de combustion par les chaînes ramifiées d'après le schéma suivant :





## II.4 Phénomènes de transport de masse, de quantité de mouvement et d'énergie [8]

### II.4.1 Equation de conservation de masse (continuité)

On considère la flamme plane unidimensionnelle d'une épaisseur  $\Delta X$  (figure 2.1)

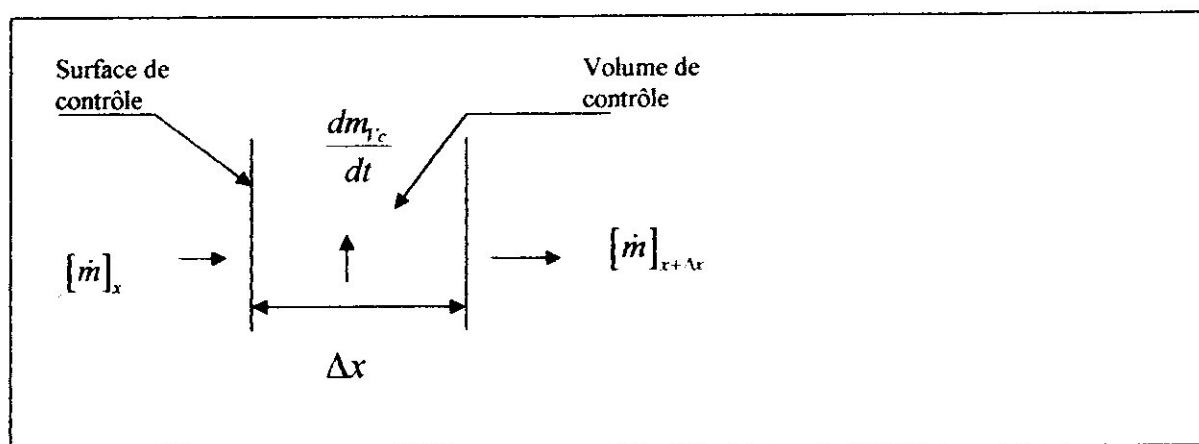


Fig.2. 1 volume de contrôle unidimensionnel pour une flamme plane

$[m]_x$  : masse entrante dans le volume de contrôle.

$[m]_{x+\Delta x}$  : masse sortante de volume de contrôle.

$\frac{dm_{vc}}{dt}$  : taux d'accumulation dans le volume de contrôle

Si on fait le bilan massique on trouve :

$$\frac{dm_{vc}}{dt} = [\dot{m}]_x - [\dot{m}]_{x+\Delta x} \quad (\text{II.8})$$

$m_{vc}$  : masse de volume de contrôle.

$$m_{vc} = \rho V$$

$V$  : volume de contrôle.

$$V = \Sigma \Delta x$$

$\Sigma$  : surface de volume de contrôle.

Le débit massique :

$$\dot{m} = \rho U_x \Sigma$$

$U_x$  : vitesse de l'écoulement au point  $x$ .

L'équation (II.8) peut être écrite comme suit :

$$\frac{d(\rho \Sigma \Delta x)}{dt} = [\rho U_x \Sigma]_x - [\rho U_x \Sigma]_{x+\Delta x} \quad (\text{II.9})$$

En divisant l'équation par  $\Sigma \Delta x$  et pour  $\Delta x$  qui tend vers zéro on obtient :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{\partial(\rho U_x)}{\partial x} \quad (\text{II.10})$$

Si l'écoulement est permanent on obtient :

$$\frac{\partial(\rho U_x)}{\partial x} = 0 \quad (\text{II.11.a})$$

$$\rho U_x = \text{Cte} \quad (\text{II.11.b})$$

La forme générale de cette équation est :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla(\rho U) = 0 \quad (\text{II.12})$$

## II.4.2 Conservation des espèces [8]

### II.4.2.1 Loi de Fick

On considère un mélange de gaz non réactif contenant deux espèces moléculaires A et B. La loi de Fick permet de déterminer le taux de diffusion d'une espèce vers une autre. On peut écrire cette loi pour le cas unidimensionnel à deux espèces :

$$\dot{m}_A = Y_A (\dot{m}_A + \dot{m}_B) - \rho D_{AB} \frac{dY_A}{dx} \quad (\text{II.13})$$

$\dot{m}_A$  : flux massique de l'espèce A par unité de surface.

$Y_A$  : fraction massique de l'espèce A.

$$Y_A = \frac{m_A}{m_A + m_B} = \frac{\dot{m}_A}{\dot{m}_A + \dot{m}_B}$$

$\rho$  : masse volumique.

$D_{AB}$  : diffusivité massique de l'espèce A vers l'espèce B.

$-\rho D_{AB} \frac{dY_A}{dx}$  : flux massique par unité de surface de diffusion pour l'espèce A vers l'espèce

$$-\rho D_{AB} \frac{dY_A}{dx} = \dot{m}_{diff}$$

$\dot{m}_A = Y_A (\dot{m}_A + \dot{m}_B) = Y_A \dot{m} =$  flux massique de l'espèce A en absence de diffusion

L'équation (II.13) est une équation unidimensionnelle, on peut la écrire de façon générale :

La masse totale du mélange binaire est la somme de flux massique des espèces A et B.

$$\dot{m}_A = Y_A (\dot{m}_A + \dot{m}_B) - \rho D_{AB} \nabla Y_A \quad (\text{II.14})$$

$$\dot{m} = \dot{m}_A + \dot{m}_B \quad (\text{II.15})$$

D'après l'équation (II.13) on obtient :

$$\dot{m} = Y_A \dot{m} - \rho D_{AB} \frac{dY_A}{dx} + Y_B \dot{m} - \rho D_{BA} \frac{dY_B}{dx} \quad (\text{II.16.a})$$

$$\dot{m} = \dot{m}(Y_A + Y_B) - \rho D_{AB} \frac{dY_A}{dx} - \rho D_{BA} \frac{dY_B}{dx} \quad (\text{II.16.b})$$

Pour un mélange de n élément on a :

$$\sum_{i=1}^n Y_i = 1$$

Donc  $Y_A + Y_B = 1$  (mélange binaire).

L'équation (II.16.b) réduite sous cette forme :

$$\rho D_{AB} \frac{dY_A}{dx} - \rho D_{BA} \frac{dY_B}{dx} = 0 \quad (\text{II.17})$$

#### II.4.2.1 l'équation de conservation des espèces [8]

Pour un écoulement unidimensionnel d'une flamme plane d'épaisseur  $\Delta x$  (figure I.4)

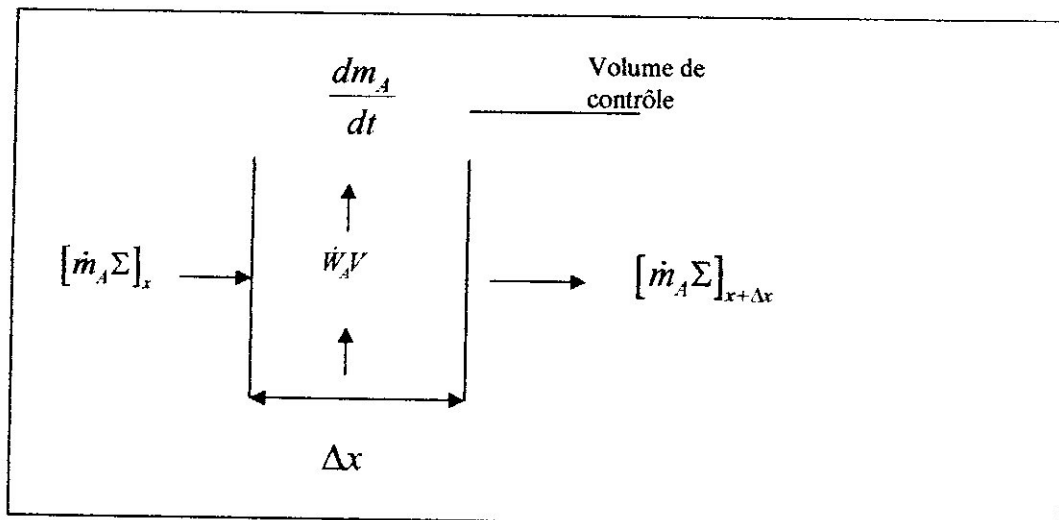


Fig. (2.2) volume de contrôle, unidimensionnel d'une flamme plane

Le bilan massique est donné par :

$$\frac{dm_{A,c}}{dt} = [\dot{m}_A \Sigma]_x - [\dot{m}_A \Sigma]_{x+\Delta x} + \dot{W}_A V \quad (\text{II.18})$$

$[\dot{m}_A \Sigma]_x$  : flux massique entrant de l'espèce A.

$[\dot{m}_A \Sigma]_{x+\Delta x}$  : flux massique sortant de l'espèce A.

$\frac{dm_{A_c}}{dt}$  : taux d'accumulation de l'espèce A dans le volume de contrôle.

$\dot{W}_A V$  : taux de production de masse de l'espèce A par la réaction chimique.

$\dot{W}_A$  : taux de réaction [Kg/m<sup>3</sup> s].

On a :

$$m_{A_c} = Y_A m_{Vc} = Y_A \rho V_{Vc} \quad (\text{II.19})$$

Avec :

$V = \Sigma \Delta x$  : volume de contrôle.

Pour  $\dot{m}_A$  donné par la loi de Fick on obtient :

$$\Sigma \Delta x \frac{\partial(\rho Y_A)}{\partial t} = \Sigma \left[ Y_A \dot{m} - \rho D_{AB} \frac{\partial Y_A}{\partial x} \right]_x - \Sigma \left[ Y_A \dot{m} - \rho D_{AB} \frac{\partial Y_A}{\partial x} \right]_{x+\Delta x} + \dot{W}_A \Sigma \Delta x \quad (\text{II.20})$$

On divise l'équation (II.20) par  $\Sigma \Delta x$  et on pose  $\Delta x$  tend vers zéro l'équation devient :

$$\frac{\partial(\rho Y_A)}{\partial t} = - \frac{\partial}{\partial x} \left[ Y_A \dot{m} - \rho D_{AB} \frac{\partial Y_A}{\partial x} \right] + \dot{W}_A \quad (\text{II.21})$$

Pour un écoulement permanent l'équation (II.21) devient :

$$\dot{W}_A - \frac{d}{dx} \left[ Y_A \dot{m} - \rho D_{AB} \frac{\partial Y_A}{\partial x} \right] = 0$$

Dans un écoulement de n espèces unidimensionnels :

$$\frac{dm_i}{dx} = \dot{W}_i \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (\text{II.22})$$

D'après (II.22) on peut écrire l'équation par rapport aux d'autres axes Y, Z :

$$\frac{dm_i}{dy} = \dot{W}_A \quad ; \quad \frac{dm_i}{dz} = \dot{W}_A$$

En généralisant l'équation :

$$\dot{W}_i - \Delta \dot{m}_i = 0 \quad (II.23)$$

L'équation (II.23) pour le cas stationnaire, mais dans le cas in stationnaire elle devienne:

$$\frac{\partial(\rho Y_i)}{\partial t} + \nabla \dot{m}_i = \dot{W}_i \quad i = 1, \dots, n$$

### II.4.3 Equation de conservation de quantité de mouvement [8]

En considère un volume de contrôle d'épaisseur  $\Delta x$  unidimensionnel en écoulement stationnaire et on néglige les forces de viscosités et de volume (figure 2.3)

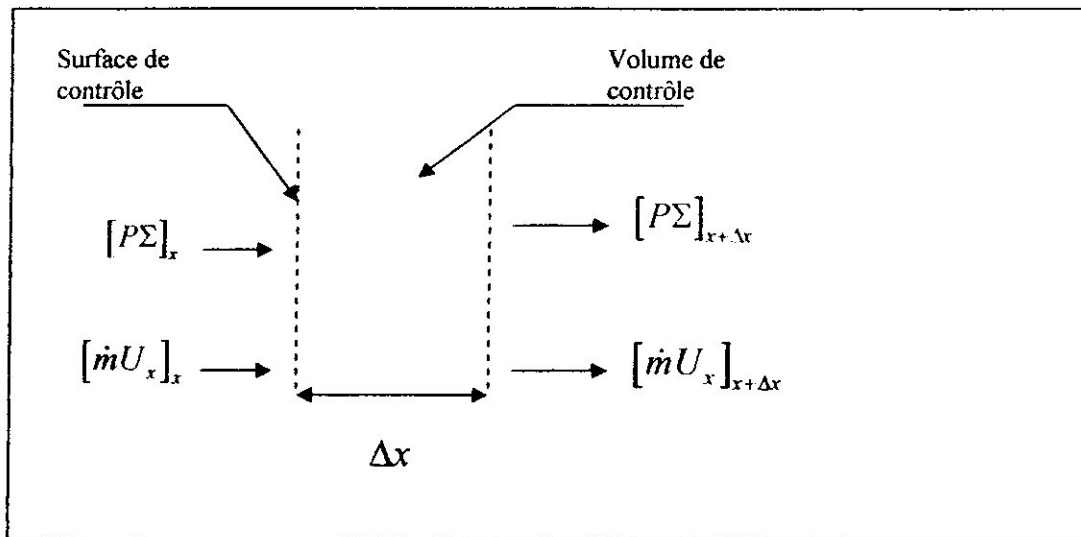


Fig.2.3 volume de contrôle unidimensionnel pour une flamme plane

Par le bilan énergétique en obtient :

$$\sum F = \dot{m}_{i, out} - \dot{m}_{i, in} \quad (II.24)$$

$$[P\Sigma]_x - [P\Sigma]_{x+\Delta x} = \dot{m}([U_x]_{x+\Delta x} - [U_x]_x) \quad (II.25)$$

On divise l'équation (II.25) par  $\Delta x$  et on le tend vers zéro, l'équation (II.25) devient :

$$-\frac{dp}{dx} = \dot{m} \frac{dU_x}{dx}$$

Avec :

$$\dot{m} = \rho U_x$$

Donc on obtient :

$$-\frac{dp}{dx} = \rho U_x \frac{dU_x}{dx} \quad (\text{II.26})$$

#### II.4.4 Equation de conservation d'énergie [8]

En considère un écoulement unidimensionnel de volume de contrôle d'une flamme plane d'épaisseur  $\Delta x$  (figure 2.4).

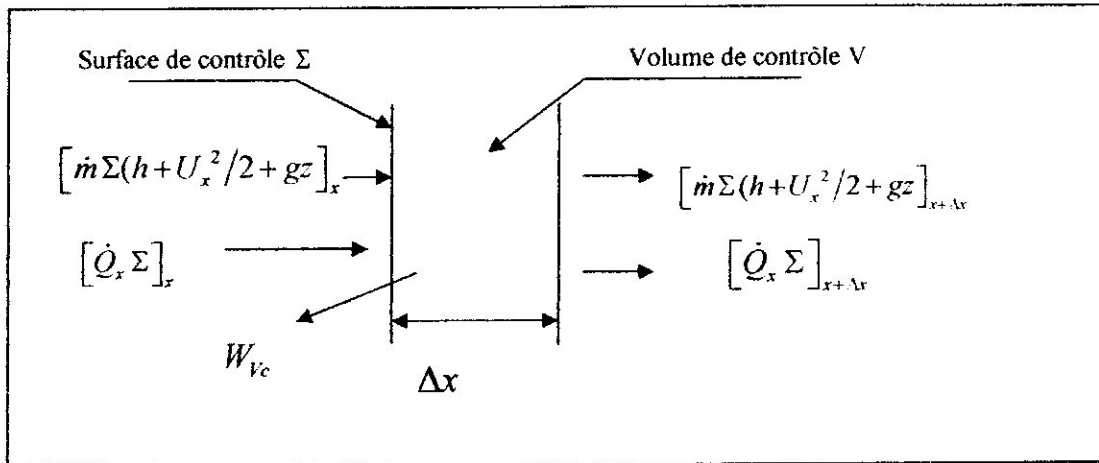


Fig.2.4 volume de contrôle unidimensionnel pour une flamme plane

En appliquant le premier principe de la thermodynamique pour les phénomènes de combustion :

$$(\dot{Q}_x - \dot{Q}_{x+\Delta x})\Sigma - W_{Vc} = \dot{m}\Sigma \left[ \left( h + \frac{U_x^2}{2} + gz \right)_{x+\Delta x} - \left( h + \frac{U_x^2}{2} + gz \right)_x \right] \quad (\text{II.27})$$

$\dot{Q}_x$  : flux de chaleur entrant.

$\dot{Q}_{x+\Delta x}$  : flux de chaleur sortant.

$W_{Vc}$  : le travail effectuée par le volume de contrôle.

Si on néglige l'énergie potentiel et le travail et on divise l'équation (II.27) par la surface A on trouve :

$$-(\dot{Q}_{x+\Delta x} - \dot{Q}_x) = \dot{m} \left[ \left( h + \frac{U_x^2}{2} \right)_{x+\Delta x} - \left( h + \frac{U_x^2}{2} \right)_x \right] \quad (\text{II.28})$$

On divise encore par  $\Delta x$  et on le tend vers zéro l'équation (II.28) devienne :

$$-\frac{d\dot{Q}_x}{dx} = \dot{m} \left( \frac{dh}{dx} + U_x \frac{dU_x}{dx} \right)$$

- La loi de Fourier [8]

Le flux de chaleur est composé de deux flux par conduction et par convection. D'après la loi de Fourier le flux de chaleur par conduction est :

$$\dot{Q}_{cond} = -\lambda \frac{dT}{dx}$$

Donc :

$$\underbrace{\dot{Q}_{cond}}_{\text{flux de chaleur total}} = \underbrace{-\lambda \nabla T}_{\text{flux par conduction}} + \underbrace{\sum \dot{m}_{i,diff} h_i}_{\text{flux par convection}} \quad (\text{II.29 a})$$

$\dot{m}_{i,diff}$  : flux de diffusion pour l'espèce i.

Pour un écoulement unidimensionnel on a :

$$\dot{Q}_x = -\lambda \frac{dT}{dx} + \sum \rho Y_i (U_{ix} - U_x) h_i \quad (\text{II.29 b})$$

Avec :

$$\dot{m}_i = \rho U_{ix} Y_i, \quad \dot{m} = \rho U_x \quad \text{et} \quad h = \sum Y_i h_i$$

$$\dot{Q}_x = -\lambda \frac{dT}{dx} + \sum \rho U_{ix} Y_i h_i - \rho U_x \sum Y_i h_i$$

$$\dot{Q}_x = -\lambda \frac{dT}{dx} + \sum \dot{m}_i h_i - \dot{m} h \quad (\text{II.30})$$

On introduit l'équation (II.30) dans (II.28), on trouve :

$$\frac{d}{dx} (\sum h_i \dot{m}_i) + \frac{d}{dx} \left( -\lambda \frac{dT}{dx} \right) + \dot{m} U_x \frac{dU_x}{dx} = 0 \quad (\text{II.31})$$

Le terme

$$\frac{d}{dx} (\sum h_i \dot{m}_i) = \sum \dot{m}_i \frac{dh_i}{dx} + \sum h_i \frac{d\dot{m}_i}{dx}$$

D'après l'équation (II.31) l'équation de l'énergie devient :

$$\sum \dot{m}_i \frac{dh_i}{dx} + \frac{d}{dx} \left( -\lambda \frac{dT}{dx} \right) - \dot{m} U_x \frac{dU_x}{dx} = -\sum h_i \dot{W}_i \quad (\text{II.32})$$



### II.5 Nombres sans dimensions [2]

Les coefficients définis sont tous en mètre carré par second. En les comparant entre eux pour déterminer les phénomènes dominants, on introduit :

- le nombre de Prandtl qui compare le transport de quantité de mouvement au transport thermique.

$$pr = \frac{\mu}{D_T}$$

- Le nombre de Schmidt qui compare le transport de quantité de mouvement au transport de masse par diffusion.

$$Sc = \frac{\mu}{D_{ij}}$$

- Le nombre de Lewis qui compare le transport de masse par diffusion au transport thermique.

$$Le = \frac{D_{ij}}{D_T} = \frac{Sc}{pr}$$

Si, en particulier :

$D_T = D_{ij} = \mu$ , les trois nombres  $pr$ ,  $Sc$  et  $Le$  sont égaux à un [2], les profils de vitesse de concentration et de température sont les mêmes : c'est l'analogie de Reynolds.

*Chapitre III :*  
*Flamme laminaire*  
*prémélangée*

### III.1 Définitions

#### III.1.1 Déflagration

La quantité de chaleur dégagée par la combustion dans le réacteur est supérieure à la quantité de chaleur transférée à l'extérieur du système en réaction (la température du mélange frais ou la concentration en carburant sont suffisamment élevées). La combustion s'entretient d'elle-même la flamme qui est en mesure de quitter la zone d'allumage sans extinction. Le processus de diffusion de la chaleur entre la flamme et le mélange frais peut être lié à un processus de diffusion moléculaire.

#### III.1.2 Détonation

On amont du front de flamme où l'onde de combustion il y a une onde de choc dans un mélange combustible, il peut y avoir une flamme créée par l'augmentation de pression et de température du mélange frais, dans le front de l'onde de choc, la flamme se déplace avec le front de l'onde de choc.

#### III.1.3 L'épaisseur de la flamme

L'épaisseur de la flamme est définie, comme étant le rapport entre la différence des températures, entre les gaz brûlés et les gaz frais et le gradient de température maximum [4].

$$\delta = \frac{(T_2 - T_1)}{\left(\frac{dT}{dx}\right)_{Max}} \quad (III.1)$$

$\delta$  : L'épaisseur de la flamme.  
 $T_2$  : température des gaz brûlés.  
 $T_1$  : température des gaz frais

Il est possible de subdiviser la région où se produit la combustion en deux zones principales:

- une zone de préchauffage.
- la zone de réaction proprement dite.

Dans la zone de préchauffage, les phénomènes essentiels sont des transferts de chaleur et de matière. En revanche, les réactions chimiques y dépendent essentiellement du combustible utilisé; pour une molécule très stable. On ne constate ni décomposition ni pyrolyse. Pour les autres hydrocarbures saturés, les phénomènes de craquage thermique et de pyrolyse sont au contraire importants et produisent des

hydrocarbures plus légers. Le résultat essentiel est que, quel que soit le combustible, les corps qui entrent dans la zone de réaction proprement dite sont très voisins. C'est ce qui explique que, pour tous ces corps, on trouve des caractéristiques de combustion très proches dans un bec Bunsen. L'essentiel des réactions chimiques qui ont lieu dans la zone de réaction peut être décrit à l'aide du modèle de la réaction simple. En suivant une ligne de courant, l'évolution de la température peut être représentée par la figure (3.1) [2].

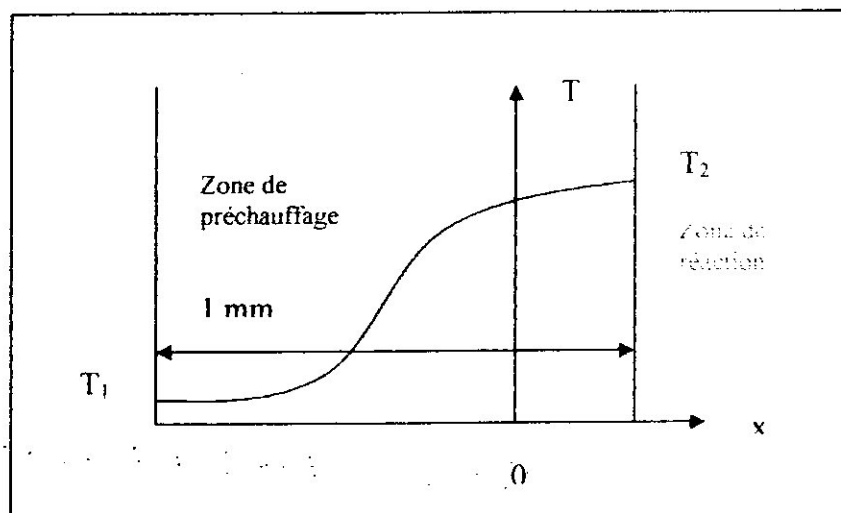


Fig. (3.1) Evolution de la température de la flamme.

### III.2 Equation de l'onde de combustion et courbe d'Hugoniot

Le mélange de comburant et de combustible est réalisé avant le passage de la flamme, comme dans un tube, la flamme balaie ce tube à la manière d'une onde appelée « onde de combustion ». En progressant du milieu brûlé vers le milieu frais figure (3.2) [2].

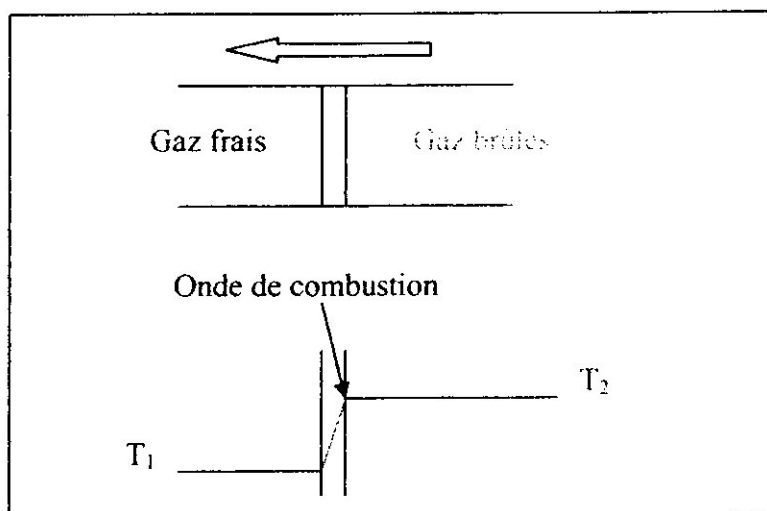


Fig. (3.2) représentation plane d'une onde de combustion

Nous allons écrire les équations de conservation pour un écoulement unidimensionnel en adoptant les hypothèses suivantes :

Gaz parfaits ( $\gamma = Cte$  ;  $c_p = Cte$  )

- L'indice 1 désignant les gaz frais.
- L'indice 2 les gaz brûlés.

$U$  : vitesse de l'écoulement des gaz

$\rho$  : masse volumique des gaz

$\dot{m}$  : débit massique des gaz par unité de surface

**a- Equation de continuité :**

$$\dot{m} \text{ est constant alors : } \rho_1 U_1 = \rho_2 U_2 \quad (\text{III.2})$$

**b- Equation de quantité de mouvement :**

$$\begin{aligned} \rho U^2 + P &= Cte \\ \rho_1 + \rho_1 U_1^2 &= \rho_2 + \rho_2 U_2^2 \end{aligned} \quad (\text{III.3})$$

**c- Equation d'énergie :**

$$h_1 + \frac{U_1^2}{2} = h_2 + \frac{U_2^2}{2} \quad (\text{III.4})$$

$h_1$  : enthalpie des gaz frais

$h_2$  : enthalpie des gaz brûlés

$$h_1 = Cp(T_1 - T_0) + h_{f1}^0 \quad \text{avec} \quad h_{f1}^0 = \sum Y_i \Delta h_{f,i}^0$$

$$h_2 = Cp(T_2 - T_0) + h_{f2}^0 \quad \text{avec} \quad h_{f2}^0 = \sum Y_i \Delta h_{f,i}^0$$

$h_f^0$  : est enthalpie massique de formation dans l'état standard

$T_0$  : Température de l'état standard

L'équation (III.4) devient :

$$c_p T_1 + h_{f1}^0 + \frac{U_1^2}{2} = c_p T_2 + h_{f2}^0 + \frac{U_2^2}{2}$$

$$\Delta h_f^0 = h_{f1}^0 - h_{f2}^0$$

$$c_p T_1 + \frac{U_1^2}{2} + \Delta h_f^0 = c_p T_2 + \frac{U_2^2}{2}$$

$\Delta h_f^0$  : est l'enthalpie massique de réaction de combustion.

**d- Equation d'état :**

$$p_1 = \rho_1 R T_1 \quad (III.5)$$

$$p_2 = \rho_2 R T_2 \quad (III.6)$$

Cp : chaleur massique à pression constante

h : enthalpie massique

P : pression

R : constante universelle des gaz

La combinaison des relations (III.2) et (III.3) donne :

$$p_1 + \dot{m}^2 \frac{1}{\rho_1} = p_2 + \dot{m}^2 \frac{1}{\rho_2} \quad (III.7)$$

De (III.7) on peut trouver  $\dot{m}$

$$\dot{m}^2 \left( \frac{1}{\rho_1} - \frac{1}{\rho_2} \right) = p_2 - p_1 \Rightarrow \dot{m}^2 = \frac{p_2 - p_1}{\frac{1}{\rho_1} - \frac{1}{\rho_2}}$$

$$\dot{m}^2 = \frac{p_2 - p_1}{\frac{1}{\rho_1} - \frac{1}{\rho_2}} \quad (III.8)$$

Les points représentatifs des gaz frais 1 et les gaz brûlés 2 sur un diagramme de Clapeyron  $[p, (1/\rho)]$  sont donc sur une droite de pente négative.

$-\dot{m}^2$  appelées : droite de Rayleigh (fig. 3.3).

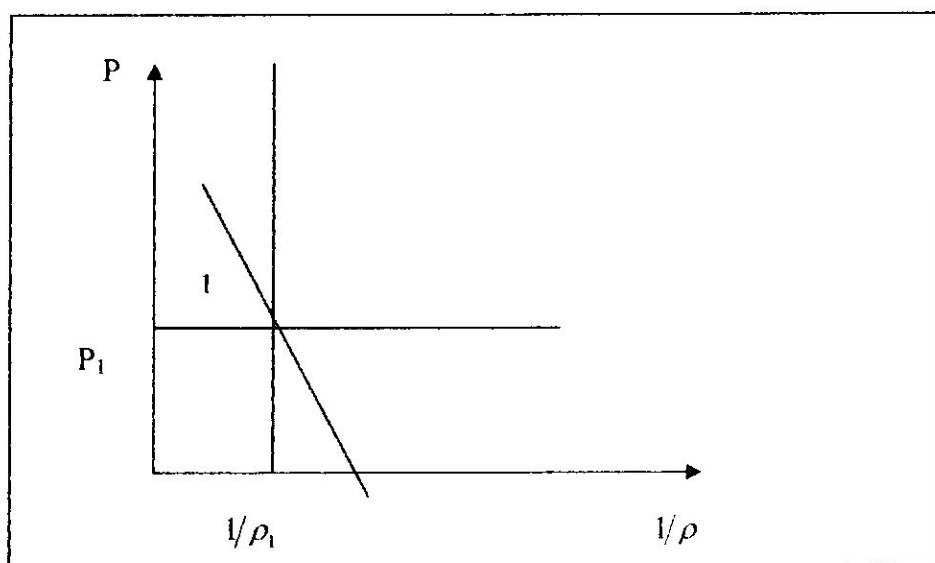


Fig.3.3 : droite de Rayleigh

La pente droite détermine la vitesse de l'onde de combustion par rapport à l'état initial 1, puisque d'après (III.2) :

$$U_1 = \dot{m} / \rho_1$$

Les équations (III.2) et (III.3) permettent également d'écrire :

$$U_1^2 = \frac{1}{\rho_1^2} \frac{P_2 - P_1}{(1/\rho_1) - (1/\rho_2)} \quad (III.9)$$

Soit, en introduisant la vitesse du son :

$$c_1^2 = \gamma RT_1 = \gamma P_1 (1/\rho_1)$$

Et le nombre de Mach :  $Ma_1 = \frac{U_1}{c_1}$

$$\gamma Ma_1^2 = \left( \frac{P_2}{P_1} - 1 \right) / \left( 1 - \frac{(1/\rho_2)}{(1/\rho_1)} \right) \quad (III.10)$$

Et de même :

$$\gamma Ma_2^2 = \left( 1 - \frac{P_2}{P_1} \right) / \left( \frac{(1/\rho_2)}{(1/\rho_1)} - 1 \right) \quad (III.11)$$

Relation liant les nombres de mach de l'onde de combustion par rapport aux gaz frais et aux gaz brûlés aux valeurs des paramètres des états 1 et 2. Cherchons un lieu pour les points 2 dans le diagramme  $[p, (1/\rho)]$  de la figure (3.3). Pour cela, utilisons l'équation de l'énergie (III.4) :

$$h_2 - h_1 = \frac{1}{2} (U_1^2 - U_2^2)$$

Comme d'après (III.2) :

$$U_1^2 - U_2^2 = \dot{m}^2 \left( \frac{1}{\rho_1^2} - \frac{1}{\rho_2^2} \right)$$

Et d'après (III.3) :

$$\dot{m}^2 = \frac{P_2 - P_1}{(1/\rho_1) - (1/\rho_2)}$$

On obtient l'équation d'Hugoniot :

$$h_2 - h_1 = \frac{1}{2} (P_2 - P_1) \left( \frac{1}{\rho_1} + \frac{1}{\rho_2} \right) \quad (III.12)$$

Pour un état initial donné,  $[p_1, (1/\rho_1)]$  et un état final correspondant à :

$$h_2 - h_1 = c_p (T_2 - T_1) - \Delta h_f^0$$

Cette équation s'exprime en fonction de l'enthalpie de réaction  $\Delta h_f^0$  et des caractéristiques  $(p_2, (1/\rho_2))$  des produits.

Avec :

$$c_p = R \frac{\gamma}{\gamma - 1}$$

On suppose que  $\gamma = Cte$  donc  $C_p = Cte$

D'après (III.5) et (III.6) vérifiée pour la combustion dans l'air est :

$$T_2 - T_1 = \frac{1}{R} \left( \frac{p_2}{\rho_2} - \frac{p_1}{\rho_1} \right) \quad (III.13)$$

D'après (III.12) et (III.13) On obtient la relation .

$$\frac{\gamma}{\gamma - 1} \left( \frac{p_2}{\rho_2} - \frac{p_1}{\rho_1} \right) - \frac{1}{2} (p_2 - p_1) \left( \frac{1}{\rho_1} + \frac{1}{\rho_2} \right) = \Delta h^0 \quad (III.14)$$

Le lieu des solutions est donc, dans le plan  $[p, (1/\rho)]$ , une courbe dont l'équation, en transformation (III.14), s'écrit :

$$p_2 = \frac{\alpha' + \beta' (1/\rho_2)}{\gamma' + \delta' (1/\rho_1)}$$

Avec :

$$\alpha' = \Delta h^0 + \frac{\gamma + 1}{2(\gamma - 1)} \frac{p_1}{\rho_1}, \quad \beta' = -\frac{p_1}{2}, \quad \gamma' = -\frac{p_1}{2\rho_1} \quad \text{et} \quad \delta' = \frac{\gamma + 1}{2(\gamma - 1)}$$

La courbe d'Hugoniot des produits est donc une hyperbole (fig. 3.3).

- pour  $\Delta h_f^0 \neq 0$  la réaction chimique existe donc il y a des produits, la courbe d'Hugoniot des produits est donc une hyperbole (fig. 3.4).

- pour  $\Delta h_f^0 = 0$  pas de réaction chimique, la courbe passe par le point 1 donc cette courbe donne un autre état du mélange est l'état compris entre l'onde de choc et le front de flamme, dans le cas d'une détonation et la courbe d'Hugoniot s'appelle courbe d'Hugoniot de choc.

Pour le cas de  $\Delta h_f^0 \neq 0$ , la courbe reportée dans le plan  $[P, 1/\rho]$  peut être décomposée en trois régions au qu'elles correspondent les différentes solutions possibles (intersections de la droite de Rayleigh avec l'hyperbole d'Hugoniot des produits).

**- pour la régions I**

Dans cette région, l'onde de combustion est supersonique. C'est une détonation, c'est-à-dire une onde de choc se déplaçant à une vitesse supersonique par rapport aux gaz frais, entraîne par le dégagement d'énergie du à la combustion.



On a  $p_2 \gg p_1$ ; en revanche,  $(1/\rho_2) < (1/\rho_1)$  mais le rapport  $(1/\rho_2)/(1/\rho_1)$  est très proche de 1. d'où d'après l'équation (III.10) :  
 $\gamma Ma_1^2 \gg 1$  et avec  $\gamma = 1.4$  alors  $Ma_1 > 1$

- pour la région II

Dans cette région, l'onde de combustion est subsonique, de nombre de mach faible. C'est une déflagration, c'est-à-dire une onde subsonique entretenue par la combustion. C'est ce qui se passe dans le bec Bunsen ; l'écoulement y étant laminaire, la vitesse de propagation de la déflagration s'appelle la vitesse de la flamme laminaire (ou encore, vitesse fondamentale de flamme).

$p_2 < p_1$  (mais très proche) et  $(1/\rho_2) > (1/\rho_1)$ . dans l'équation (III.10), le numérateur est donc négatif et grand devant 1. On a donc :

$$\gamma Ma_1^2 < 1 \text{ et } Ma_1 < 1$$

- pour la région III

Il n'y a pas de solution possible. On voit d'ailleurs que, d'après l'équation (III.10), cette région correspond à  $p_2 > p_1$  et  $(1/\rho_2) > (1/\rho_1)$  et conduit à un nombre de Mach complexe  $Ma_1^2 < 0$ .

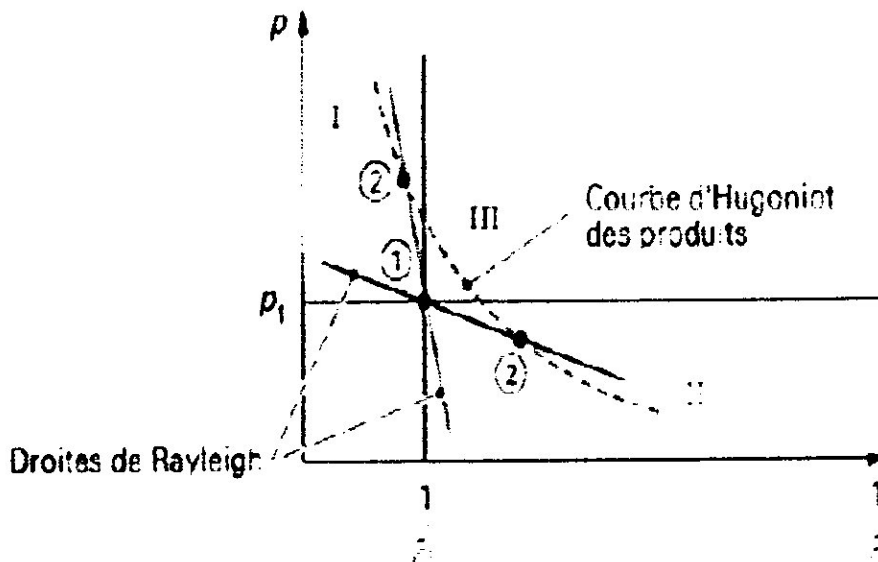


Fig. 3.4 : Hyperbole Hugoniot

### III.2.1 propagation d'une flamme laminaire

La déflagration est donc représentée, dans le diagramme de Clapeyron, par la région II de courbe Hugoniot des produits (figure 3.5) :

$$\begin{aligned} \rho_2 &= \rho_1 \\ (1/\rho_2) &> (1/\rho_1) \\ \left( U_2 = \frac{\dot{m}}{\rho_2} \right) &> \left( U_1 = \frac{\dot{m}}{\rho_1} \right) \end{aligned}$$

La solution étant donnée par l'intersection de courbe d'Hugoniot des produits avec la droite de Rayleigh de pente  $-\dot{m}^2$ , on voit que les solutions  $M_2'$  et  $M_2''$  sont théoriquement possibles jusqu'à un débit limite conduisant au point  $M_1$ , où la droite de Rayleigh est tangente à celle d'Hugoniot des produits (point de Chapman Jouguet).

On montre que ce régime limite correspond à une vitesse finale exactement sonique et que, dans le cas général,  $M_2'$  correspond à un écoulement subsonique et  $M_2''$  à un écoulement supersonique. Partant d'un état initial  $M_1$ , l'état subsonique  $M_2'$  est possible. En revanche, l'état  $M_2''$  est impossible :  $M_2'$  et  $M_2''$  sont bien compatible entre eux par l'intermédiaire d'un choc droit, mais le passage de  $M_2'$  subsonique à  $M_2''$  supersonique est interdit par le théorème de Carnot. On démontre aussi (phénomène du blocage thermique) qu'il est impossible, à section constante, d'apporter à un écoulement subsonique une quantité de chaleur supérieure à celle qui l'accélère, par suite de variation de masse volumique, jusqu'à la valeur limite  $Ma = 1$ . En effet, si on tente d'apporter une énergie supplémentaire, la courbe d'Hugoniot se déplace et ne permet plus de solution (plus d'intersection avec la droite de Rayleigh). Sous l'effet de l'excès de chaleur, l'écoulement va se trouver bloqué vers l'aval et un train d'ondes de compression qui va se former et remonter vers l'amont pour changer les conditions initiales. Le raisonnement précédent montre que, pour une enthalpie de réaction donnée, la solution subsonique de l'onde de combustion est située sur la courbe d'Hugoniot (dans la zone II) mais ne permet pas d'obtenir une valeur unique de la vitesse de déflagration. Il faut pour cela utiliser une équation supplémentaire, qui peut être obtenue à partir de l'étude de la structure de l'onde de combustion et de l'expression du taux de production d'énergie par la réaction [2].

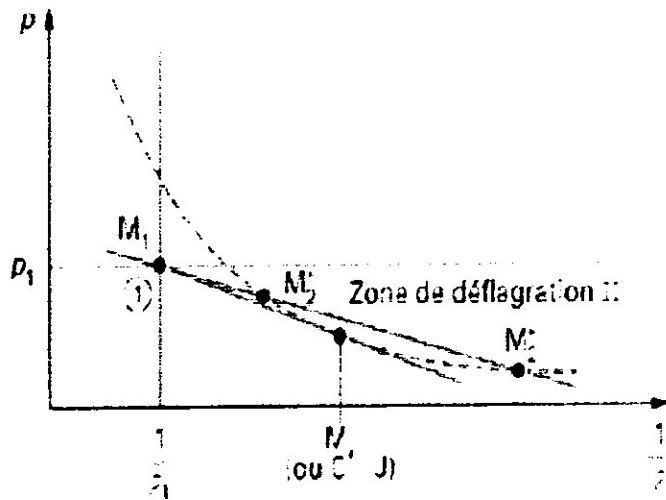


Fig. 3.5 : zone de déflagration

### III.3 Théories de flamme de prémélange laminaire [2]

Historiquement, les approches théoriques pour le calcul de la vitesse de la flamme laminaire sont de deux ordres :

- théorie thermique : liée aux phénomènes de transport.
- théorie diffusionnelles : fondées sur la diffusion d'atomes et radicaux libres.

#### III.3.1 Théorie thermique

De nombreux modèles ont été élaborés dans cette théorie, cependant nous limiterons notre étude aux trois modèles les plus importants.

- le premier modèle de Mallard et Le Chatelier (1885), qui est un modèle ancien repose sur des hypothèses simplificatrices.
- le second modèle dit de Zeldovitch, Franck-Kameneskii et Semenov (1938) qui est une extension de premier modèle.
- Le troisième modèle est une amélioration du modèle précédent.

##### III.3.1.1 Théorie de Mallard et Le Chatelier

Elle suppose que la propagation de la flamme est contrôlée par la propagation de la chaleur à travers le gaz. Mallard et Le Chatelier (1885) ont fait l'hypothèse que la zone de la flamme se compose de deux zones séparées par le point où se produit l'inflammation, la température d'inflammation étant malheureusement inconnue (fig.3.6).

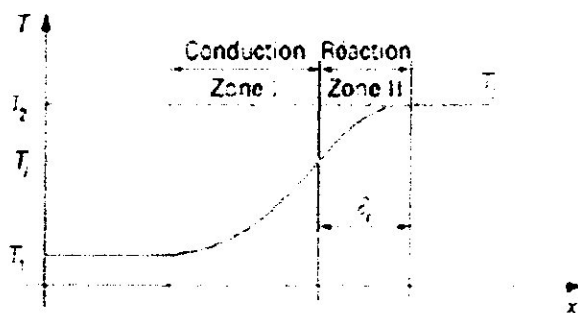


Fig. 3.6 : propagation de la chaleur suivant la théorie de Mallard et Le Chatelier

$T_i$  : température d'inflammation

En faisant l'hypothèse d'une évolution de température linéaire en zone II :

$$\frac{dT}{dx} = \frac{T_2 - T_i}{\delta_r}$$

L'équation de conservation de l'énergie en régime permanent, dans la zone I, devient alors :

$$\dot{m}c_p(T_i - T_1) = \lambda \frac{T_2 - T_i}{\delta_r}$$

Dans le cas envisagé, la vitesse de déplacement de l'onde par rapport aux gaz est égale à la vitesse de flamme laminaire  $S_f$  cherchée et, avec  $\dot{m} = \rho_1 S_f$ , on obtient :

$$\begin{aligned} \dot{m} &= \rho_1 S_f \\ \rho_1 S_f c_p (T_i - T_1) &= \lambda \frac{T_2 - T_i}{\delta_r} \\ S_f &= \frac{\lambda (T_2 - T_i)}{\rho_1 c_p (T_i - T_1) \delta_r} \end{aligned} \quad \text{(III.15)}$$

Avec

$\lambda$  : Conductivité thermique

$S_f$  : vitesse de propagation de la flamme

$\rho_1$  : masse volumique du mélange frais

Sous cette forme, l'équation (III.15) contient la température d'inflammation et l'épaisseur de réaction qui sont inconnues. Cette température d'inflammation n'est en aucune façon liée à la température d'inflammation spontanée. En effet, le temps d'induction est ici beaucoup plus court que dans le cas d'inflammation spontanée et les centres actifs de réaction ne sont pas produits à l'intérieur des gaz frais mais proviennent des gaz brûlés ou de la zone de réaction vive par diffusion de matière.

L'onde se déplaçant à la vitesse  $S_f$ , on a :

$$\delta_r = S_f \tau_c \quad \text{(III.16)}$$

$\tau_c$  : temps chimique nécessaire à la réaction, est inversement proportionnel au taux de réaction moyen.

$\bar{W}$  : caractérise la vitesse moyenne de la réaction chimique

$$\bar{W} = \frac{1}{T_2 - T_1} \int_{T_1}^{T_2} \dot{W} dT \quad (III.17)$$

$$\tau_c \propto \frac{1}{\bar{W}}$$

$$S_f \propto \frac{\lambda}{\rho c_p} \frac{T_2 - T_1}{T_1} \frac{\bar{W}}{S_f}$$

Et enfin :

$$S_f \propto \left( \frac{\lambda}{\rho c_p} \bar{W} \right)^{1/2} \text{ ou } S_f \propto (D_T \bar{W})^{1/2} \quad (III.18)$$

$D_T$  : diffusivité thermique.

Ce modèle, en l'absence de connaissance de la température d'inflammation, ne permet pas d'obtenir de valeur théorique acceptable pour la vitesse de propagation de la flamme. Cependant, ce raisonnement très simple conduit aux deux caractéristiques essentielles de la vitesse de propagation d'une onde laminaire : celle-ci est proportionnelle à la racine carrée de diffusivité thermique et à la vitesse de réaction. La diffusion (ici de chaleur) a pour conséquence la propagation de la flamme.

### III.3.1.2 Théorie de Zeldovitch, Franck-Kameneskii et Semenov (1938)

C'est une extension de modèle ancien de Mallard et Le Chatelier. Les équations de base comportent les diffusions de chaleur et de matière, cette dernière étant considérée en tant que vecteur d'énergie, mais non facteur d'activation des réactions chimiques. La température d'inflammation intervient encore, mais comme simple condition aux limites des deux parties du problème (fig.3.7).

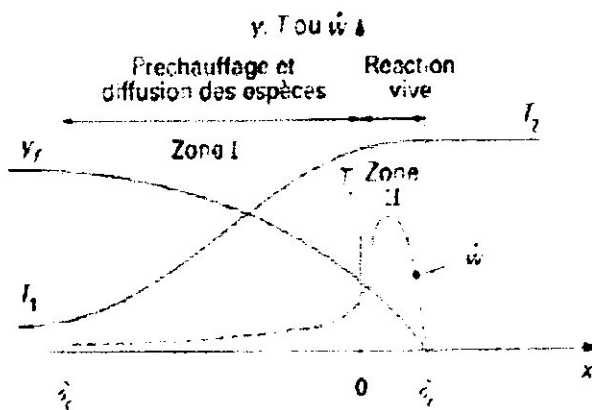


Fig. 3.7 - structure de front de flamme

### III.3.1.2.1 Hypothèses simplificatrices

- 1- pression constante.
- 2- On considère un gaz au repos ou les caractéristiques thermique ( $\lambda, c_p, \rho D_{ij}$ ) sont constants quelles que soient la température et la composition du mélange on peut prendre des valeurs moyennes de ces caractéristiques ( $\lambda, c_p, \rho D_{ij}$ ) entre les deux températures limites  $T_1$  et  $T_2$
- 3- Le nombre de Lewis  $Le = 1$ , soit  $D_T = \frac{\lambda}{\rho c_p} = D_{ij}$ ;  $Le = \frac{D_T}{D_{ij}}$  : qui compare le transport de masse par diffusion au transport thermique.
- 4- le nombre total de moles du mélange ne change pas avec la combustion.
- 5- on considère, suivant le modèle de la réaction simple, une réaction d'ordre globale  $n$ , d'enthalpie massique  $\nabla h^0 = h_1^0 - h_2^0$ , et dont le taux de réaction suit une loi d'Arrhenius :

$$\dot{W} = A(T) P^i Y_0^{i-j} Y_F^j \exp\left(-\frac{Ea}{RT}\right) \quad (\text{III.19})$$

Avec

$A(T)$  : facteur pré exponentiel de la loi d'Arrhenius.

$Ea$  : énergie d'activation.

$Y_F$  : fraction massique du combustible.

$Y_O$  : fraction massique de l'oxygène.

$i$  : ordre globale de la réaction

$j$  : ordre partiel de la réaction..

### III.3.1.2.2 Equation de bilan

**Bilan des espèces :**

La composition est caractérisée par la fraction massique du combustible :

$$U \frac{\partial Y_F}{\partial X} - D_{ij} \frac{\partial^2 Y_F}{\partial X^2} = -\frac{\dot{W}}{\rho} (Y_0, Y_F, X) \quad (\text{III.20})$$

Convection    Diffusion    Réaction chimique

**Bilan d'énergie :**

$$U \frac{\partial T}{\partial X} - D_T \frac{\partial^2 T}{\partial X^2} = + \frac{\Delta h^0}{c_p} \frac{\dot{W}}{\rho} (Y_0, Y_F, T, X) \quad (\text{III.21})$$

Convection    Diffusion    Réaction chimique

### III.3.1.2.3 Déterminations de la vitesse de flamme

Puisque  $Le=1$  ( $D_{ij}=D_T$ ), on constate que l'on a une relation linéaire entre la température et la fraction massique du combustible :

$$T - T_1 = \frac{\Delta h^0}{c_p} (Y_{F_1} - Y_F)$$

Avec :

$$\text{à } t=0, T=T_1, Y_{F_1} = Y_F$$

En fin de combustion :

$$Y_F = 0, T = T_1 + \frac{\Delta h^0}{c_p} Y_{F_1} = T_2$$

Le problème se résout par rapport à une seule variable la température ou la fraction massique :

$$\frac{Y_F}{Y_{F_1}} = \frac{T_2 - T}{T_2 - T_1}$$

En prenant l'équation de l'énergie, la solution du problème s'obtient par :

$$\frac{\partial T}{\partial t} - \frac{\lambda}{\rho c_p} \frac{\partial^2 T}{\partial X^2} = + \frac{\Delta h^0 \dot{W}}{c_p \rho} \quad (\text{III.22})$$

Avec :

$$U \frac{\partial T}{\partial X} = \frac{\partial T}{\partial t},$$

La distribution en deux zones permet alors se simplifier encore l'équation d'énergie.

En zone I, il n'y a pas de réaction chimique.

Donc le terme de taux de réaction, est négligeable L'équation devient :

$$\left. \begin{array}{l} \dot{W} = 0 \\ \frac{\partial T}{\partial t} - \frac{\lambda}{\rho c_p} \frac{\partial^2 T}{\partial X^2} = 0 \end{array} \right\} \quad (\text{III.23})$$

$$\text{Comme alors : } \frac{\partial X}{\partial t} = U$$

$$U \frac{\partial T}{\partial X} - \frac{\lambda}{\rho c_p} \frac{\partial^2 T}{\partial X^2} = 0$$

Et, avec  $\rho U = \dot{m}$

$$\frac{\partial^2 T}{\partial X^2} - \frac{\dot{m} c_p}{\lambda} \frac{\partial T}{\partial X} = 0 \quad (\text{III.24})$$

Avec comme condition aux limites :

$$X = -\infty, T = T_1, \frac{\partial T}{\partial X} = 0$$

$$X = 0, T = T_2$$

On obtient en intégrant :

$$\frac{\partial T}{\partial X} = \frac{\dot{m}c_p}{\lambda} (T_i - T_1) \quad (\text{III.25})$$

$$\ln \frac{T - T_1}{T_i - T_1} = \frac{\dot{m}c_p}{\lambda} X$$

$$\frac{T - T_1}{T_i - T_1} = \exp\left(\frac{\dot{m}c_p}{\lambda} X\right) \quad (\text{III.26})$$

En zone II, la réaction chimique étant de type Arrhenius, le terme de taux de réaction ne devient important que lorsque la température est suffisamment élevée, c'est-à-dire que la température d'inflammation, est proche de température finale.

Dans ces conditions, en zone II, le gradient de température est faible et le terme de convection peut être négligé, (III.21) devient alors :

$$\frac{\lambda}{\rho c_p} \frac{\partial^2 T}{\partial X^2} = + \frac{\Delta h^0 \dot{W}}{\rho}$$

$$\lambda \frac{\partial^2 T}{\partial X^2} = -\Delta h^0 \dot{W} \quad (\text{III.27})$$

Avec :

$$X=0, T=T_1$$

$$X = \delta_r, T=T_2.$$

$\delta_r$  : Épaisseur de la zone de réaction vive.

Pour intégrer (III.27), multiplions-la par le gradient de température :

$$\lambda \frac{\partial^2 T}{\partial X^2} \frac{\partial T}{\partial X} = -\Delta h^0 \dot{W} \frac{\partial T}{\partial X}$$

$$\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial X} \left[ \left( \frac{\partial T}{\partial X} \right)^2 \right] = -\frac{\Delta h^0}{\lambda} \dot{W} \frac{\partial T}{\partial X}$$

$$\left[ \left( \frac{\partial T}{\partial X} \right)^2 \right]_0^{\delta_r} = -\frac{2\Delta h^0}{\lambda} \int_{T_1}^{T_2} \dot{W} dT$$

Pour  $X = \delta_r, \frac{\partial T}{\partial X} = 0$  d'où :

$$\left( \frac{\partial T}{\partial X} \right)_{X=0}^2 = \frac{2\Delta h^0}{\lambda} \int_{T_1}^{T_2} \dot{W} dT \quad (\text{III.28})$$

A la limite entre les deux zones de préchauffage (I) et de réaction vive (II) (figure 3.5), la continuité du flux de chaleur s'écrit :



$$\left( \lambda \frac{\partial T}{\partial X} \right)_{X=0,1} = \left( \lambda \frac{\partial T}{\partial X} \right)_{X=0,2}$$

Et, d'après (III.25) :

$$\left( \lambda \frac{\partial T}{\partial X} \right)_{X=0,1} = \dot{m} c_p (T_i - T_1)$$

D'où on tire :

$$\frac{\dot{m} c_p}{\lambda} (T_i - T_1) = \left( \frac{2\Delta h^0}{\lambda} \int_{T_1}^{T_2} \dot{W} dT \right)^{1/2}$$

Comme  $\dot{m} = \rho_1 S_f$

$$S_f = \frac{\lambda}{\rho_1 c_p (T_i - T_1)} \left( \frac{2\Delta h^0}{\lambda} \int_{T_1}^{T_2} \dot{W} dT \right)^{1/2} \quad (\text{III.29})$$

La réaction chimique suivant une loi d'Arrhenius, la plus grande partie de la réaction vive a lieu au voisinage de la température finale et on peut écrire :

$$(T_i - T_1) \approx (T_2 - T_1)$$

$$\int_{T_1}^{T_2} \dot{W} dT \approx \int_{T_1}^{T_2} \dot{W} dT$$

En conséquence, on peut écrire :

$$S_f = \left( \frac{2\lambda\Delta h^0 \bar{W}}{\rho_1^2 c_p^2 (T_2 - T_1)} \right)^{1/2} \quad (\text{III.30})$$

C'est la formule de Zelodovitch, dans laquelle le taux massique de réaction moyen est :

$$\bar{W} = \frac{1}{T_2 - T_1} \int_{T_1}^{T_2} \dot{W} dT$$

L'expression (III.30) montre que La vitesse de la flamme dépend donc de la température finale de combustion et l'augmentation de la température initiale n'a d'influence qu'à travers l'augmentation correspondante de la température de combustion. La différence essentielle avec la théorie de Mallard et Le Chatelier est que, le taux de réaction étant fonction de la température de flamme, il en est de même pour la vitesse de flamme.

### III.3.1.3 Théorie de Zeldevitch amélioré

La différence avec le modèle précédent est, qu'il estime une variation linéaire de température dans le front de flamme et qui égalise l'épaisseur des deux zones, de préchauffage et de réaction vive, comme l'indique la figure ci-dessous.

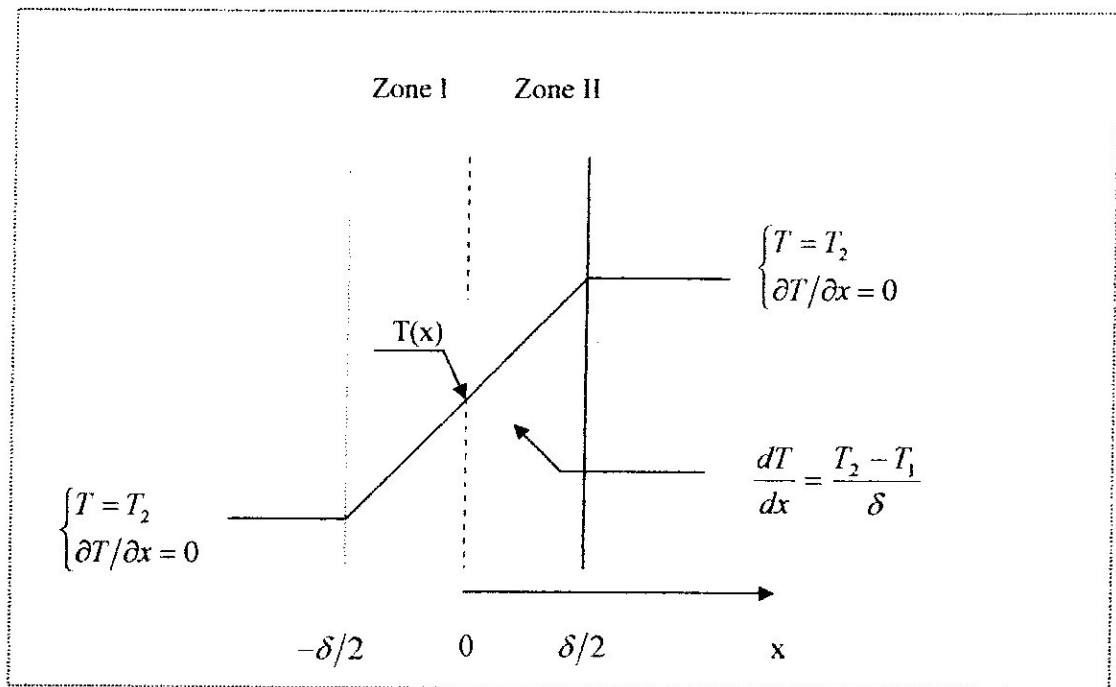


Fig.3.8 structure de front de flamme

Ces deux estimations permettent de trouver la température d'inflammation qui a été l'inconnue dans les deux modèles précédents [8].

### III.3.2 Théorie diffusionnelle

Elle est en particulier due à Tanford et Peace (1947), qui ont supposée que, pour certaine réaction en flamme laminaire, la vitesse de la flamme est liée au taux de diffusion de radicaux actifs dans les gaz frais. Pour donner une description élémentaire de ce type de théorie, nous allons supposer que le seul facteur influençant la flamme laminaire est l'effet de diffusion vers les gaz frais des radicaux libres présents dans le front de flamme est caractérisé par une concentration moyenne  $X_R$  en radicaux libres et une température moyenne  $T_m$  homogène (figure 3.9).

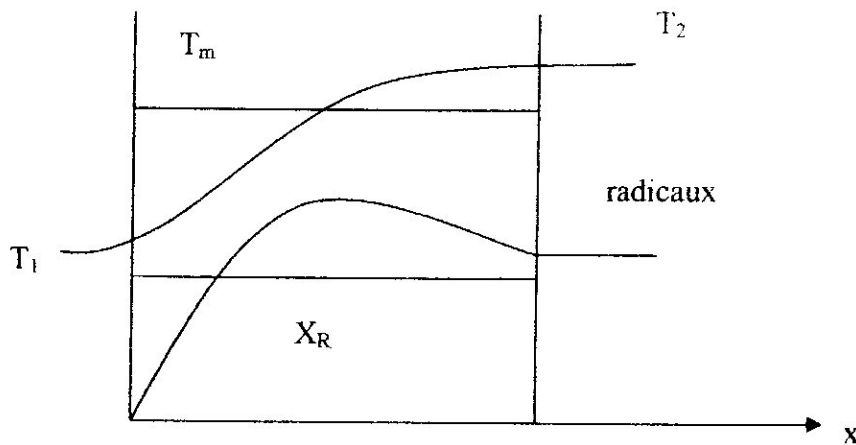


Fig. 3.9. Propagation de la flamme suivant la théorie diffusionnelle

La réaction de combustion en chaîne comporte essentiellement des réactions de ramification de la chaîne (qui augmente ce nombre par recombinaison libres) et de repture (qui diminuent ce nombre par recombinaison). Dans une flamme stabilisée, la vitesse de propagation reste constante et par conséquent, la concentration des radicaux libres dans le front de flamme le reste aussi ; un radical, qui diffuse à travers la flamme vers les gaz frais, doit donc avoir donné naissance, par le bilan des réactions de ramification et de repture, à un et un seule autre radical (condition de stationnarité de la flamme). Dans la zone de flamme d'épaisseur de réaction le nombre total de ramifications ou de ruptures est égal à la probabilité de ramification  $Q_{ram}$  ou rupture  $Q_{rup}$  par collision multipliée par le nombre de collisions  $Z_\delta$  sur la trajectoire d'épaisseur  $\delta$  . On doit donc avoir :

$$Z_\delta (Q_{ram} - Q_{rup}) = 1$$

$Z$  : étant le nombre de collision par seconde.

$Z = \frac{a}{\ell}$  (Vitesse moyenne d'agitation des molécules)/ (Libre parcours moyen des molécules)

On doit avoir :  $Z_\delta = Z \cdot \tau_\delta$

La théorie cinétique des gaz permet d'écrire, si  $X$  est le déplacement d'une molécule par diffusion pendant le temps :

$$\frac{1}{2} \frac{d(X^2)}{dt} = D_y$$

Soit ici :

$$\tau_\delta = \frac{\delta^2}{2D_{ij}}$$

On a donc :

$$Z \frac{\delta^2}{2D_{ij}} (Q_{ram} - Q_{rup}) = 1$$

On peut introduire les vitesses de ramification et de rupture :

$$V_{ram} = Z Q_{ram} X_{gr}$$

$$V_{rup} = Z Q_{rup} X_{gr}$$

D'où la relation de stationnaire :

$$\frac{\delta^2}{2D_{ij}} \left( \frac{V_{ram} - V_{rup}}{X_{gr}} \right) = 1$$

La vitesse de propagation étant par hypothèse contrôlée par la vitesse de diffusion, on doit avoir :

$$\tau_\delta = \frac{\delta^2}{2D_{ij}} = \frac{\delta}{S_j}$$

D'où :

$$\delta = \frac{2D_{ij}}{S_l}$$

L'équation stationnaire s'écrit alors :

$$\frac{2D_{ij}}{S_l^2} \left( \frac{V_{ram} - V_{rup}}{X_R} \right) = 1$$

$$S_l = \left( \frac{2D_{ij} (V_{ram} - V_{rup})}{X_R} \right)^{1/2}$$

$V_{ram}$  : vitesse de ramification

$V_{rup}$  : vitesse de rupture

$X_R$  : concentration des radicaux libres

Cette relation montre que la vitesse fondamentale ne dépend directement que des propriétés du mélange combustible et non de la géométrie ou des conditions d'écoulement, mais comme elle contient des grandeurs dont les valeurs numériques ne sont pas connues son éventuelle vérification ne peut être que qualitative [2].

### III.4 Approches récentes

Il existe actuellement plusieurs approches qui sont basées sur le modèle de Zeldovitch et Franck-Kameneskii, parmi se trouve l'approche de l'analyse de la structure des flammes de prémélange. L'analyse de la structure des flammes de prémélange est une amélioration du modèle de Zeldovitch, grâce à l'utilisation des méthodes de développement asymptotiques, l'essentiel des résultats obtenus par ces méthodes est présenté dans les ouvrages de Williams (1985) et Buckmaster et Ludford (1982).

La méthode des développements asymptotiques raccordés (LIMAN et CLAVIN 1983) permet d'exprimer mathématiquement dans le cas des grandes énergies d'activation, l'existence de deux zones, l'une de convection-diffusion, l'autre de réaction-diffusion, et de déterminer la vitesse fondamentale de la flamme en raccordant les limites des solutions obtenues pour chacune des deux zones.

Le principe en est le suivant si le taux de production chimique s'exprime par une loi d'Arrhenius, on peut exprimer la variation de température au voisinage des gaz brûlés par :

$$\Delta T = \frac{W_2}{\left( \frac{dW_2}{dT} \right)} = \frac{RT_2^2}{Ea}$$

Clavin (1985) a trouvé une formulation montrant l'influence du nombre de Lewis. On trouvera également une synthèse sur la théorie des flammes laminares chez Dixon-Lewis (1990).

Le rapport  $\frac{\Delta T}{T_2 - T_1}$  est aussi le rapport de l'épaisseur réaction de la zone interne de réaction-diffusion à l'épaisseur  $\delta_c$  de la zone externe de convection-diffusion. Il s'écrit :

$$\frac{\Delta T}{T_2 - T_1} = \frac{\delta_r}{\delta_c} = \frac{RT_2^2}{Ea(T_2 - T_1)} = \beta^{-1}$$

$\beta$  : le nombre de Zeldovitch définit l'importance relative des deux paramètres :

- énergie d'activation est proportionnelle à  $\frac{RT^2}{Ea}$
- introduction de chaleur est proportionnelle à  $\frac{T_2 - T_1}{T_2}$

Une grande valeur de nombre de Zeldovitch correspond à une zone de réaction mince. Dans la pratique, pour la combustion d'hydrocarbures, ce nombre est de l'ordre de dix. Il est donc légitime d'appliquer à ces flammes les conclusions que l'on peut tirer de l'analyse asymptotique pour  $\beta \rightarrow \infty$ .

Mathématiquement, on définit  $1/\beta$  comme un petit paramètre et on cherche des développements asymptotiques des solutions en température et concentration dans chacune des deux zones.

Si on définit est une température réduite .

$$\theta = \frac{T - T_1}{T_2 - T_1}$$

On peut écrire :

- dans la zone externe (convection diffusion) :  $1 - \theta \approx 1$
- dans la zone interne (réaction diffusion) :  $1 - \theta \approx 1/\beta$
- enfin, dans la zone aval de la flamme :  $\theta = 1$ .

On obtient la vitesse fondamentale de flamme par raccordement des solutions interne et externe de température réduite en écrivant que la limite externe de la solution interne est égale à la limite interne de la solution externe pour  $\beta \rightarrow +\infty$  [2].

### III.5 Autres approches

Les moyens modernes de calcul numérique et la connaissance de mécanismes détaillés de réactions chimiques de combustion (Warnatz 1984) permettent aujourd'hui la description complète de la physique des flammes laminaire de premelange et prennent en compte plusieurs centaines d'espèces et de réactions chimique. Cependant, la complexité du problème est telle que la non adiabaticite des flammes réelles, ou les pertes radiatives peuvent être très importantes [2].

*Chapitre IV :*  
*Flamme de diffusion*  
*laminaire*

### IV.1 Généralités :

Dans de nombreux systèmes pratiques, combustible et comburant sont injectés séparément dans la zone de réaction, sans prémélange initial. La combustion est alors contrôlée non seulement par la réaction chimique mais aussi par le transport diffusif des réactifs l'un vers l'autre, d'où le nom de flamme de diffusion.

Si les flammes de diffusion laminaires semblent n'intervenir que dans quelques applications plutôt anecdotiques (bougie, flamme de briquet,...), nous allons montrer que la compréhension de la structure de ces flammes est fondamentale pour la description et la modélisation de nombreuses situations industrielles [2].

#### IV.1.1 Situations génériques

Deux situations génériques idéales ont été identifiées, selon la procédure utilisée pour introduire les réactifs dans la zone de flamme — flammes prémélangées: les réactifs sont mélangés avant la zone de réaction — flammes non prémélangées ou flammes de diffusion où les réactifs sont introduits séparément dans la zone de réaction, de part et d'autre de la flamme. Ils sont alors essentiellement localement entraînés dans la zone de réaction par diffusion moléculaire.

Ces deux situations sont schématisées sur la figure ci-dessous.

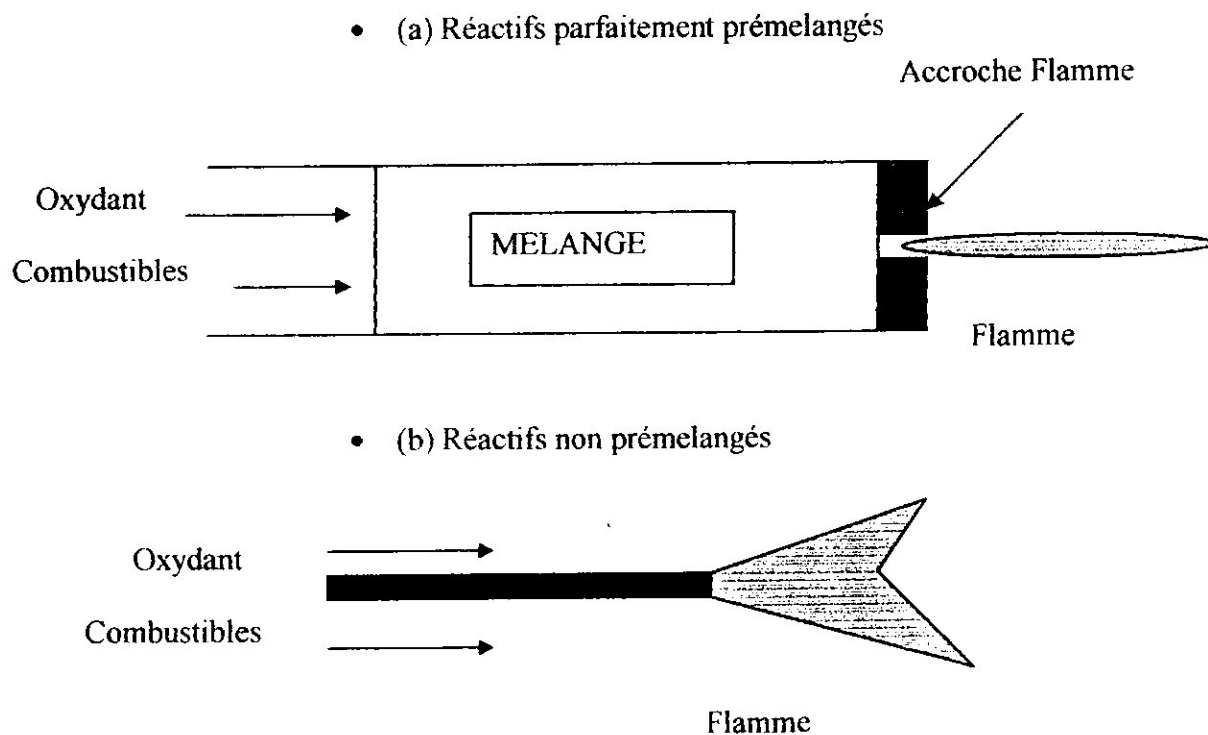


Fig.4.1 la flamme prémélangée et flamme de diffusion

### IV.1.2 Intérêt des flammes de diffusion laminaire

Le prototype de ces flammes, schématisé sur la figure (4.2), est obtenu par injection d'un combustible gazeux dans une atmosphère oxydante au repos. C'est, par exemple, la géométrie d'une flamme de bec Bunsen quand la virole est fermée (pas de prémélange d'air à la base du brûleur), d'une flamme de briquet ou encore d'une veilleuse de chauffe-eau. Si cette configuration est moins performante, en terme de dégagement d'énergie, puisque la réaction est principalement limitée, pour les combustibles les plus courants, par le transport des réactifs l'un vers l'autre, la flamme de diffusion offre, comme nous l'avons déjà vu, deux avantages indéniables : la simplicité et la sécurité [2].

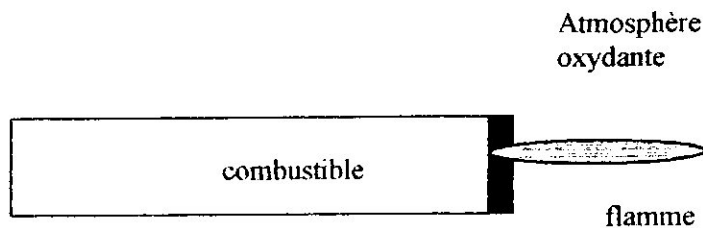


Fig. 4.2 géométrie d'une flamme de diffusion laminaire obtenue par injection d'un jet de combustible dans une atmosphère oxydante au repos.

Outre les quelques situations génériques simples, les flammes de diffusion laminaires sont également invoquées pour décrire les combustions liquide/gaz ou solide/Gaz.

Exemples :

Combustible liquide dans une atmosphère oxydante (figure 4.3).

Dans la plupart des applications pratiques, on considère que le liquide est vaporisé avant la zone de flamme qui sépare alors vapeur de combustible et oxydant.

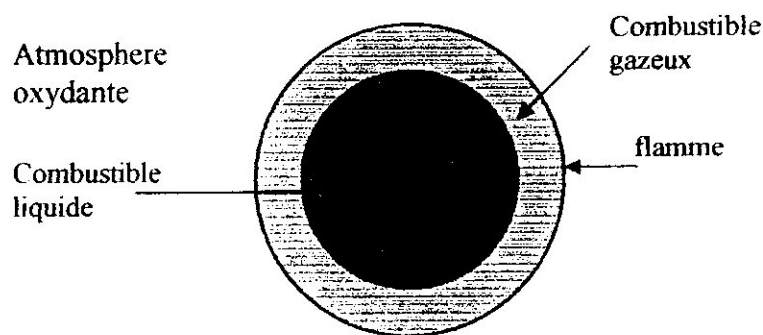


Fig.4.3 combustion d'une goutte de combustible dans une atmosphère oxydante



### IV.1.3 Analyse qualitative de la structure d'une flamme de diffusion laminaire

Avant d'entreprendre une analyse plus précise et quantitative, de la structure d'une flamme de diffusion, analysons qualitativement la flamme-jet schématisée sur la figure (4.2). Une coupe transversale de la flamme (figure 4.4) permet de constater que les réactifs combustible et comburant froids, sont bien séparés par la zone de réaction. Les profils de fraction massique de combustible, d'oxydant et de température ont l'allure représentée schématiquement sur la figure (4.4). Les réactifs sont essentiellement entraînés l'un vers l'autre par diffusion moléculaire, justifiant ainsi l'appellation de flamme de diffusion. Ce transfert de masse limite d'ailleurs le plus souvent la vitesse de réaction, ce qui explique que les flammes de diffusion sont généralement moins performantes que les flammes prémélangées.

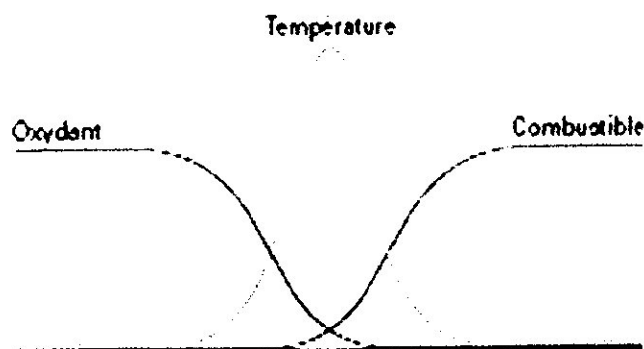


Fig.4.4 structure de la zone de réaction d'une flamme jet

### IV.2 calcul simplifié d'une flamme de diffusion laminaire

Il est possible de déterminer complètement la structure de la flamme de diffusion. Cette analyse, initialement due à Burke et Schumann (1928), permet également d'introduire les notions habituellement utilisées pour décrire ce type de flamme.

Il s'agit de l'étude d'un jet plan bidimensionnel de combustible, concourant avec un jet infini d'oxydant (figure 4.5). Les deux jets sont supposés avoir le même débit unitaire initial.

$$\rho_F U_F = \rho_O U_O$$

$\rho_F$  : masse volumique de combustible

$\rho_O$  : masse volumique de l'oxydant

$U_F$  : vitesse de combustible

$U_O$  : vitesse de l'oxydant

Cette configuration idéale n'est pas réaliste puisqu'elle suppose implicitement un débit infini d'oxydant.

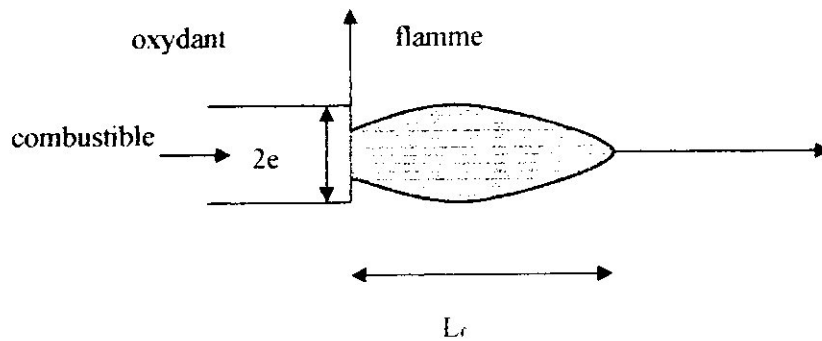


Fig.4.5 Géométrie de la flamme de Burke et Schumann

### IV.2.1 Équations de base [2]

Considérons une réaction chimique à une étape entre combustible et oxydant :



$\nu$  : désigne le coefficient stoechiométrique massique de la réaction

#### IV.2.1.1 Équations de transport des réactifs de combustion :

$$\frac{\partial \rho Y_F}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho U Y_F) = \nabla \cdot (\rho D \nabla Y_F) + \dot{\omega}_F \quad (\text{IV.1})$$

$$\frac{\partial \rho Y_O}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho U Y_O) = \nabla \cdot (\rho D \nabla Y_O) + \dot{\omega}_O \quad (\text{IV.2})$$

Avec :

D : coefficient de diffusion

t : temps

U : vecteur de vitesse

$\rho$  : masse volumique

$\dot{\omega}_F$  et  $\dot{\omega}_O$  : vitesse de réaction respectivement du combustible et du comburant.

Les flux de diffusion moléculaires sont supposés suivre la loi de Fick avec la diffusivité massique

#### IV.2.1.2 Équations de transport des produits de combustion :

$$\frac{\partial \rho Y_P}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho U Y_P) = \nabla \cdot (\rho D \nabla Y_P) + \dot{\omega}_P \quad (\text{IV.3})$$

avec :

$\dot{\omega}_P$  : Vitesse de production de produits P

La stoechiométrie de la réaction et la conservation de la masse totale imposent les deux relations.

$$\begin{cases} \dot{\omega}_O = \nu \dot{\omega}_F \\ \dot{\omega}_P = -(1+\nu)\dot{\omega}_F \end{cases} \quad (\text{IV.4})$$

En supposant que tous les constituants ont, pour simplifier, la même capacité massique à pression constante et la même conductivité thermique, le milieu est adiabatique et le rayonnement de la flamme est négligé, l'équation pour la température s'écrit :

$$\frac{\partial \rho C_p T}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho U C_p T) = \nabla \cdot (\lambda \nabla T) - \Delta H^0 \dot{\omega}_F \quad (\text{IV.5})$$

$\Delta H^0$  : chaleur de réaction massique.

Ajoutant l'équation de continuité :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho U) = 0 \quad (\text{IV.6})$$

Et l'équation de quantité de mouvement :

$$\frac{\partial \rho U_j}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho U U_j) = -\frac{\partial p}{\partial x_j} + \nabla \cdot \tau \quad (j=1,3) \quad (\text{IV.7})$$

Avec :

$U_j$  : composante de la direction  $x_j$  du vecteur vitesse  $U$

$p$  : pression

$\tau$  : tenseur des forces visqueuses.

Pour simplifier le système d'équations précédent, Burke et Schumann introduisent les hypothèses suivantes :

- l'écoulement est stationnaire
- toutes les vitesses sont supposées parallèles à l'axe des jets ( $U_2 = U_3 = 0$ ).
- tous les flux de diffusion dans la direction de l'écoulement sont négligés devant les flux convectifs
- les fluides sont supposés newtoniens.

Les équations précédentes se simplifient alors pour devenir

$$\frac{\partial \rho U}{\partial x} = 0 \quad (\text{IV.8})$$

$$\frac{\partial \rho U Y_F}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial Y} \left( \rho D \frac{\partial Y_F}{\partial Y} \right) + \dot{\omega}_F \quad (IV.9)$$

$$\frac{\partial \rho U Y_O}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial Y} \left( \rho D \frac{\partial Y_O}{\partial Y} \right) + \dot{\omega}_O \quad (IV.10)$$

$$\frac{\partial \rho U Y_P}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial Y} \left( \rho D \frac{\partial Y_P}{\partial Y} \right) + \dot{\omega}_P \quad (IV.11)$$

$$\frac{\partial \rho U C_p T}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial Y} \left( \lambda \frac{\partial T}{\partial Y} \right) - \Delta H^0 \dot{\omega}_F \quad (IV.12)$$

$$\frac{\partial \rho U^2}{\partial x} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial Y} \left( \mu \frac{\partial U}{\partial Y} \right) \quad (IV.13)$$

Avec :

$\mu$  : viscosité dynamique du fluide.

Nous supposons les nombres de Schmidt des espèces égaux à l'unité, c'est-à-dire que les viscosités dynamique et moléculaire sont identiques.

L'équation (IV.8) conduit compte tenu de l'hypothèse que les jets ont le même débit unitaire initial  $\rho u$ , à la solution immédiate.

$$\rho U = \rho_F U_F = \rho_O U_O = cte \quad (IV.14)$$

L'équation de quantité de mouvement devient alors inutile car la pression est sensiblement constante dans un tel écoulement. Il nous reste donc maintenant à déterminer  $Y_F$ ,  $Y_O$ ,  $Y_P$ , et  $T$ . Pour cela, une nouvelle variable, dont vont dépendre ces quatre grandeurs, est introduite.

#### IV.2.2 Scalaire passif [2]

Soit la variable  $Z_F$  définie par :

$$Z_F = Y_F - \frac{Y_O}{\nu} \quad (IV.15)$$

La combinaison linéaire [(IV.1)-(IV.2)/ $\nu$ ] des équations de transport des fractions massiques et  $Y_O$  permet d'établir facilement une équation de transport pour  $Z_F$ .

$$\frac{\partial \rho Z_F}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho U Z_F) = \nabla \cdot (\rho D \nabla Z_F) + \left( \dot{\omega}_F - \frac{\dot{\omega}_O}{\nu} \right) \quad (IV.16)$$

Par définition de la réaction chimique et du coefficient stœchiométrique massique

$\nu$ , le terme source de cette équation est nul (équation (IV.4)). En effet, il faut  $\nu$  kg d'oxydant pour brûler 1 kg de combustible.

La grandeur  $Z_F$  suit donc une équation de convection/diffusion sans terme source. C'est pourquoi  $Z_F$  est alors appelé scalaire passif (c'est un scalaire qui n'est pas modifié par la réaction chimique). Il est aussi connu sous le nom de variable de Schwab-Zeldovitch.

**Remarquons :**

— dans l'écoulement de combustible :  $Z_F = Y_F$

$Y_F$  : désigne la fraction massique de combustible dans cet écoulement.

cette fraction massique peut être différente de l'unité si le combustible est dilué.

— dans l'écoulement d'oxydant  $Z_F$  est négatif et vaut  $Z_F = -Y_O / \nu$

$Y_O$  : désigne la fraction massique d'oxydant dans cet écoulement

cette fraction massique est inférieure à l'unité quand l'oxydant est dilué ainsi la fraction massique d'oxygène dans un écoulement d'air (donc dilué dans l'azote)

— si la réaction chimique est supposée infiniment rapide, c'est-à-dire si le combustible et l'oxydant ne peuvent coexister sans être immédiatement transformés en produits, la zone de réaction vérifie :

$$Y_F = Y_O = 0 \Rightarrow Z_F = 0$$

par conséquent la zone de réaction correspond à l'isovaleur  $Z_F = 0$ .

Nous avons donc défini un scalaire passif  $Z_F$  qui vérifie l'équation de convection/diffusion.

$$\frac{\partial \rho Z_F}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho U Z_F) = \nabla \cdot (\rho D \nabla Z_F) \quad (\text{IV.17})$$

où la combustion n'intervient pas directement et dont la valeur  $Z_F = 0$  correspond à la zone de réaction. La description d'une flamme de diffusion laminaire revient finalement à décrire un problème de mélange.

Ce scalaire passif n'est pas unique et il est possible d'en définir d'autres par combinaison linéaire des équations de conservation des espèces et de la température.

Ainsi :

- $Z_F = Y_F + Y_p/(1+\nu)$  est un scalaire passif qui relie les fractions massiques  $Y_F$  de combustible et  $Y_p$  de produits de réaction de même,  $Y_O/\nu + Y_p/(1+\nu)$  est aussi un scalaire passif reliant  $Y_O$  et  $Y_F$ .

- sous l'hypothèse d'un nombre de Lewis unitaire (diffusivités thermique et

moléculaire identiques :  $\rho D = a = \lambda / \rho C_p$  ) est un scalaire passif qui relie la fraction massique de combustible  $Y_F$  à la température  $T$ .

### IV.2.3 Chimie infiniment rapide [2]

L'hypothèse de chimie infiniment rapide :

Soit le combustible  $F$  et l'oxydant  $O$  ne peuvent coexister. Cette hypothèse permet de simplifier considérablement le problème.

Nous avons remarqué que la flamme correspond à la valeur  $Z_F = 0$ , mais il est aussi possible de déterminer complètement la structure du front.

Du cote de combustible ( $Z_F \geq 0$ )  $Y_O = 0$

$$Y_F = Z_F \quad (IV.18)$$

Du cote de l'oxydant  $Z_F \leq 0$  et  $Y_O = -\nu Z_F$

$$Y_O = -\nu Z_F \quad (IV.19)$$

Les fractions massiques du combustible et l'oxydant sont donc directement proportionnelles au scalaire passif  $Z_F$ .

Puisque  $Y_F + Y_P/(1+\nu)$  et  $Y_O/\nu + Y_P/(1+\nu)$  sont des scalaires passifs et aussi des fonctions linéaires de  $Z_F$ , donc peut déterminer la fraction massique  $Y_P$  des produits de combustion, qui est une fonction linéaire de  $Z_F$ , par morceaux sur l'intervalles  $[-Y_O^\infty/\nu, 0]$  et  $[0, Y_F^\infty]$ . On aura les équations suivantes :

$$Z_P = Y_F + \frac{Y_P}{(1+\nu)} = \alpha Z_F + \beta$$

(IV.20)

Avec les conditions aux limites suivantes :

$$Z_P = Y_F^\infty \quad \text{pour} \quad Z_F = Y_F^\infty$$

$$Z_P = 0 \quad \text{pour} \quad Z_F = -\frac{Y_O^\infty}{\nu}$$

$\alpha$  et  $\beta$  : sont des constantes

Il vient immédiatement :

$$\alpha = \frac{\phi}{\phi+1} \quad \text{et} \quad \beta = \frac{Y_F^\infty}{\phi+1} \quad (IV.21)$$

$\phi = \frac{Y_F^\infty}{Y_O^\infty}$  : est le rapport d'équivalence de la réaction chimique.

D'où :

$$Z_P = Y_F + \frac{Y_P}{(1+\nu)} = \frac{\phi}{\phi+1} Z_F + \frac{Y_F^\infty}{\phi+1} \quad (\text{IV.22})$$

- cote combustible ( $Z_F \geq 0$ ) on a :

$$Y_P = \frac{1+\nu}{\phi+1} (Y_F^\infty - Z_F) \quad (\text{IV.23})$$

- Cote oxydant ( $Z_F \leq 0$ ), on a :

$$Y_P = \frac{1+\nu}{\phi+1} [\phi Z_F + Y_F^\infty] = \frac{1+\nu}{\nu} \frac{\phi}{\phi+1} [\nu Z_F + Y_O^\infty] \quad (\text{IV.24})$$

La fraction massique maximale de produits, qui est obtenue sur la surface de flamme égal a :

$$Y_P^{\max} = \frac{1+\nu}{\phi+1} Y_F^\infty = \frac{1+\nu}{\nu} \frac{\phi}{\phi+1} Y_O^\infty \quad (\text{IV.25})$$

Le scalaire passif  $Z_T$  est égal :

$$Z_T = Y_F + \frac{CpT}{\Delta H^0} = \frac{1}{\phi+1} \left[ 1 + \frac{Cp}{Y_F^\infty \Delta H^0} (T_F - T_0) \right] (\phi Z_F + Y_F^\infty) + \frac{CpT_0}{\Delta H^0} \quad (\text{IV.26})$$

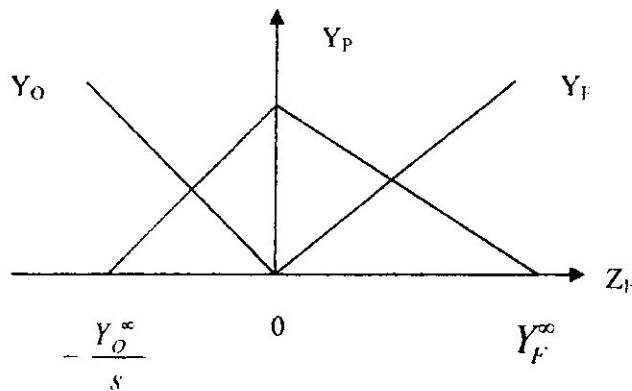


Fig.4.6 : Fractions massiques de combustible, d'oxydant et de produits de combustion en fonction du scalaire passif pour une chimie infiniment rapide

On introduit les températures respectives de combustible et l'oxydant, a priori différentes, des écoulements initiaux de combustible et d'oxydant, ce qui donne l'expression de la température en fonction du scalaire passif :

- cote combustible

$$Z_F \geq 0$$

$$T = \frac{1}{\phi+1} \frac{\Delta H^0}{Cp} \left[ Y_F^\infty - \left( 1 - \phi \frac{Cp(T_F - T_0)}{Y_F^\infty \Delta H^0} \right) Z_F \right] + T_0 + \frac{T_F - T_0}{\phi+1} \quad (\text{IV.27})$$

- cote oxydant

$$Z_F \leq 0$$

$$T = \frac{1}{\phi + 1} \frac{\Delta H^0}{Cp} \left[ 1 + \frac{Cp(T_F - T_0)}{Y_F^\infty \Delta H^0} \right] (\phi Z_F + Y_F^\infty) + T_0 \quad (IV.28)$$

La température est maximale atteinte sur la flamme quand le scalaire passif est nul ce qui résulte :

$$T = \frac{1}{\phi + 1} \frac{\Delta H^0}{Cp} Y_F^\infty + T_0 + \frac{T_F - T_0}{\phi + 1} \quad (IV.29)$$

La description de la structure d'une flamme de diffusion laminaire se réduit donc, dans le cadre d'une chimie infiniment rapide, à la description du scalaire passif. La connaissance de scalaire passif permet alors la connaissance directe des fractions massiques de combustible, l'oxydant et les produits de combustion ainsi que la température. La fin du calcul ne nécessite donc plus que la résolution de l'équation (IV.17).

#### IV.2.4 Dernière étape résolution [2]

Avec les hypothèses précédentes (2.1). Le problème de Burke et Schumann se réduit à la résolution de l'équation du scalaire passif :

$$\rho U \frac{\partial Z_F}{\partial X} = \frac{\partial}{\partial Y} \left( \rho D \frac{\partial Z_F}{\partial Y} \right) \quad (IV.30)$$

Avec :

Les conditions aux limites :

- $X = 0$  -  $Z_F = Y_F^\infty$  pour  $Y \leq e_0$  (jet de combustion)  
                   -  $Z_F = -Y_O^\infty / \nu$  pour  $Y > e_0$  (jet d'oxydant)
- $Y = 0 \rightarrow \partial Z_F / \partial Y = 0$  (condition de symétrie)
- $Y = +\infty \rightarrow Z_F = -Y_O^\infty / \nu$  (jet d'oxydant)

On suppose que :

$$\rho D = \text{Cte}$$

L'équation de scalaire passif devient :

$$\frac{\partial Z_F}{\partial X} = \alpha \frac{\partial}{\partial Y} \left( \frac{\partial Z_F}{\partial Y} \right) \quad (IV.31)$$

Avec :

$$\alpha = \frac{\rho D}{\rho U} = \frac{D_F}{U_F} = \frac{D_O}{U_O}$$

$D_F$  : coefficient de diffusion de l'écoulement de combustible

$D_O$  : coefficient de diffusion de l'écoulement de l'oxydant

En régime permanent la solution de l'équation de la chaleur (IV.31) est :



$$\frac{Z_F + Y_O^\infty / \nu}{Y_F^\infty + Y_O^\infty / \nu} = \frac{1}{\sqrt{\pi \alpha x}} \int_{-e_0}^{+e_0} \exp\left(-\frac{(Y - Y')^2}{4 \alpha x}\right) dY' \quad (IV.32)$$

Pour des valeurs de l'abscisse  $x$  grandes comparées à la demi taille  $e_0$  du jet de combustible, peut être approchée par :

$$\frac{Z_F + Y_O^\infty / \nu}{Y_F^\infty + Y_O^\infty / \nu} \approx \frac{e_0}{\sqrt{\pi \alpha x}} \exp\left(-\frac{Y^2}{4 \alpha x}\right) \quad (IV.33)$$

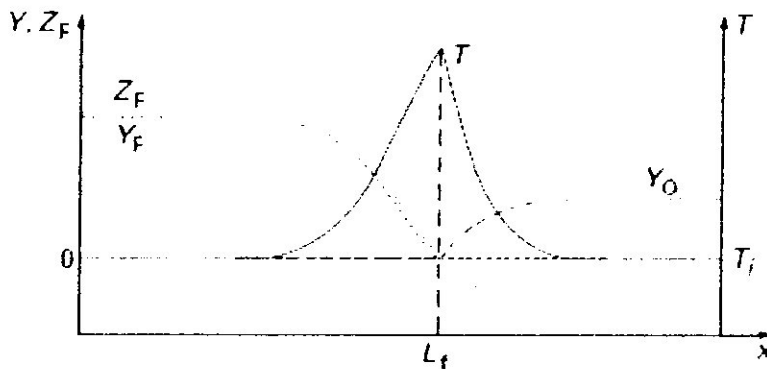


Fig. 4.7. profils sur le plan de symétrie  $Y=0$

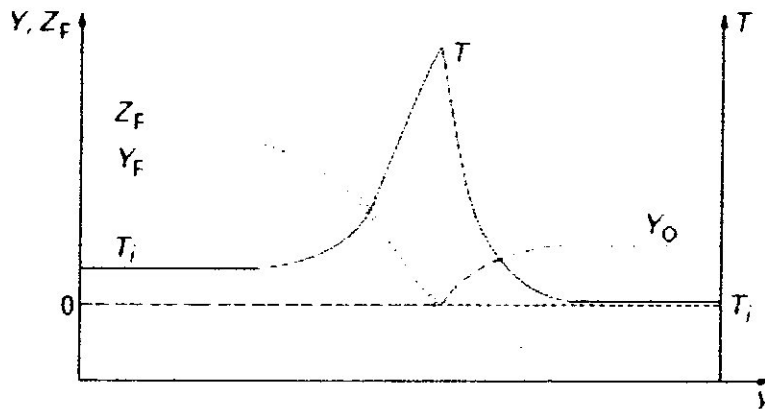


Fig. 4.8 profils transversaux  $x=Cte$

La longueur de la flamme est définie comme étant le point d'intersection de l'isovaleur  $Z_F = 0$  avec l'axe  $x$ .

$$L_f = \frac{e_0^2 U_F}{\pi D_F} (\phi + 1)^2 \quad (IV.34)$$

On suppose que les nombres de Schmidt ont égaux à l'unité, coefficient de diffusion et de viscosité cinématique sont égale.

Le nombre de Reynolds est  $Re = 2e_0 U_F^0 / D_F$

L'équation (IV.33) devient :

$$L_f = \frac{e_0 Re}{2\pi} (\phi + 1)^2 \quad (IV.35)$$

La longueur de la flamme varie donc linéairement avec la vitesse du combustible et avec le carré de la demi taille du jet et est inversement proportionnelle au coefficient de diffusion. La longueur de la flamme est aussi proportionnelle au nombre de Reynolds du jet de combustible, du moins tant que l'écoulement reste laminaire, c'est-à-dire que le nombre de Reynolds reste inférieur à un nombre de Reynolds critique. L'expérience montre que, lorsque l'écoulement devient turbulent, la longueur de flamme ne dépend plus du nombre de Reynolds.

*Chapitre V :*  
*Présentation du modèle*  
*étudié*

Le modèle choisi a pour but de trouver une expression analytique de la vitesse de propagation de la flamme ainsi que son épaisseur. Il est basé sur celui de Zeldovitch auquel une loi de la linéarité de la variation de température dans la zone de réaction a été adoptée.

### V.1 Hypothèses adoptées [8]

- 1 – Ecoulement monodimensionnel, stationnaire à section constante.
- 2 – l'énergie cinétique et potentielle, viscosité et les radiations sont négligeables.
- 3 – faible différence de pression à travers la flamme donc la pression est constante.
- 4 – la combustion se fait à pression constante.
- 5 – la diffusion thermique et massique sont gouvernées par les lois de Fourier et Ficks respectivement.
- 6 – le nombre de Lewis est constant et égal à l'unité (voir chapitre II)
- 7 – on prend les valeurs moyennes de chaleur spécifique et conductivité thermique de mélange qui sont constantes.
- 8 – la réaction chimique est une réaction globale qui se fait par une seule étape.

### V.2 les équations de conservation [8]

Pour étudier la propagation de la flamme, on applique les équations de conservation de masse, d'espèces et d'énergie sur un volume de contrôle infinitésimal illustré sur la figure ci-dessous

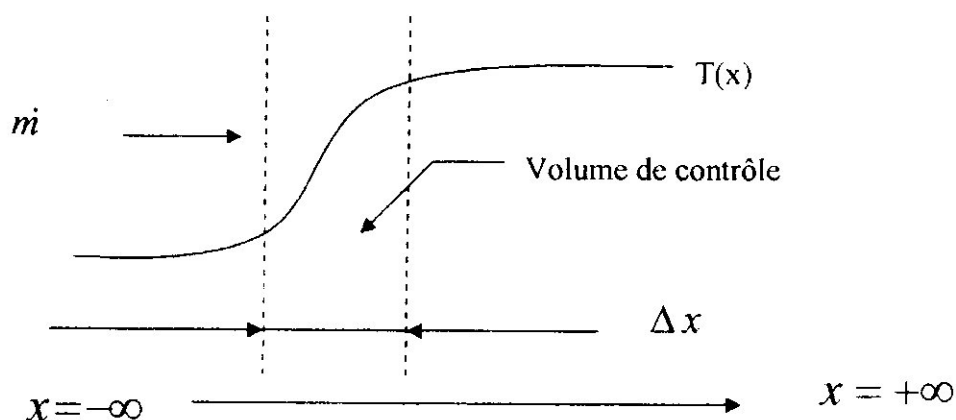


Fig.5.1 volume de contrôle

#### V.2.1 conservation de masse

$$\dot{m} = \rho U_x \tag{V.1}$$

#### V.2.2 conservation des espèces

$$\frac{d\dot{m}_i}{dx} = \bar{W}_i \tag{V.2}$$

Avec l'application de la loi de Fick cette expression devient (voir chapitre II) :

$$\Delta h_c = h_{ff}^0 + \nu h_{fox}^0 - h_{fpr}^0 (\nu + 1)$$

Puisque

$$Le = \frac{\lambda}{\rho C_p D_m} = 1$$

On peut remplacer  $\rho C_p D_m$  par  $\lambda$

Donc l'équation (V.7.a) devient

$$\dot{m} \frac{dT}{dx} - \frac{1}{C_p} \frac{d}{dx} \left[ \lambda \frac{dT}{dx} \right] = - \frac{\dot{W}_f \Delta h_c}{C_p} \quad (\text{V.7.b})$$

$$\dot{m} = \rho_1 S_1 \quad (\text{V.8})$$

Avec les conditions limites suivantes .

- avant la flamme

$$\begin{cases} T(x \rightarrow -\infty) = T_1 \\ \frac{dT}{dx}(x \rightarrow -\infty) = 0 \end{cases} \quad (\text{V.9.a})$$

- après la flamme

$$\begin{cases} T(x \rightarrow +\infty) = T_2 \\ \frac{dT}{dx}(x \rightarrow +\infty) = 0 \end{cases} \quad (\text{V.9.b})$$

Pour simplifier, on suppose une variation linéaire de température de  $T_1$  à  $T_2$  a travers l'épaisseur de la flamme (Fig.5.2).

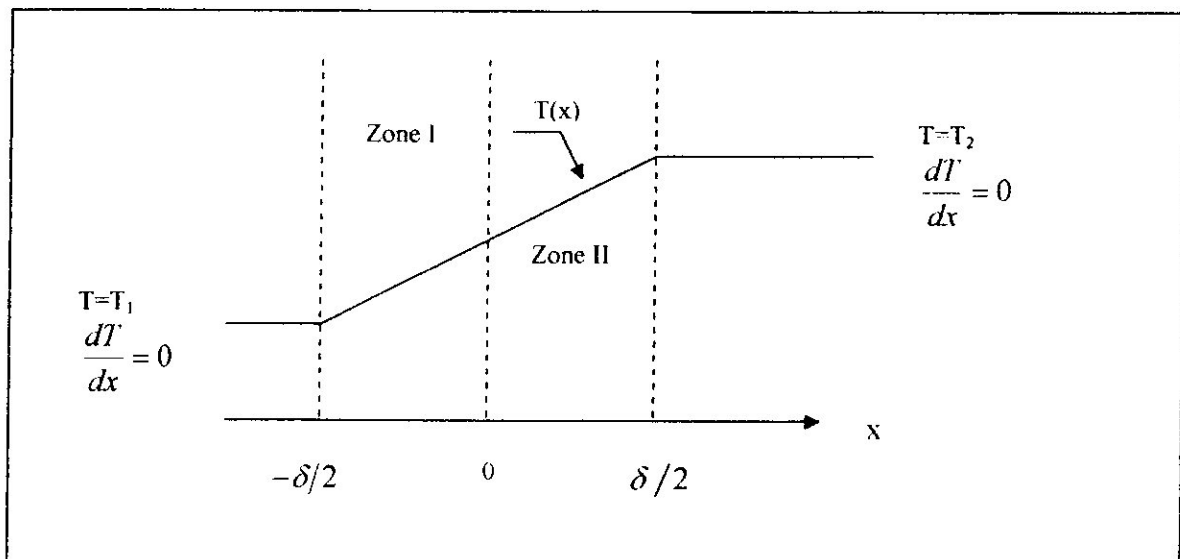


Fig.5.2 l'épaisseur de la flamme

Pour une évolution linéaire, on a :

$$\frac{dT}{dx} = \frac{T_2 - T_1}{\delta} \quad (\text{V.10})$$

### V.3 Détermination de la vitesse de propagation de la flamme et son épaisseur [8]

L'intégration de l'équation (IV.7.b) suivant l'abscisse donne :

$$\dot{m} [T]_{T_1}^{T_2} - \frac{\lambda}{C_p} \left[ \frac{dT}{dx} \right]_{-\infty}^{+\infty} = - \frac{\Delta h_c}{C_p} \int_{-\infty}^{+\infty} \dot{W}_F dx \quad (\text{V.11})$$

Or, d'après les conditions aux limites, l'équation précédente devient :

$$\dot{m}(T_2 - T_1) = - \frac{\Delta h_c}{C_p} \int_{-\infty}^{+\infty} \dot{W} dx \quad (\text{V.12})$$

On changeant les limites de taux de réaction de l'espace en température.

$$\frac{dT}{dx} = \frac{T_2 - T_1}{\delta} \Rightarrow dx = \frac{\delta}{T_2 - T_1} dT \quad (\text{V.13})$$

Avec ce changement de variable l'équation (V.11) devient :

$$\dot{m}(T_2 - T_1) = - \frac{\Delta h_c}{C_p} \frac{\delta}{(T_2 - T_1)} \int_{-\infty}^{+\infty} \dot{W} dx \quad (\text{V.14})$$

Soit

$$\dot{m}(T_2 - T_1) = - \frac{\Delta h_c}{C_p} \delta \overline{\dot{W}_F} dx \quad (\text{V.15})$$

Avec

$$\overline{\dot{W}_F} = \frac{1}{(T_2 - T_1)} \int_{T_2}^{T_1} \dot{W}_F dT \quad (\text{V.16})$$

$\overline{\dot{W}_F}$  : Taux de réaction moyen de fuel.

L'équation (V.15) a deux inconnues le débit masse et l'épaisseur, donc elle n'est pas suffisante. Pour résoudre le problème, il est nécessaire de trouver une autre équation.

Cette équation peut être obtenue à partir de l'équation (V.11) avec les conditions aux limites suivantes :

$$\begin{cases} x \rightarrow -\infty, & T = T_1 \\ x = \frac{\delta}{2}, & T = T_2 \text{ et } x = 0, & T = T_1 \end{cases}$$

Puisque la réaction se produit dans la région de température très élevée, donc on peut négliger le taux de réaction dans l'intervalle  $-\infty \leq x \leq 0$ .

Sachant qu'a

$$x = 0, \quad T = \frac{T_1 + T_2}{2} \quad (\text{V.17})$$

Et

$$\frac{dT}{dx} = \frac{T_2 - T_1}{\delta} \quad (\text{V.18})$$

On obtient de l'équation (V.11) avec la modification des limites précédentes.

$$\dot{m} \frac{\delta}{2} - \frac{\lambda}{C_p} = 0 \quad (\text{V.19})$$

La résolution des équations (V.16) et (V.18) simultanément donne :

$$\dot{m} = \left[ 2 \frac{\lambda}{C_p^2} \frac{(-\Delta h_c)}{(T_2 - T_1)} \overline{W_F} \right]^2 \quad (\text{V.20})$$

Et

$$\delta = \frac{2\lambda}{C_p \dot{m}} \quad (\text{V.21})$$

On applique la définition de la vitesse de flamme (le débit masse par la masse volumique), et la diffusivité thermique et on reconnaît que :

$$\Delta h_c = (\nu + 1) C_p (T_2 - T_1)$$

On obtient l'expression finale de la vitesse de propagation de flamme et son épaisseur.

$$S_l = \left[ -2D_T (\gamma + 1) \frac{\overline{W_F}}{\rho_1} \right]^{1/2} \quad (\text{V.22})$$

$$\delta = \left[ \frac{-2\rho_1 D_T}{(\gamma + 1) \overline{W_F}} \right]^{1/2} \quad (\text{V.23})$$

En terme de vitesse :

$$\delta = \frac{2D_T}{S_l}$$

## V.4 Equations de la température et de fraction massique

L'objectif de la résolution des équations différentielles de la température et de fraction massique est de trouver les expressions de variation de température et de fraction massiques des espèces réagissant dans la zone de réaction.

### V.4.1 Equation de température

L'équation différentielle de la température est de la forme suivante :

$$\dot{m} \frac{dT}{dx} - \frac{\lambda}{C_p} \frac{d^2T}{dx^2} = -\frac{\bar{W} \Delta h_c}{C_p} \quad (\text{V.24})$$

$$\frac{\dot{m} C_p}{\lambda} \frac{dT}{dx} - \frac{d^2T}{dx^2} = -\frac{\bar{W} \Delta h_c}{\lambda} \quad (\text{V.25})$$

$\Delta h_c$  : Chaleur de réaction donnée par :

$$\Delta h_c = (1 + \nu) \cdot C_p \cdot (T_2 - T_1)$$

$\nu$  : Coefficient stoechiométrique

On pose

$$a = \frac{\dot{m} C_p}{\lambda}, \quad D = \frac{\bar{W} \Delta h_c}{\lambda}, \quad \dot{m} = \rho_1 \cdot S l$$

L'équation (V.25) devient sous cette forme :

$$a \frac{dT}{dx} - \frac{d^2T}{dx^2} = -D \quad (\text{V.26})$$

La résolution de l'équation de température se fait dans deux zones.

#### - zone de préchauffage

Dans cette zone la réaction n'est pas encore activée, donc on néglige le terme proportionnel au taux de réaction.

$$\bar{W} \approx 0 \text{ (Pas de réaction)} \Rightarrow D = 0$$

L'équation (V.26) devient :

$$a \frac{dT}{dx} - \frac{d^2T}{dx^2} = 0 \quad (\text{V.27})$$

Avec les conditions aux limites suivantes :



$$\begin{cases} x = -\frac{\delta}{2} \Rightarrow T = T_1 \\ x = 0 \Rightarrow T = T_i = \frac{T_2 + T_1}{2} \end{cases}$$

C'est une équation différentielle homogène d'ordre deux, l'expression générale de sa solution est donné sous la forme suivante :

$$T(x) = c_1 e^{ax} + c_2 \quad (\text{V.28})$$

$c_1$  et  $c_2$  sont des constantes déterminées a partir des conditions aux limites imposées.

**- zone de réaction**

C'est une zone de réaction vive, dans cette zone le terme dû à la réaction chimique intervient dans l'équation différentielle comme un second membre.

L'équation différentielle est sous la forme :

$$a \frac{dT}{dx} - \frac{d^2T}{dx^2} = -D \quad (\text{V.29})$$

Avec les condition aux limites suivantes :

$$\begin{cases} x = 0 \Rightarrow T = T_i = \frac{T_2 + T_1}{2} \\ x = \frac{\delta}{2} \Rightarrow T = T_2 \end{cases}$$

C'est une équation différentielle non homogène d'ordre deux sa solution est la superposition de deux solutions, la solution homogène plus une solution particulière.

Connaissant l'expression de la solution homogène :

$$T(x) = a_1 e^{ax} + b_1$$

Et l'expression de la solution particulière

$$T(x) = a_2 x + b_2$$

La solution générale est la somme des deux solutions, on obtient alors :

$$T(x) = c_3 e^{ax} - \frac{D}{a} x + c_4 \quad (\text{V.30})$$

$C_3$  et  $C_4$  sont déterminées à partir des conditions aux limites

### V.4.2 Equation de fraction massique

De même pour l'équation de température, la résolution de l'équation des fractions massique se fait de la même manière que précédemment.

$$\frac{\dot{m}C_{p_i}}{\lambda_i} \frac{dY_i}{dx} - \frac{d^2Y_i}{dx^2} = -\frac{\bar{W}_i C_{p_i}}{\lambda_i} \quad (\text{V.31})$$

On pose

$$a_i = \frac{\dot{m}C_{p_i}}{\lambda_i}, \quad D_i = \frac{\bar{W}_i C_{p_i}}{\lambda_i}$$

Les conditions aux limites sont :

$$\begin{cases} x = -\frac{\delta}{2} \Rightarrow Y_i = Y_{i,1} \\ x = 0 \Rightarrow Y_{i,1} = Y_{i,II} \text{ et } dY_{i,1}/dx = dY_{i,II}/dx \\ x = \frac{\delta}{2} \Rightarrow Y_i = Y_{i,2} \end{cases}$$

$Y_{i,1}$  : fraction massique initiale de éléments de combustion.

$Y_{i,2}$  : fraction massique finale des éléments de combustion.

L'expression de la solution générale des équations est de la forme :

- pour les réactifs

**Dans la zone de préchauffage**

$$Y_i(x) = c_{i,1} e^{a_i x} + c_{i,2} \quad (\text{V.32.a})$$

**Dans la zone de réaction**

$$Y_i(x) = c_{i,3} e^{a_i x} + \frac{D_i}{a_i} x + c_{i,4} \quad (\text{V.32.b})$$

- pour les produits

**Dans la zone de préchauffage**

$$Y_i(x) = c_{i,1} e^{a_i x} + c_{i,2} \quad (\text{V.33.a})$$

**Dans la zone de réaction**

$$Y_i(x) = c_{i,A} e^{a_i x} - \frac{D_i}{a_i} x + c_{i,B} \quad (\text{V.33.b})$$

Les constantes sont déterminées à partir des conditions aux limites imposées sur les fractions massiques des différentes espèces de la réaction.

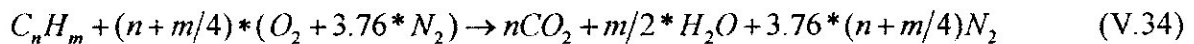
**V. 5 Température de la flamme adiabatique :**

Rappelons que la température de la flamme adiabatique est la température maximale que peuvent atteindre les produits de combustion. Pour chaque nature de mélange comme dans notre cas en calculant la température de flamme adiabatique pour un mélange stoechiométrique, pauvre et riche.

**V.5.1 Equations de combustion pour différentes richesses [5]**

**A- mélange stoechiométrique (rc=1) :**

L'équation de combustion s'écrit :



**- Les fractions massiques des réactifs et des produits :**

La fraction massique : c'est le quotient de la masse de chaque espèce sur la masse totale de mélange.

**- La masse totale de mélange des réactants est :**

$$mtr = (12*n+m) + (n+m/4)*32 + 3.76*(n+m/4)*28 \text{ (g/ mole)}$$

**Réactifs :**

La fraction massique de l'hydrocarbure est :  $(12*n+m)/mtr$

La fraction massique de l'oxygène est :  $(n+m/4)*32/mtr$

La fraction massique de azote est :  $3.76*(n+m/4)*28 /mtr$

**Produit:**

$$mtp = (44*n) + (m/2)*18 + 3.76*(n+m/4)*28 \text{ (g/mole)}$$

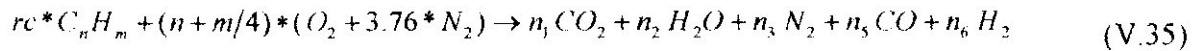
La fraction massique de l'oxyde de carbone est :  $(44*n)/mtp$

La fraction massique l'eau est :  $18*(m/2)/mtp$

La fraction massique de l'azote est :  $(3.76*(n+m/4)*28)/mtp$

**B – mélange riche (rc>1) :**

L'équation de combustion devient:



L'équation de dissociation est :



Pour déterminer les nombres de mole de chaque espèce  $n_1, n_2, \dots, n_6$ , on fait un bilan des atomes :

Carbone :  $n_1 + n_5 = rc \cdot n$

Hydrogène :  $2 \cdot n_2 + 2 \cdot n_6 = rc \cdot m$

Oxygène :  $2 \cdot n_1 + n_2 + n_5 = 2 \cdot (n + m/4)$

En ajoutant l'équation de l'équilibre chimique

$$Kp = \frac{n_2 \cdot n_5}{n_1 \cdot n_6}$$

Avec :

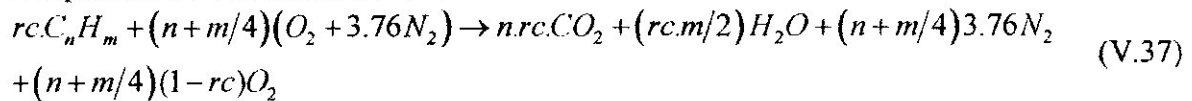
$$400 < T < 3200 \text{ (°K)}$$

La constante d'équilibre est :

$$\ln(Kp) = 2.743 - 1.761/\theta - 1.611/\theta^2 + 0.2803/\theta^3 \quad \text{et} \quad \theta = \frac{T}{1000}$$

**C- mélange pauvre (rc<1) :**

L'équation de combustion alors devient :



**Remarque :**

Pour les fractions massiques des espèces chimiques réactifs ou produits, on applique la même méthode de premier cas (mélange stoechiométrique).

### V.5.2 Calcul de la température de flamme adiabatique

D'après les hypothèses précédentes, la combustion se fait à pression constante, de 0.1 Mpa et d'une température d'entre 298.15 K.

Le premier principe de la thermodynamique pour un système ouvert s'écrit :

$$W_T + Q = \Delta H \quad (\text{V.38})$$

Et pour une transformation à pression constante :

$$W_T = \int V dp = 0 \quad (P = \text{cte}) \quad (\text{V.39})$$

Et puisque la transformation est adiabatique :

$$Q = 0 \quad (\text{V.40})$$

Par conséquent l'équation (V.38) devient :

$$\Delta H = 0 \quad (\text{V.41})$$

Cela signifie que l'enthalpie est conservée entre l'état initial et l'état final ; ou encore, l'enthalpie des réactifs est égale à l'enthalpie des produits de combustion :

$$H_R(T_e) = H_P(T_c) \quad (\text{V.42})$$

Pour déterminer la valeur de la température adiabatique de la flamme, on doit chercher la solution de l'équation suivante :

$$f(T) = H_P(T) - H_R(T_e) = 0 \quad (\text{V.43})$$

Il faut choisir un intervalle de température de  $[T_1, T_2]$ , et calculer  $f(T_1)$ ,  $f(T_2)$  mais il faut s'assurer que température de fin de combustion appartient à cet intervalle, cela est traduit par la condition :

$$f(T_1) \cdot f(T_2) < 0 \Rightarrow [H_P(T_1) - H_R(T_e)] \cdot [H_P(T_2) - H_R(T_e)] < 0$$

#### V.5.2.1 Calcul de l'enthalpie du mélange frais

$H_R$  : désigne l'enthalpie du combustible à une température d'entrée  $T_e = 298.15^\circ\text{K}$ .

Ou :

$$H_R = r_c \left( (\Delta H_f^\circ)_C^{298.15} + \int_{298.15}^{T=T_e} C_{p_c} dT \right) \quad (\text{V.44})$$

$(\Delta H_f^\circ)_C^{298.15}$  : représente la variation de l'enthalpie de formation molaire du combustible.

$\int_{298.15}^{T=Te} C_{p_c} dT$  : représente la variation de l'enthalpie sensible du combustible entre  $T_0$  et  $T_e$ .

**Remarque :**

Le mélange frais est à la température ambiante 298.15 (°K), ce qui fait que l'enthalpie de formation de l'air est égale à zéro.

On néglige aussi l'enthalpie sensible de combustible entre 298.15 et 300 (°K).

Donc on prend l'enthalpie de mélange frais égale à l'enthalpie de formation de combustible à 298.15 (°K).

$$\int_{298.15}^{T=Te} C_{p_c} dT \approx 0$$

$H_R$  devient :

$$H_R = r_c (\Delta H_f^\circ)_C^{298.15}$$

**V.5.2.2 Calcul de l'enthalpie des produits [5]**

Les enthalpies globales des produits sont calculées à l'aide du polynôme d'interpolation de Gordon et Mc Bride :

$$H(T) = (a_1 + \frac{a_2 \cdot T}{2} + \frac{a_3 \cdot T^2}{3} + \frac{a_4 \cdot T^3}{4} + \frac{a_5 \cdot T^4}{5} + \frac{a_6}{T}) \cdot R \cdot T$$

Ou  $a_1, a_2, \dots, a_6$ , sont des coefficients propres à chaque éléments.

On donne les coefficients de Gordon et Mc bride en annexe (1)

Donc l'enthalpie globale des produits est :  $H_p = \sum_i H_p^{(i)}$

**V.5.2.3 Algorithme de Dichotomie**

La formule suivante :

$$H_R(Te) = H_p(T_p)$$

Cette équation peut s'exprimer par :

$$\Delta H(T_p) = H_p(T_p) - H_R = 0$$

$$f(T) = H_p(T) - H_R = 0 \text{ pour } T = T_p$$

Pour  $T = T_1$  et  $T = T_2$  l'équation précédente s'écrit :

$$f(T_1) = H_p(T_1) - H_R$$

$$f(T_2) = H_p(T_2) - H_R$$

si  $f(T_1) \cdot f(T_2) < 0 \Rightarrow T_p \in [T_1, T_2]$ .

D'où :  $T_o = \frac{T_1 + T_2}{2}$

si  $f(T_o) \cdot f(T_2) < 0 \Rightarrow T_p \in [T_o, T_2]$ .

$$\Rightarrow T_p = \frac{T_o + T_2}{2}$$

si  $f(T_1) \cdot f(T_o) < 0 \Rightarrow T_p \in [T_1, T_o]$ .

$$\Rightarrow T_p = \frac{T_1 + T_o}{2}$$

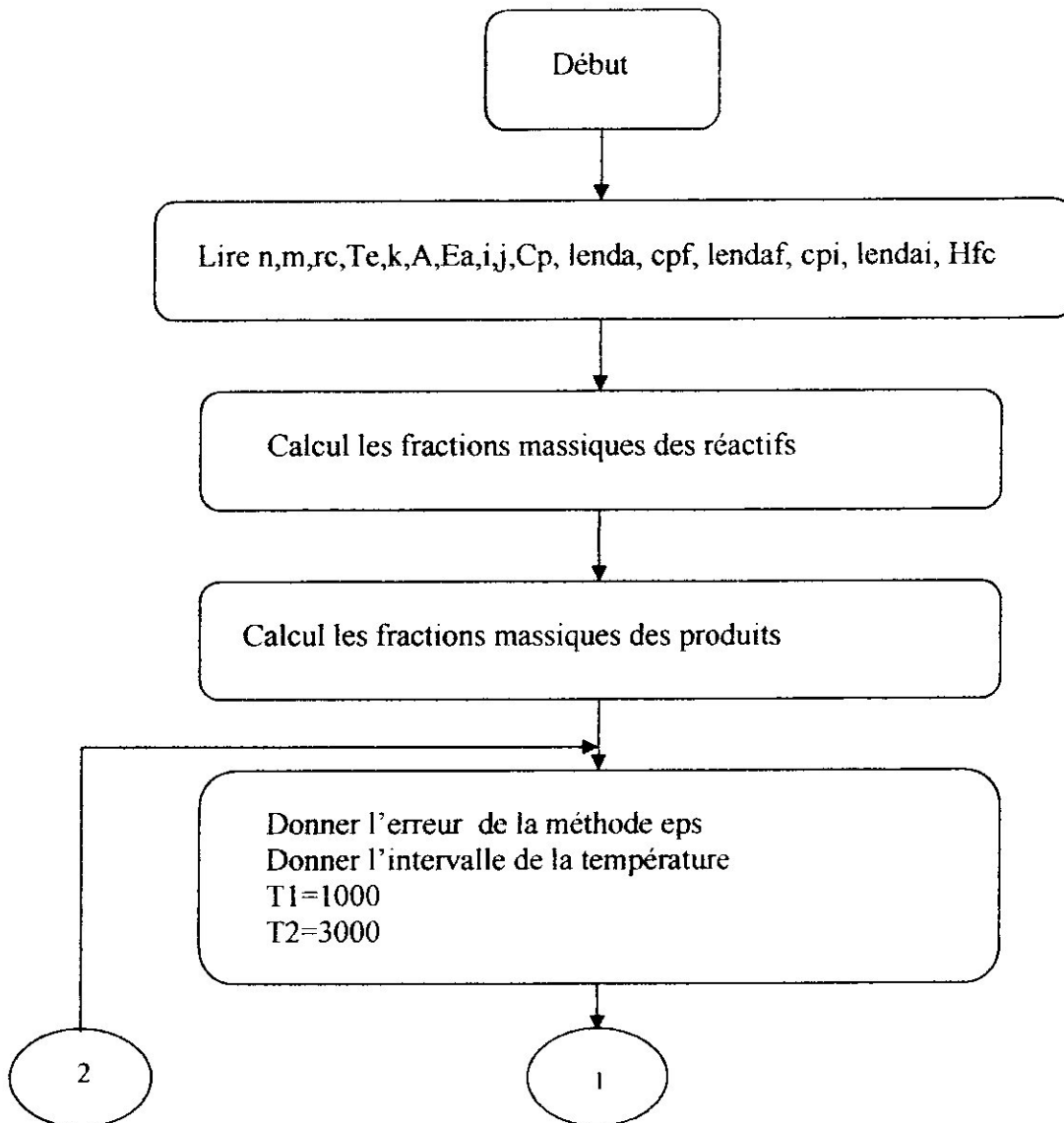
On arrête le calcul jusqu'à avoir :

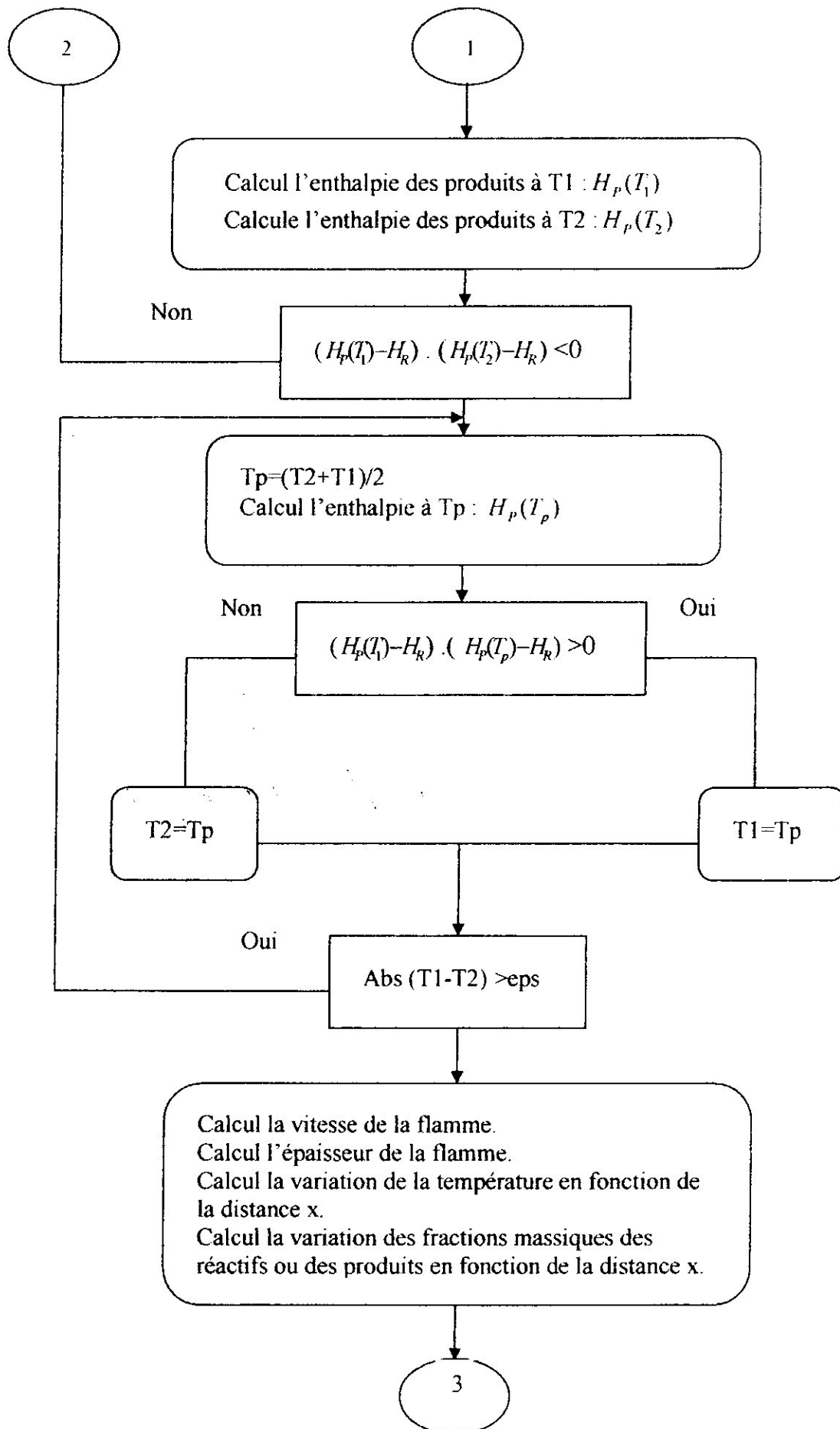
$$|T_p - T_o| \leq \varepsilon \text{ Avec } \varepsilon \ll 1$$

D'où :

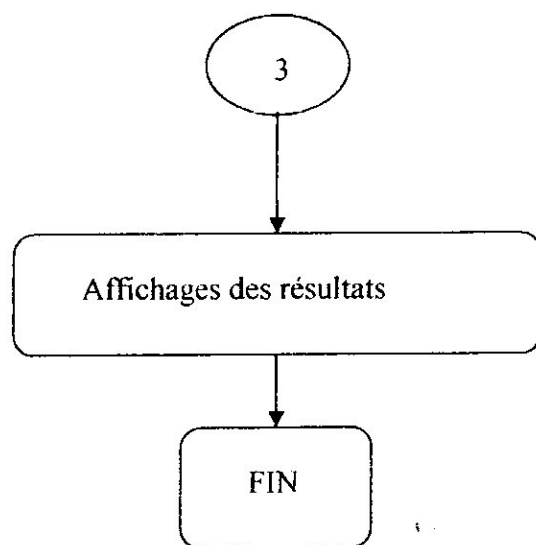
$$T_C = T_P$$

### V.6 Organigramme









*Chapitre VI :*  
*Résultat et interprétation*

## VI Graphes et interprétations

A l'aide des résultats obtenu par le programme pour les différents combustibles, méthane, propane et n-decane sont présentés dans l'annexe (2), on obtient les graphes suivants :

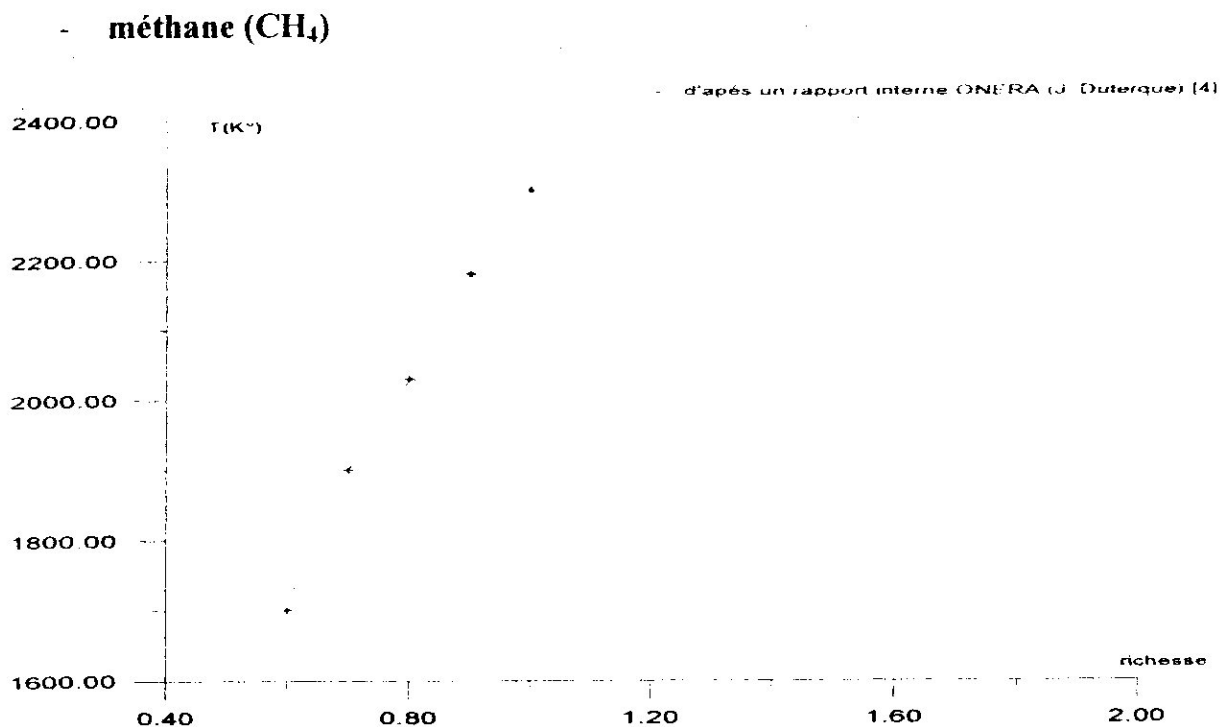


Fig. 6.1 Température adiabatique de fin de combustion pour des mélanges méthane-air à différentes richesses.

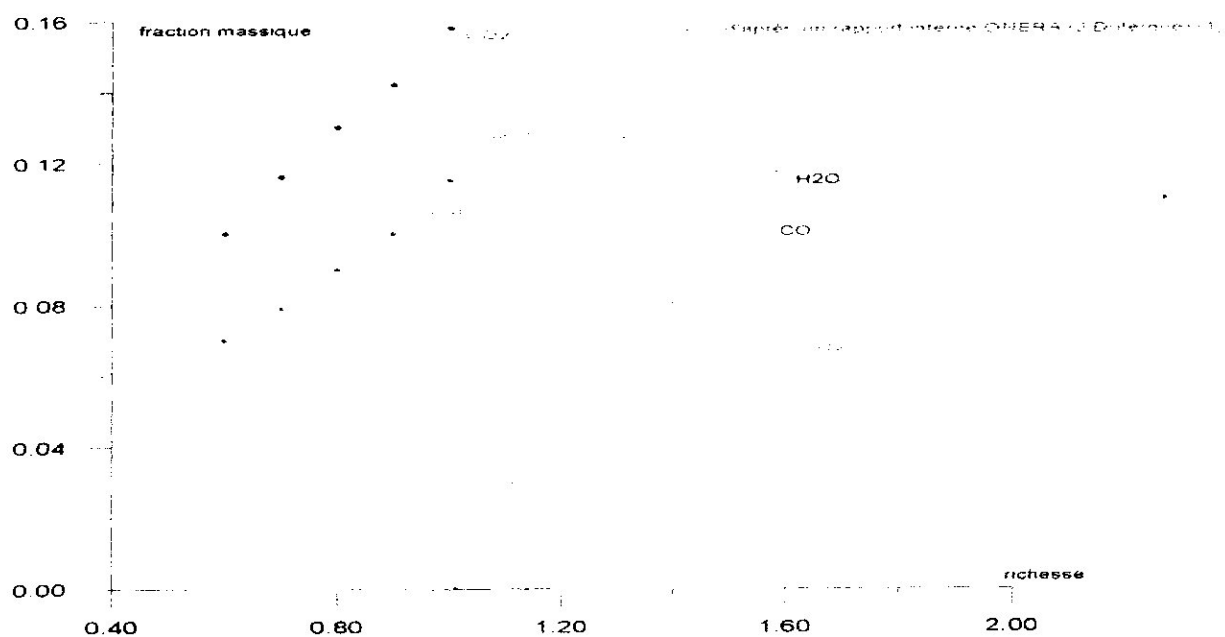


Fig. 6.2 composition de fin de combustion pour des mélanges méthane-air à différents richesses.

La combustion a été simulé pour les conditions standards c'est-à-dire dans une pression atmosphérique (0.1 Mpa) et température ambiante 300 (K) avec une sélection des produits de combustion (voir chapitre V). D'après la figure (6.1) ou le mélange est pauvre, on s'aperçoit que la température croît avec l'augmentation de la richesse pour atteindre son maximum à la richesse égale à l'unité (mélange stoechiométrique), au delà de cette valeur (mélange riche), la température subit une diminution.

Concernant les produits de combustion (fig.6.2), si la composition initial des gaz est pauvre la composition des produits à l'équilibre est proche de la composition finale de la réaction stoechiométrique mais diluée par de l'oxygène imbrûlé. La fraction massique de l'eau augmente avec la richesse en parallèle avec celle de dioxyde de carbone qui atteint sa valeur maximale pour une richesse égale à l'unité. Si le mélange initial est riche, on voit au contraire que le combustible en excès ne reste pas simplement imbrûlé a l'équilibre, il y'a apparition de mono oxyde de carbone et l'hydrogène.

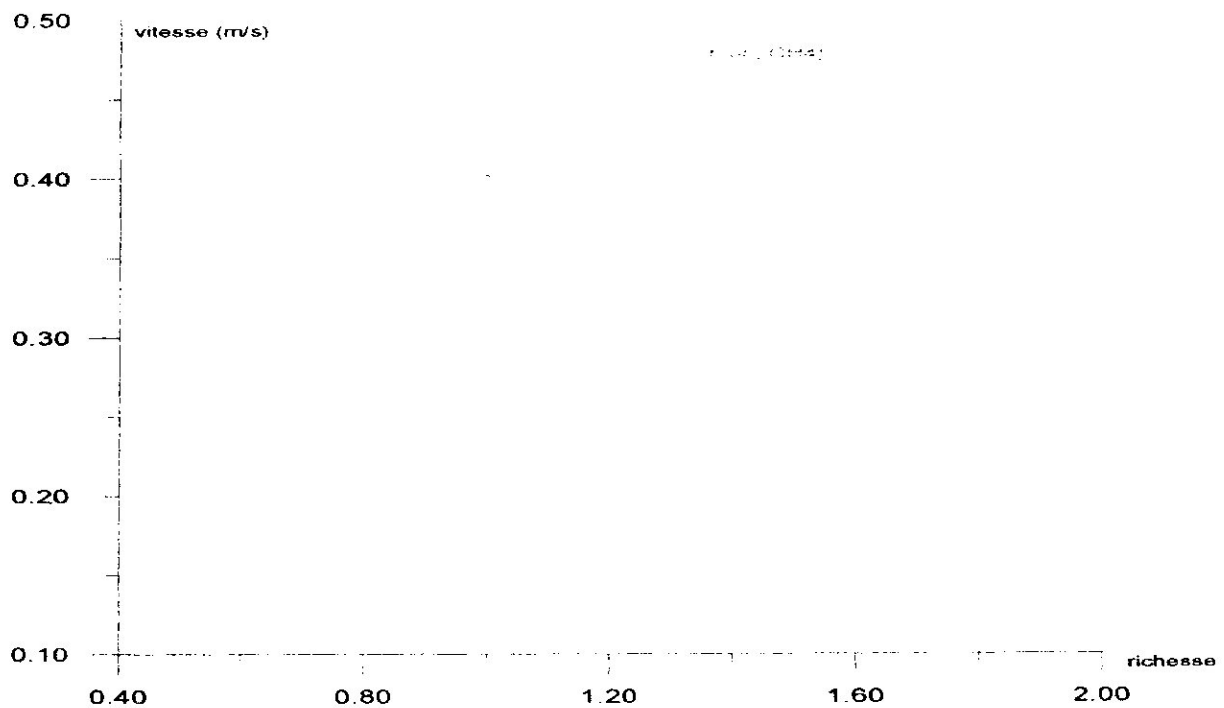


Fig. 6.3 vitesse de propagation de flamme laminaire méthane-air à différentes richesses

D'après la figure (6.3) on constate que la vitesse de propagation de la flamme augmente avec l'augmentation de la richesse pour atteindre son maximum à une richesse égale à l'unité ce qui correspond a une température maximale donc un taux de réaction maximum, puis diminue pour une richesse supérieur à l'unité (mélange riche) a cause de la diminution de la température de fin de combustion.

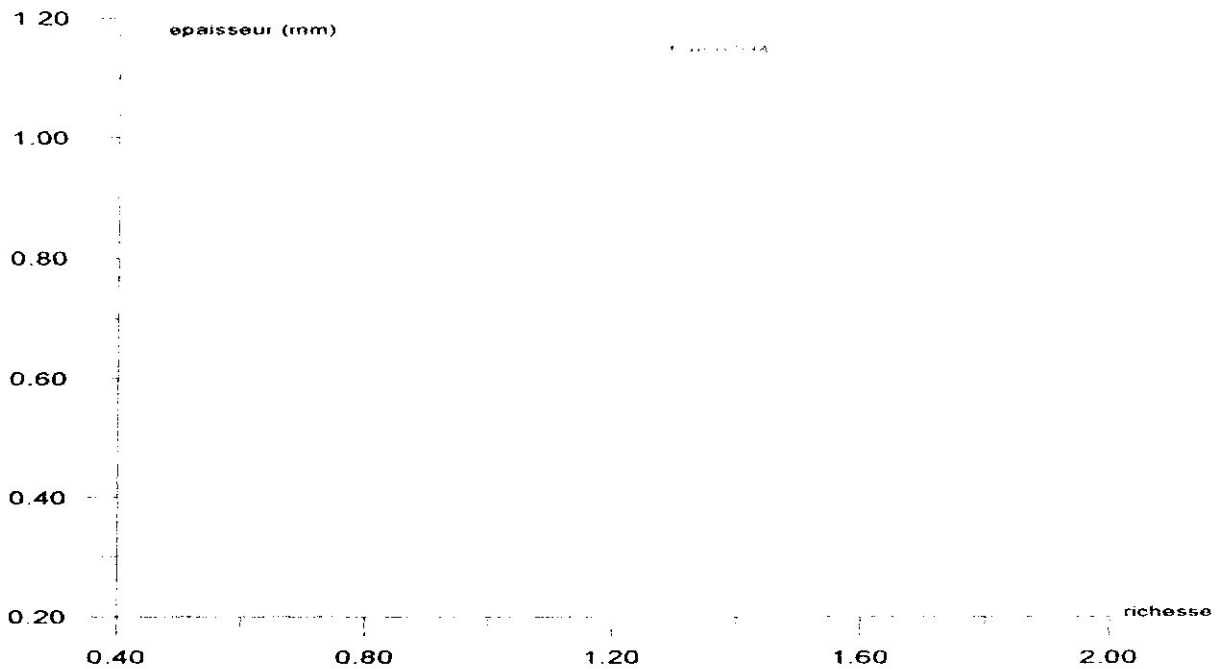


Fig. 6.4 Epaisseur de flamme laminaire méthane-air à différentes richesses

On s'aperçoit d'après la figure (6.4) que l'épaisseur de la flamme est inversement proportionnel à la vitesse. En effet, l'épaisseur diminue avec l'augmentation de la richesse pour un mélange pauvre et atteint une valeur minimale pour un mélange stoechiométrique, puis il augmente avec la richesse pour un mélange riche.

- **D'autres exemples :**

On obtient des résultats similaires pour le propane et le n-decane

- **n-decane ( $C_{10}H_{22}$ )**

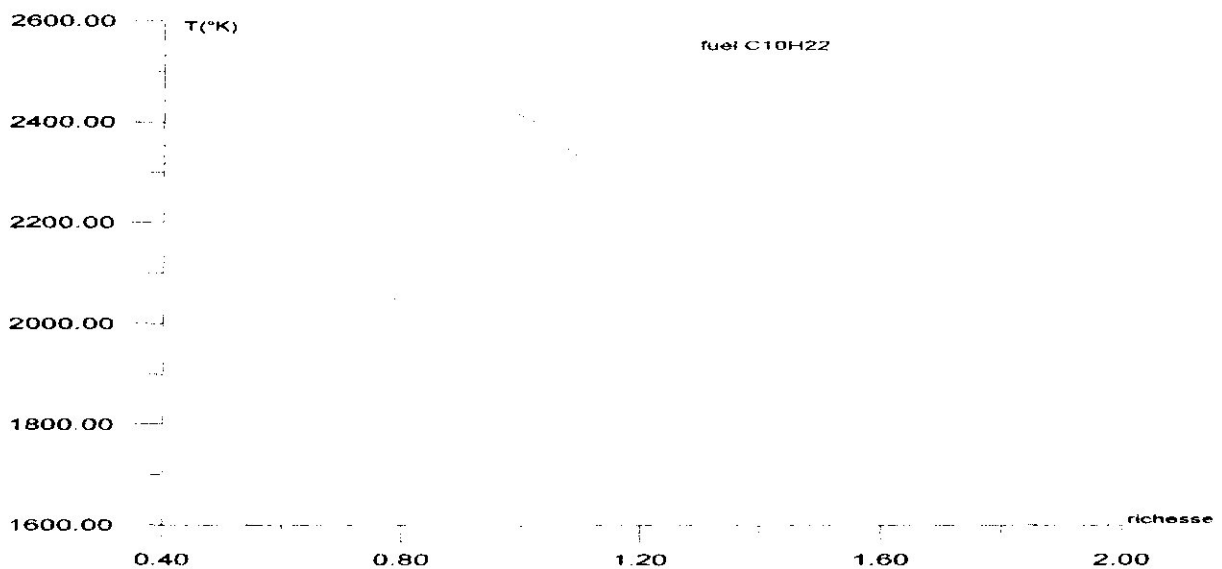


Fig. 6.5 Température adiabatique de fin de combustion pour des mélanges n-decane-air à différentes richesses.

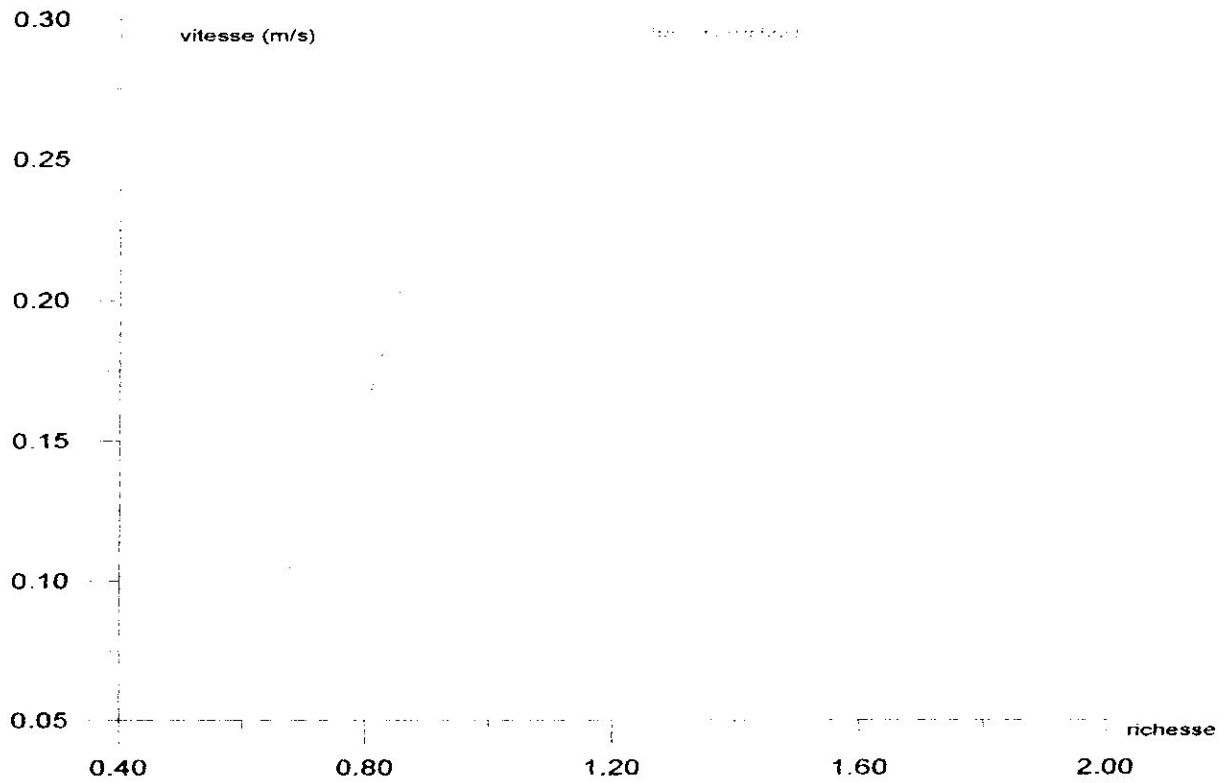


Fig. 6.6 vitesse de propagation de flamme laminaire n-decane-air à différentes richesses.

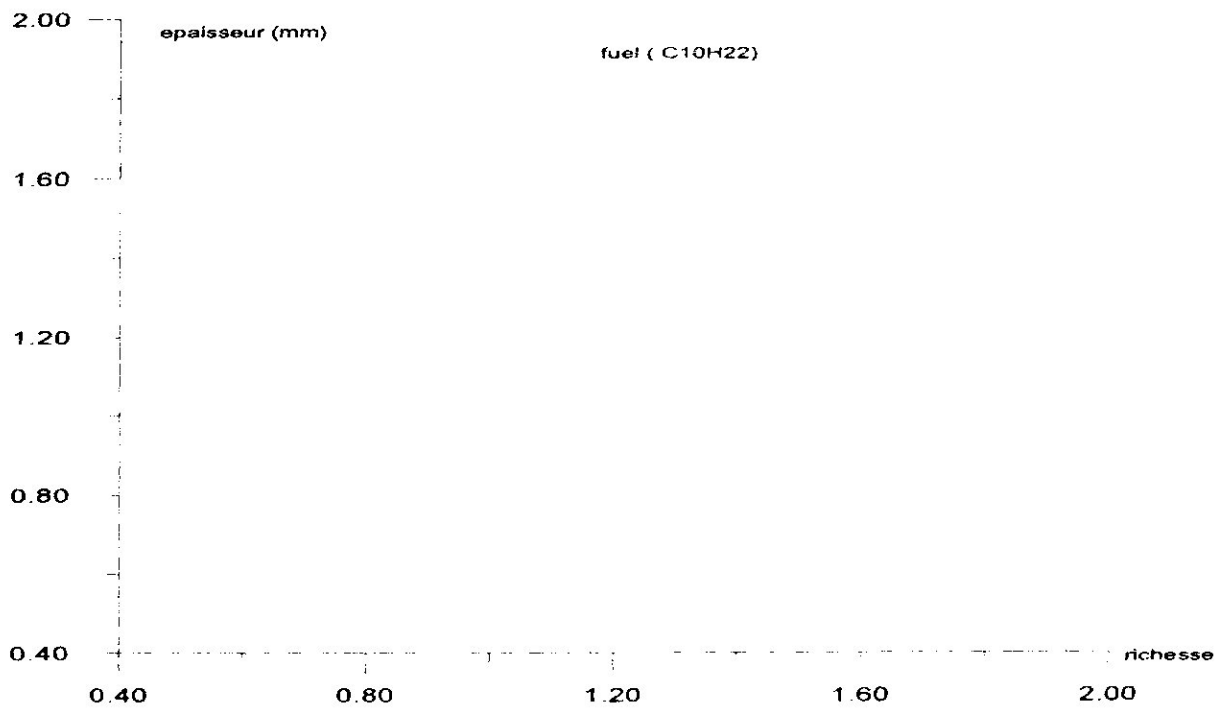


Fig. 6.7 Epaisseur de flamme laminaire n-decane-air à différentes richesses

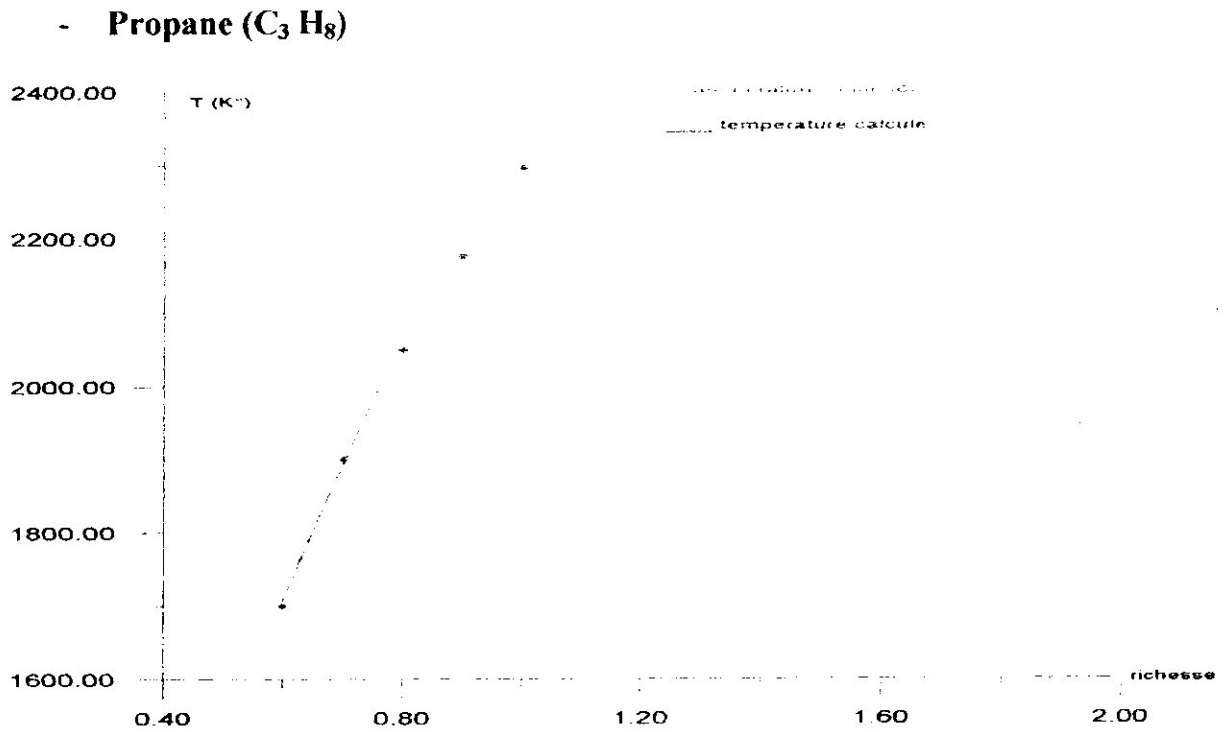


Fig. 6.8 Température adiabatique de fin de combustion pour des mélanges propane-air à différentes richesses

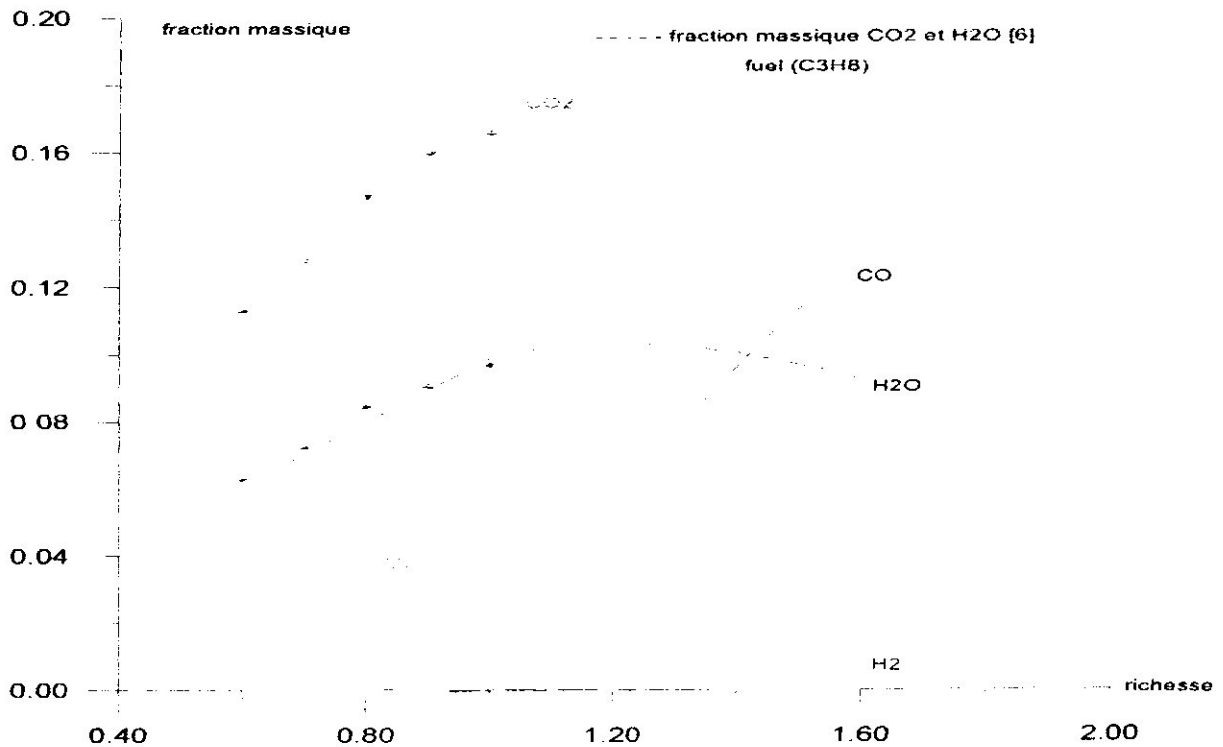


Fig. 6.9 composition de fin de combustion pour des mélanges propane-air à différents richesses

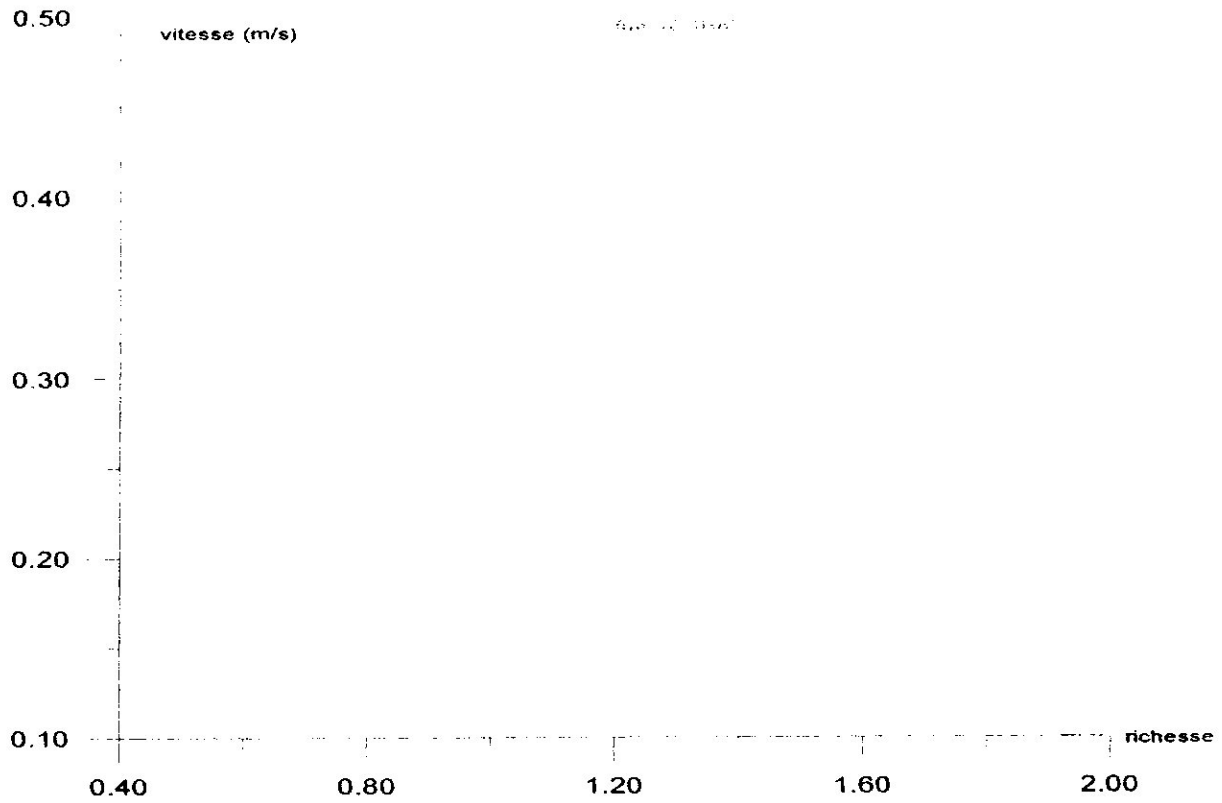


Fig. 6.10 vitesse de propagation de flamme laminaire propane-air à différentes richesses.

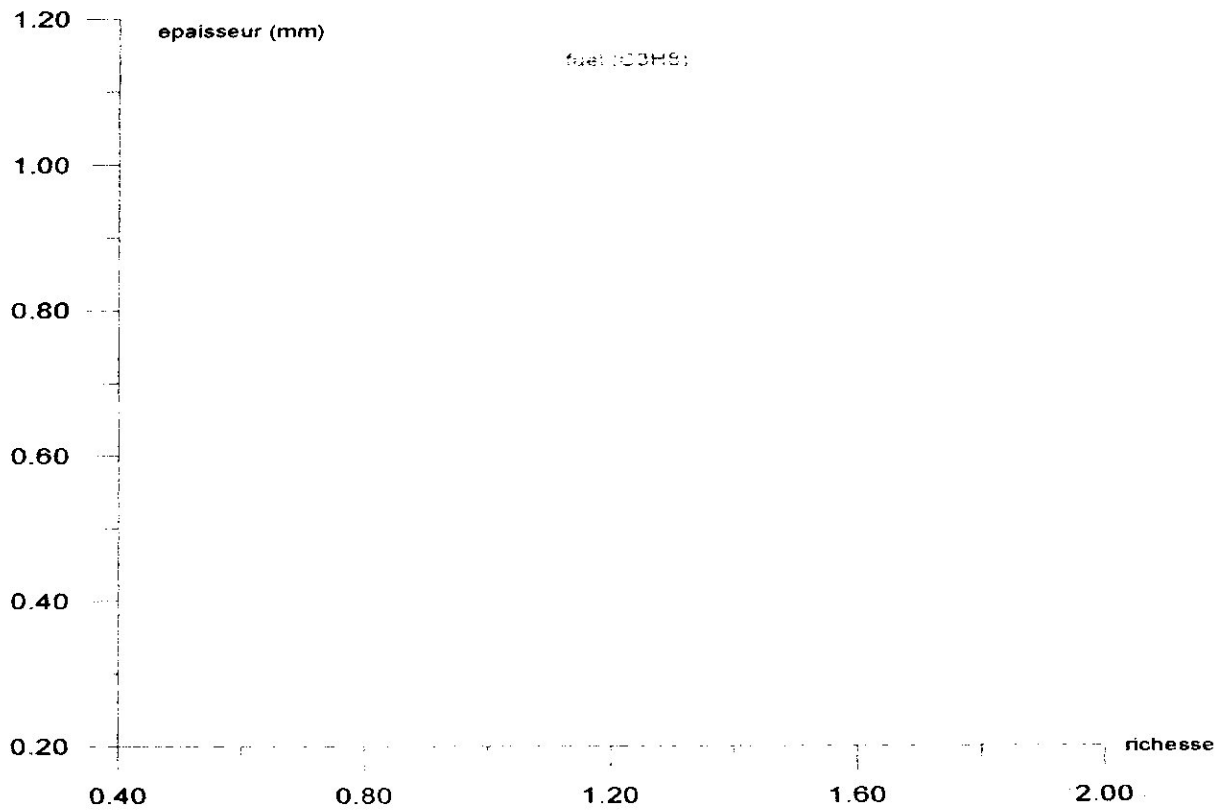


Fig. 6.11 Epaisseur de flamme laminaire propane-air à différentes richesses.



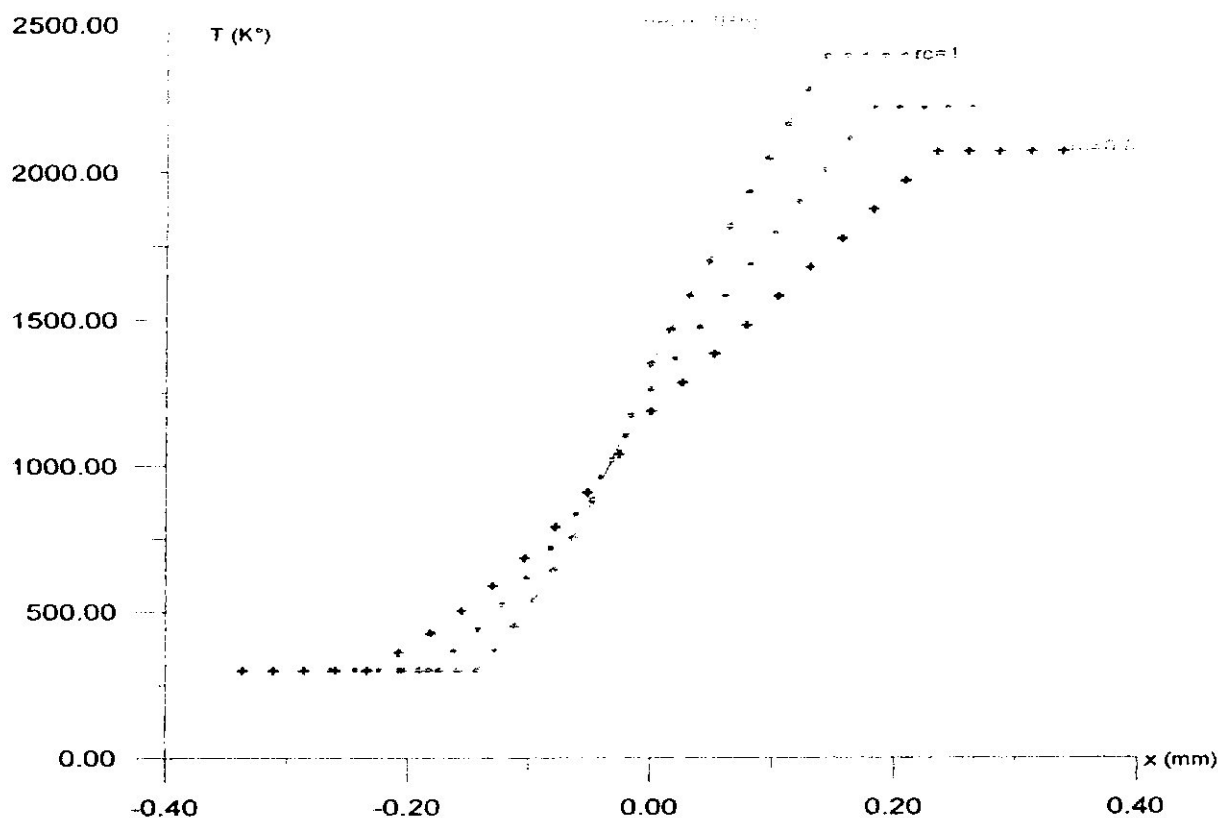


Fig. 6.12 variation de la température en fonction de l'abscisse  $x$  pour différents richesses.

La figure (6.12) : représentant la variation de la température le long de l'épaisseur de la flamme pour des mélanges de différentes richesse. Nous constatons que l'évolution de la température dans la zone de préchauffage, ou la réaction chimique de combustion n'a pas encore commencée, suit une loi exponentielle, cette augmentation est due essentiellement a un échange thermique par convection. Par la suite, le profil de la température devient presque linéaire dans la zone de réaction, du fait que le terme exponentiel caractérisant l'échange convectif est très faible dans cette région, devant le terme correspondant à la chaleur dégagée par combustion.

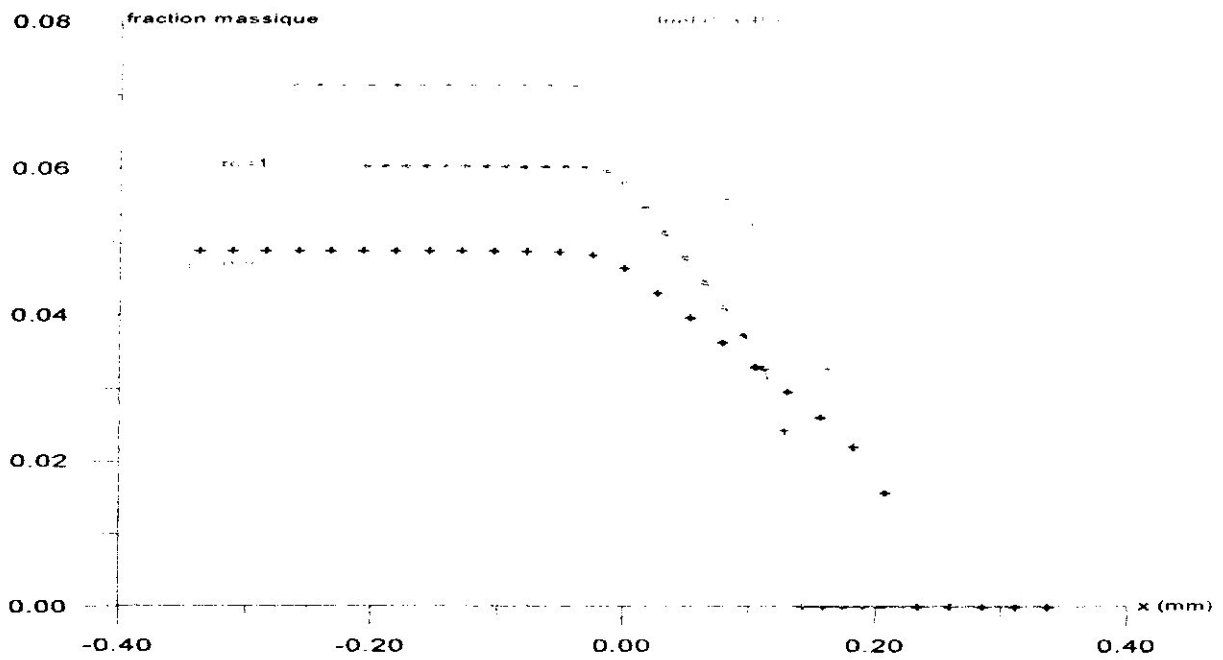


Fig. 6.13 variation de fraction massique de fuel  $C_3H_8$  en fonction de l'abscisse pour différentes richesses.

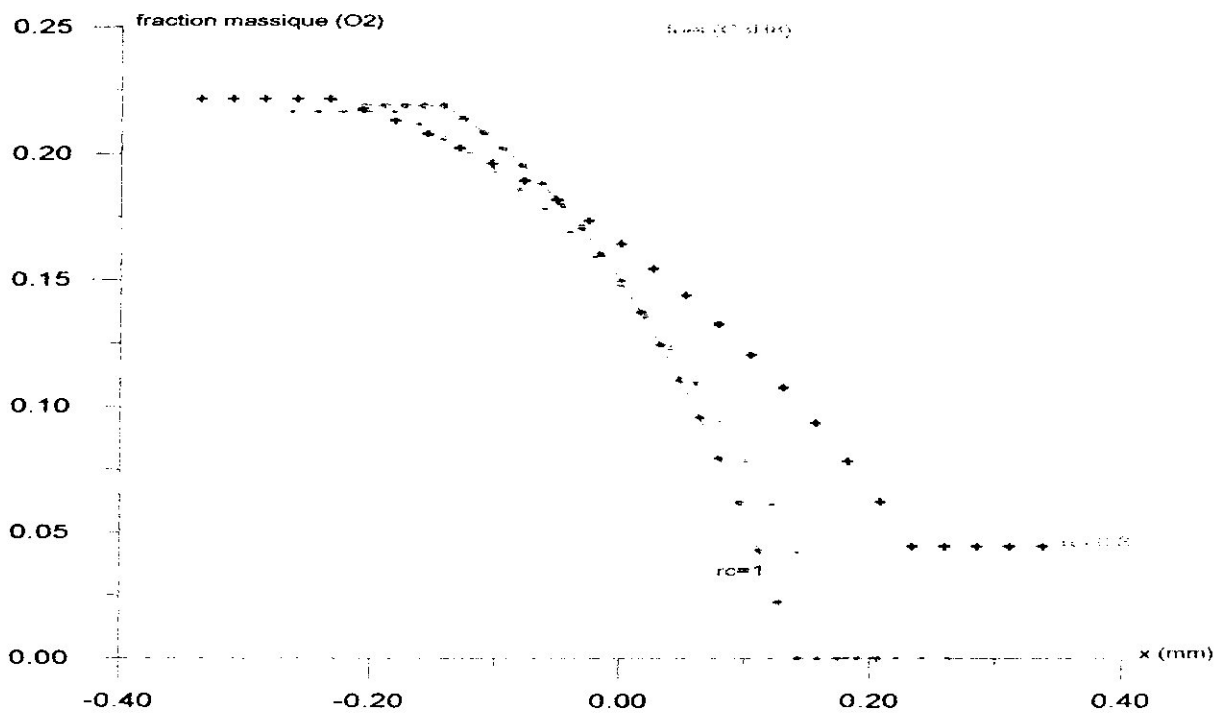


Fig. 6.14 variation de fraction massique de l'oxygène en fonction de l'abscisse x pour différentes richesses

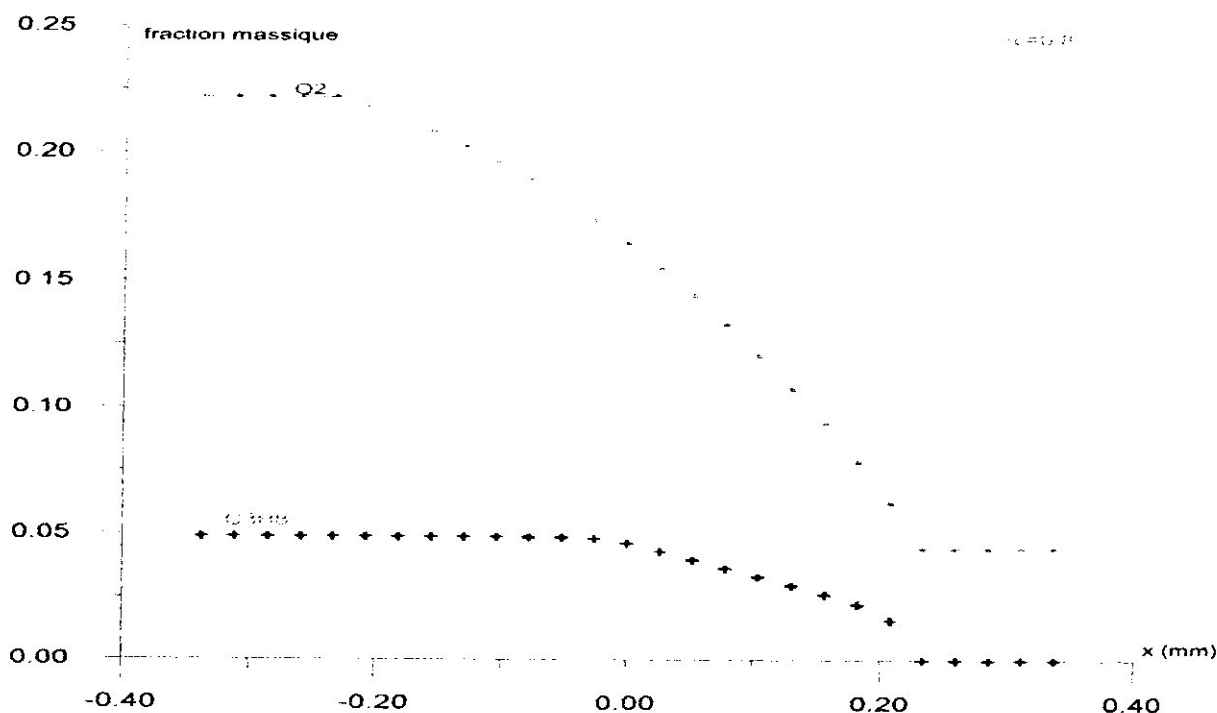


Fig. 6.15 variation de fraction massique des réactifs en fonction de l'abscisse, mélange pauvre.

Sur les figures (6.13), (6.14) sont illustrés respectivement la variation des fractions massiques des réactifs ( $C_3H_8$  et  $O_2$ ) pour des mélanges de différentes richesses. Nous constatons que ces fractions massiques diminuent légèrement dans la zone de préchauffage ou la réaction chimique n'a pas encore été commencée, cette faible diminution est due à la diffusion moléculaire, puis une diminution accentuant dans la zone de réaction jusqu'à l'équilibre à cause de la grande valeur de taux de réaction dans cette zone qui fait diminuer les fractions massiques des réactifs très rapidement.

Par ailleurs l'effet de la richesse apparaît essentiellement sur les valeurs massiques des réactifs. En effet, en se référant la courbe (6.15) nous constatons que la fraction massique de l'oxygène est plus élevée pour un mélange pauvre, tandis que la fraction massique de combustible la plus élevée correspond à un mélange riche.

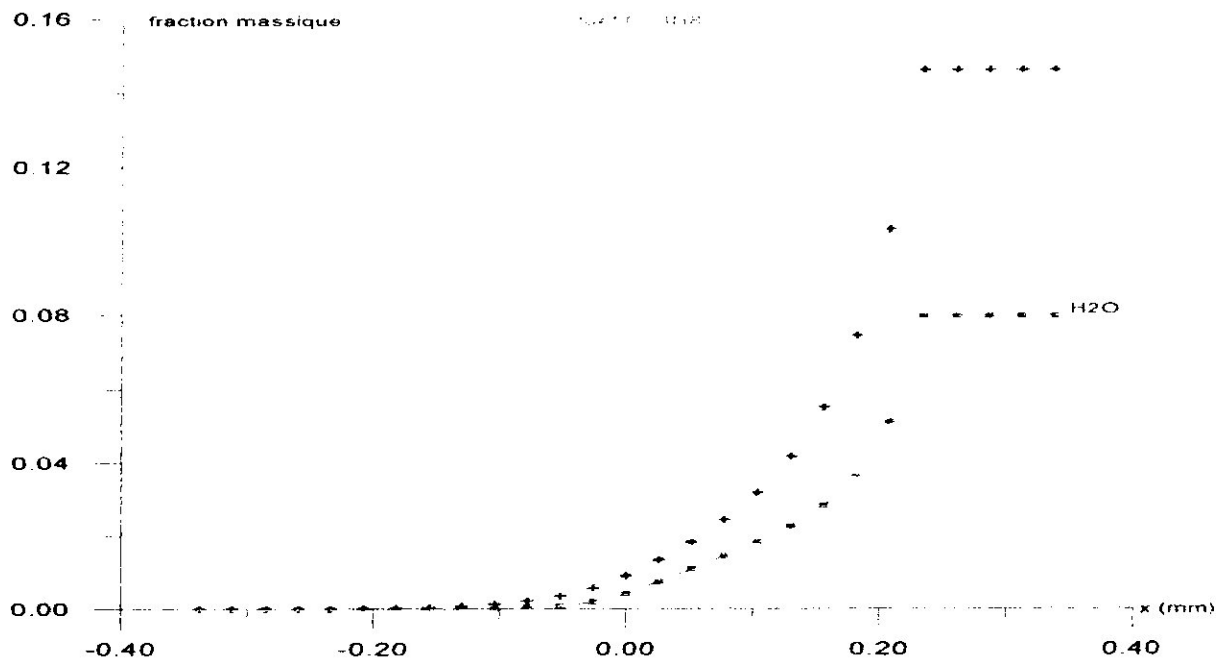


Fig. 6.16 variation de fraction massique des produits en fonction de l'abscisse (rc=0.8).

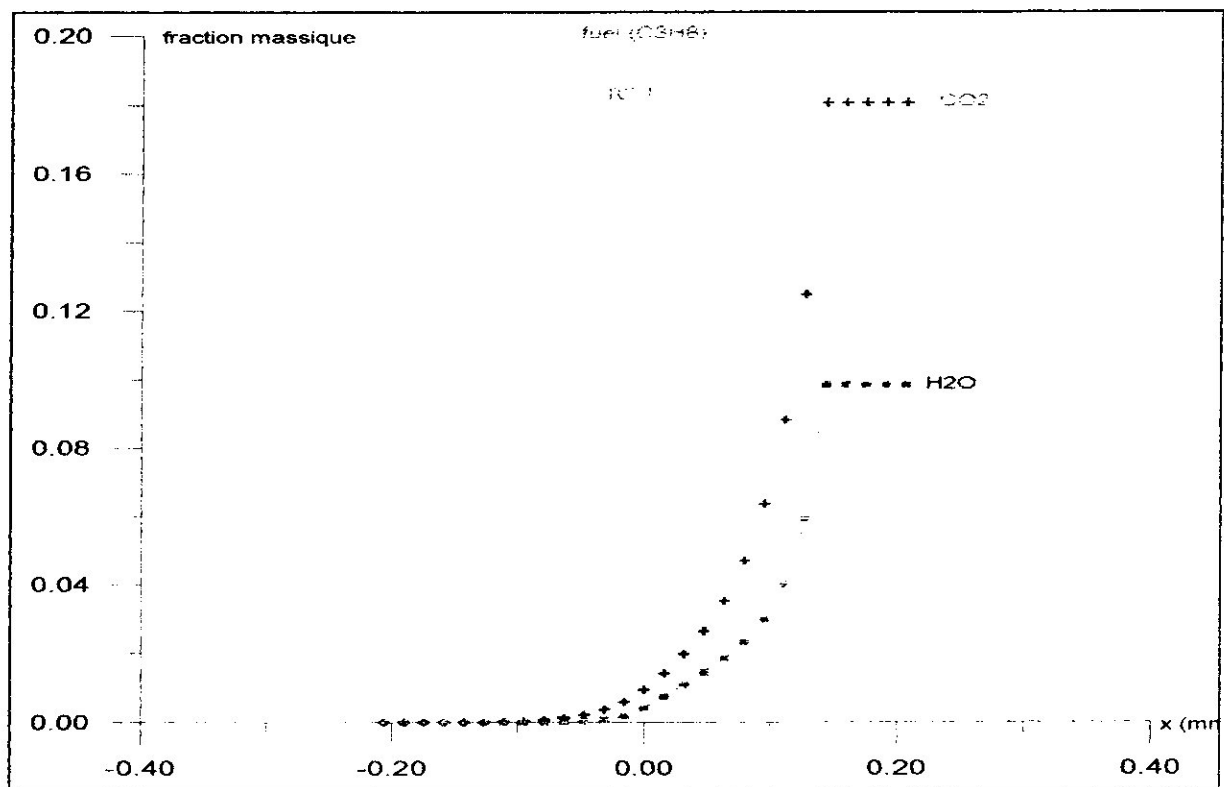


Fig. 6.17 variation de fraction massique des produits en fonction de l'abscisse.

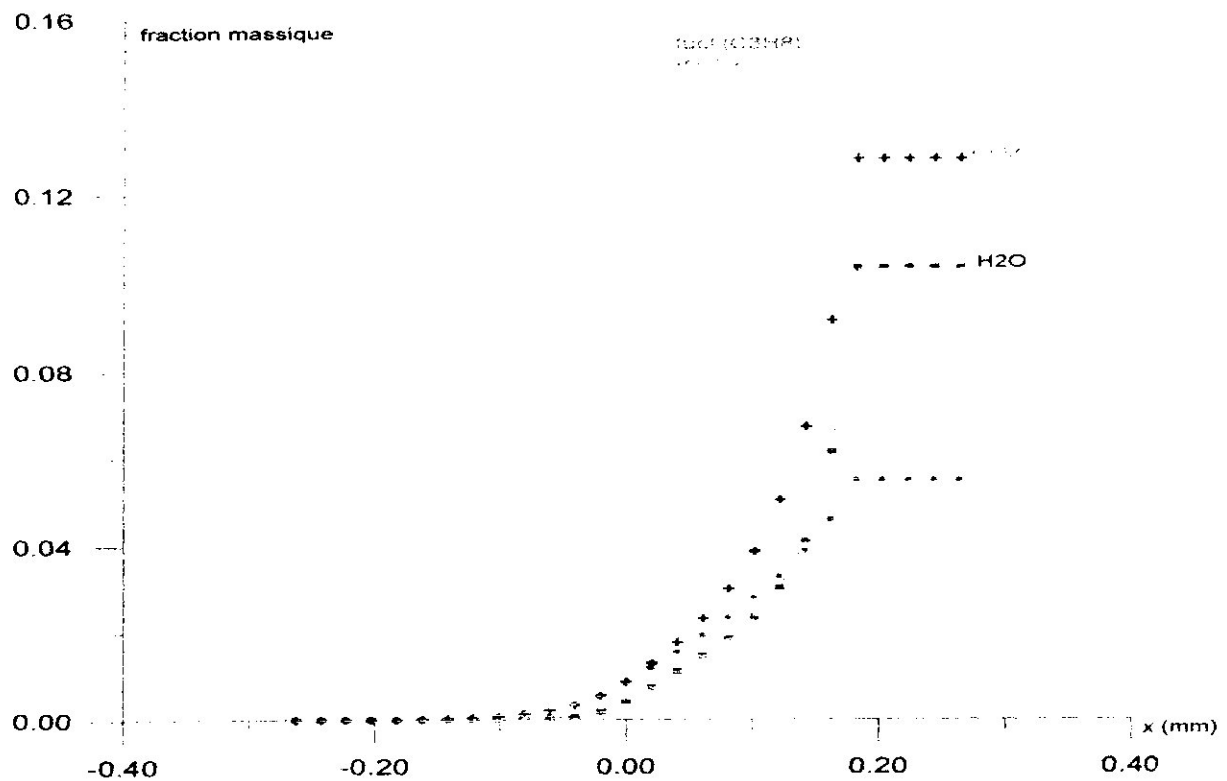


Fig. 6.18 variation de fraction massique des produits en fonction de l'abscisse.

Les figures (6.16), (6.17), (6.18) représentant respectivement la variation massique des produits pour différentes richesses, nous constatons que ces fractions massiques augmentent légèrement dans la zone de préchauffage, due essentiellement à la diffusion moléculaire dans cette région, puis dans la zone de réaction l'augmentation est très importante à cause de la valeur élevée de taux de réaction dans cette zone qui fait augmenter les fractions massiques des produits.

L'influence de la richesse apparaît essentiellement sur les valeurs finales des fractions massiques des produits, en effet la fraction massique de dioxyde de carbone la plus élevée est pour le mélange stoechiométrique, car pour les mélanges riches il y a apparition de mono oxyde de carbone ce qui est le contraire pour l'eau qui atteint sa valeur maximale pour une richesse égale à 1.2 puis diminue aussi.

D'après les trois graphes ci-dessous, on s'aperçoit l'influence directe de combustible utilisé sur la température adiabatique de la flamme. Par conséquence, il influe sur la vitesse de propagation de la flamme et au même temps sur l'épaisseur.

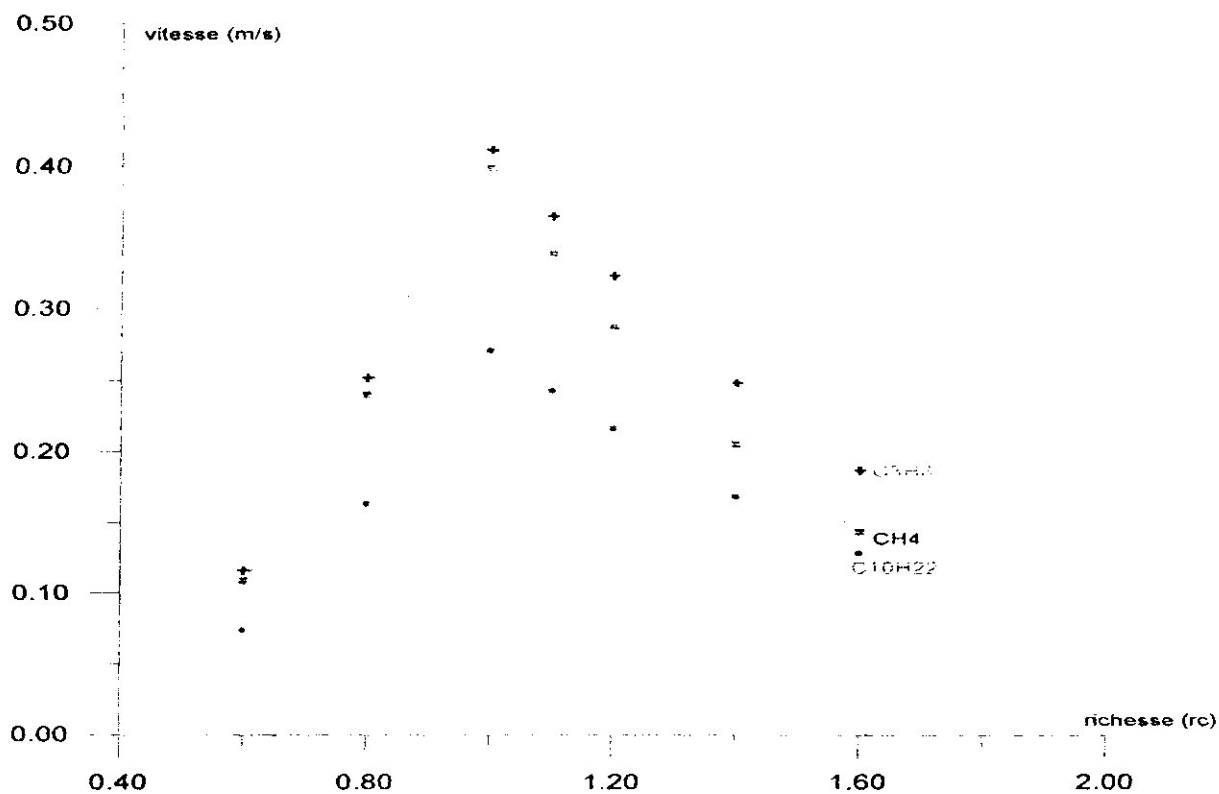


Fig. 6.19 vitesse de propagation de flamme laminaire à différentes richesses.

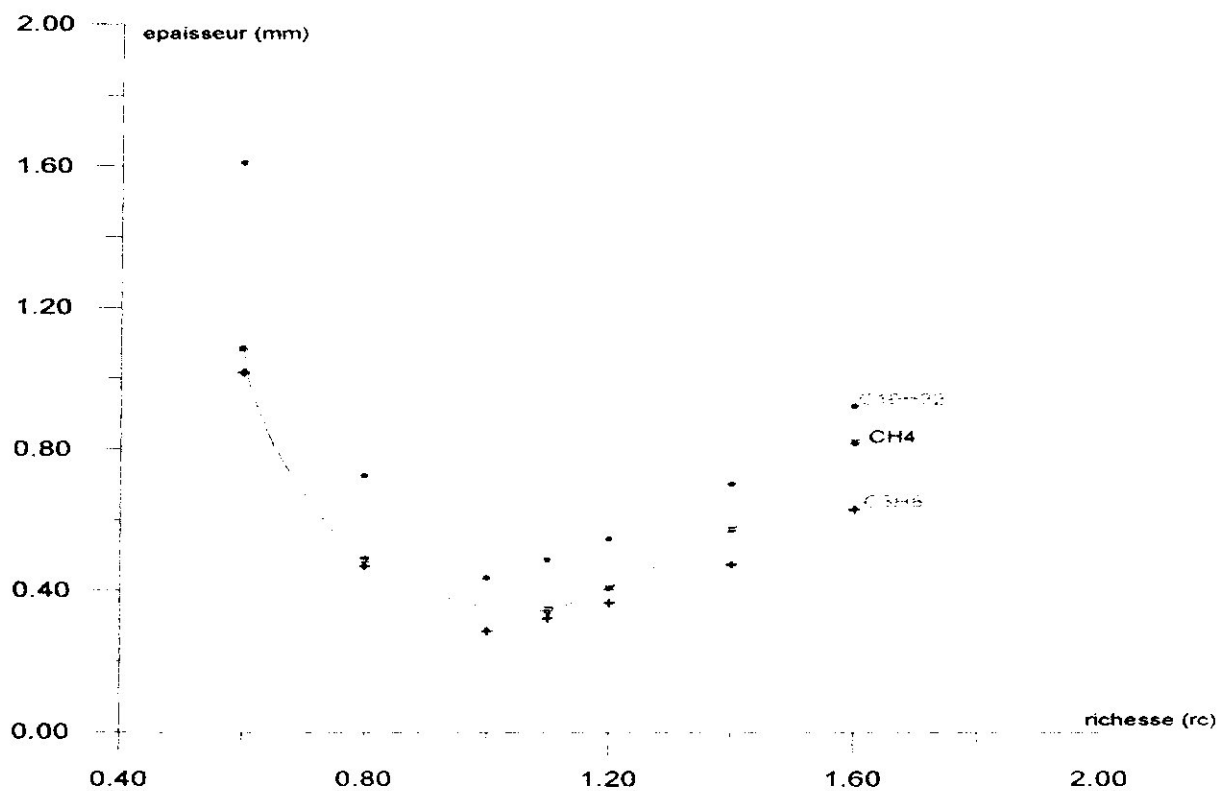


Fig. 6.21 Epaisseur de flamme laminaire à différentes richesses.

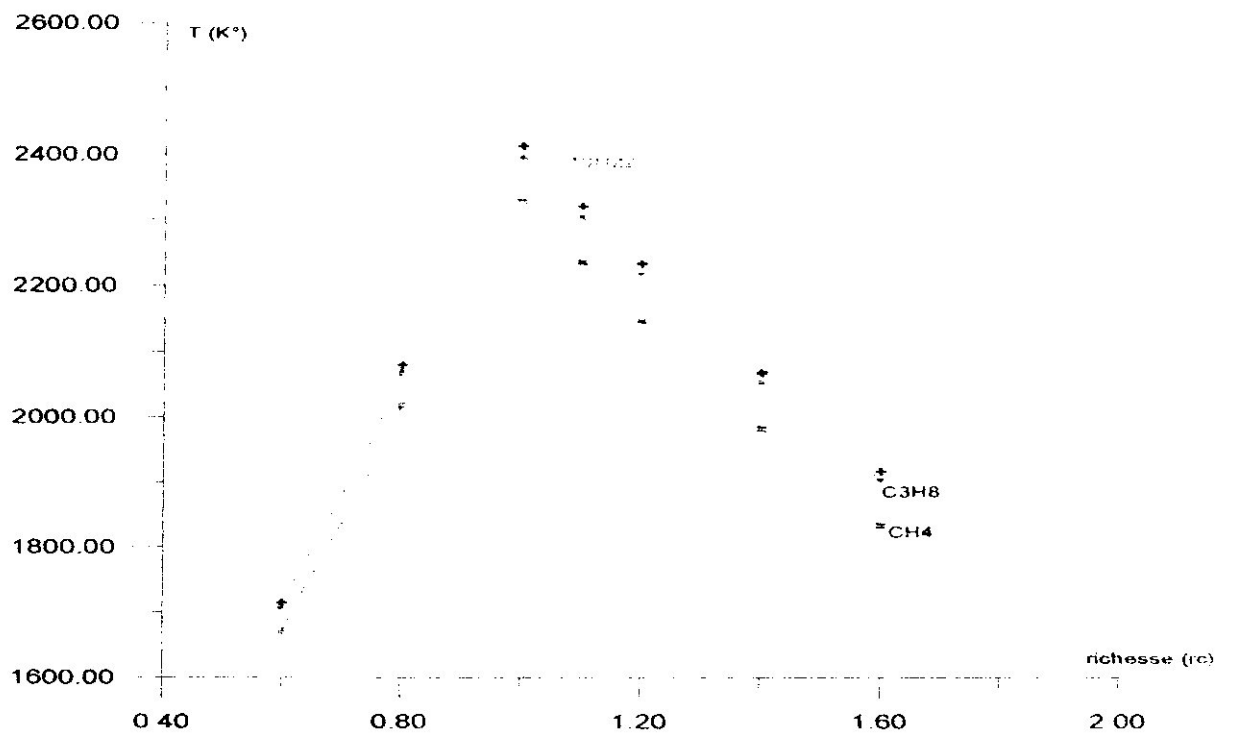


Fig.6.22 température adiabatique de la flamme à différentes richesses



# *Conclusion Générale*



## CONCLUSION GENERALE

Les flammes se produisent grâce au concours des phénomènes de réaction ainsi que de diffusion de chaleur et de masse qui se déroulent de part et d'autre de la zone réactive. Les phénomènes de convection jouent cependant un rôle plus important en amenant les réactifs et en emportant les produits de façon plus efficace que de la diffusion. Pour que la flamme reste laminaire, il faut que les vitesses d'écoulements ne soient pas trop grandes.

Notre travail s'intéresse à la théorie des flammes laminaires qui est à la base de toute étude ultérieure plus complexe qui simule d'avantage les cas rencontrés dans l'industrie (turbulence, flammes dans les brouillards de gouttelettes...etc.). Pour cette fin, on a choisi le modèle de Zeldovitch accompagné d'une cinétique chimique représentée par une réaction globale unique irréversible.

Cette application nous a permis de déterminer analytiquement la température, la vitesse et l'épaisseur de flammes laminaires prémélangées, par conséquent l'influence de la richesse sur ces derniers.

Par ailleurs une étude de la variation de la température et des fractions massiques des différentes espèces (réactifs et produits) le long de la flamme a été menée.

Les résultats obtenus pour différents combustibles ont été conformes aux prévisions théoriques. D'autre part, nous avons pu constater une approche significative quant à l'ordre de grandeur de la vitesse de front de flamme à des résultats expérimentaux.

Nous espérons que ce modeste travail servira comme base et sera bénéfique pour d'autres étudiants qui voudraient continuer dans ce domaine et soit complété par d'autres études qui tiennent compte :

- les pertes de chaleur au niveau des parois.
- des réactions élémentaires.
- la viscosité de gaz.
- l'influence des conditions initiales (pression et température).



# *Annexes*

### Les coefficients de Gordon et Mac Brid

Pour calculer l'enthalpie standard des produits de combustion, on utilise les formules et ces coefficients présentés dans le tableau ci-dessous [5] :

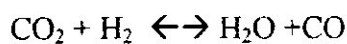
$$\bar{c}_p/R_u = a_1 + a_2T + a_3T^2 + a_4T^3 + a_5T^4 \quad (\text{cal/mol} \cdot \text{K})$$

$$\bar{h}^0/R_uT = a_1 + \frac{a_2}{2}T + \frac{a_3}{3}T^2 + \frac{a_4}{4}T^3 + \frac{a_5}{5}T^4 + \frac{a_6}{T} \quad (\text{cal/mol})$$

Espèces	a <sub>1</sub>	a <sub>2</sub>	a <sub>3</sub>	a <sub>4</sub>	a <sub>5</sub>	a <sub>6</sub>
CO <sub>2</sub>	0.04453623E+02	0.03140168E-01	-0.12784105E-05	0.02393996E-08	-0.16690333E-13	-0.04896696E+06
H <sub>2</sub> O	0.02672145E+02	0.03056293E-01	-0.08730260E-05	0.12009964E-09	-0.06391618E-13	-0.02989921E+06
N <sub>2</sub>	0.02926640E+02	0.14879768E-02	-0.05684760E-05	0.10097038E-09	-0.06753351E-13	-0.09227977E+04
O <sub>2</sub>	0.03697578E+02	0.06135197E-02	-0.12588420E-06	0.01775281E-09	-0.11364354E-14	-0.12339301E+04
CO	0.03025078E+02	0.14426885E-02	-0.05630827E-05	0.10185813E-09	-0.06910951E-13	0.14268350E+05
H <sub>2</sub>	0.02991423E+02	0.07000644E-02	-0.05633828E-06	-0.09231578E-10	0.15827519E-14	-0.08350340E+04

**Tableau 1:** les coefficients de Gordon et Mac Brid (1000 < T < 5000 (°K)).

### Équation de dissociation :



Pour calculer la constante d'équilibre, on utilise la formule suivante [5] :

$$\ln(K_p) = 2.743 - 1.761/\theta - 1.611/\theta^2 + 0.2803/\theta^3 \quad \text{et} \quad \theta = \frac{T}{1000}$$

Avec 400 < T < 3200 (°K).

Combustible	Formule	Enthalpie de formation (Kj/Kmol)	T <sub>ada</sub> (°K)	cp(kj/kg.K)	λ (w/m.K)
Methane	CH <sub>4</sub>	-74873	2226	2.225	3.42E-2
Propane	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	-103847	2267	4.6448	2.5E-2
n-decane	C <sub>10</sub> H <sub>22</sub>	-242284	2277	1.68506	1.2087E-2
Benzène	C <sub>6</sub> H <sub>6</sub>	82927	2342	-	-

**Tableau 2 :** Propriétés thermodynamiques des combustibles et température adiabatique de la flamme (mélange stoechiométrique) des combustibles dans des conditions normales (0.1Mpa et 298.15 K) [8].

Fuel	Facteur pré exponentiel $A^a$ (mole/cm <sup>3</sup> ) <sup>1-i+j</sup> *S <sup>-1</sup>	Temperature d'activation Ea/R (°K)	i	j
CH <sub>4</sub>	8.3E+05	15098	-0.3	1.3
C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	8.6E+11	15098	0.1	1.65
C <sub>10</sub> H <sub>22</sub>	3.8E+11	15098	0.25	1.5
C <sub>8</sub> H <sub>18</sub>	7.2E+12	20131	0.25	1.5
C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	1.1E+12	15098	0.1	1.65

Tableau 3: paramètre de taux de réaction pour une réaction élémentaire [8].

Gaz	Masse molaire	Cp (kj/kg.K)	$\lambda$ (W/m.K)	$\rho$ (kg/m <sup>3</sup> )
Air	29	1.186	8.09E-2	1.16
O <sub>2</sub>	32	1.125	8.71E-2	0.2960
CO	28	1.222	2.22E-2	1.25
CO <sub>2</sub>	44	1.259	2.093E-2	1.9768
H <sub>2</sub> O	18	2.6042	2.419E-2	0.577

Tableau 4 : propriétés thermiques des éléments de réaction chimique à une température moyenne 1300 (K) [9].

### Les résultats expérimentaux de la vitesse de propagation de la flamme [2]

richesse \ combustible	0.8	0.9	1	1.1	1.2
Méthane (CH <sub>4</sub> )	30	38.3	43.4	44.7	39.8
Propane (C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> )		42.3	45.6	46.2	42.3
Benzène (C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> )	39.4	45.6	47.6	44.8	40.2

Tableau 5 : vitesse (cm/s) de déflagration laminaire pour divers combustible en mélange avec l'air et pour différentes valeurs de la richesse.

**Les résultats obtenues pour le propane (C3H8)****1- comparaison de la température adiabatique de la flamme**

richesse	T(°K) [calculé]	T(°K) [6]
0.6	1706.604	1700
0.7	1891.641	1900
0.8	2067.38	2050
0.9	2234.771	2176
1	2394.593	2296

**2- Les fractions massiques des produits de combustion**

richesse	Fraction massique xco <sub>2</sub>	Fraction massique xh <sub>2</sub> o	Fraction massique xo <sub>2</sub>	Fraction massique xco	Fraction massique xh <sub>2</sub>
0.6	0.1111111	6.060606E-2	8.978675E-2	0	0
0.7	0.1288344	7.027329E-2	6.692694E-2	0	0
0.8	0.1463415	7.982261E-2	2.203857E-2	0	0
0.9	0.1636364	9.857612E-2	0.0443459	0	0
1	0.1807229	0.0892562	0	0	0
1.1	0.1515974	0.1021092	0	2.927744E-2	6.305834E-4
1.2	0.1280711	0.1034514	0	5.486384E-2	1.492409E-3
1.4	9.55898E-2	0.1004673	0	9.638941E-2	3.81023E-3
1.6	7.63104E-2	9.246077E-2	0	0.1290287	0.0066399

**3- La vitesse et l'épaisseur de la flamme**

richesse	Vitesse de la flamme (m/s)	Epaisseur de la flamme (mm)
0.6	0.1157326	1.016202
0.8	0.2516889	0.4672742
1	0.4115805	0.2857266
1.1	0.3653648	0.3218912
1.2	0.3227668	0.3643737
1.4	0.2482586	0.4737303
1.6	0.1867918	0.6296194

## 4- Les résultats de variation de la température en fonction de l'abscisse

Richesse					
0.8		1		1.2	
abscisse x (mm)	T (°K)	Abscisse x (mm)	T(°K)	Abscisse x (mm)	T (°K)
-0.3374758	300	-0.2063725	300	-0.2631588	300
-0.3115161	300	-0.1904977	300	-0.2429158	300
-0.2855564	300	-0.1746229	300	-0.2226728	300
-0.2595968	300	-0.1587481	300	-0.2024298	300
-0.2336371	300	-0.1428733	300	-0.1821869	300
-0.2076774	360.4385	-0.1269985	371.6281	-0.1619439	365.5053
-0.1817177	427.9797	-0.1111237	451.674	-0.1417009	438.7088
-0.1557581	503.4583	-9.524886E-2	541.1266	-0.1214579	520.5151
-0.1297984	587.8071	-7.937405 E-2	641.0918	-0.1012149	611.9352
-0.1038387	682.0684	-6.349924 E-2	752.8047	-8.097194E-2	714.0988
-7.787903E-2	787.4072	-4.762443 E-2	877.6461	-6.072895 E-2	828.2687
-5.191935E-2	905.1254	-3.174962 E-2	1017.159	-4.048597 E-2	955.8557
-2.595968E-2	1036.678	-1.587481 E-2	1173.067	-2.024299 E-2	1098.437
0	1183.69	0	1347.297	0	1257.773
2.595968E-2	1281.878	1.587481 E-2	1463.663	2.024299 E-2	1364.193
5.191935E-2	1380.065	3.174962 E-2	1580.029	4.048597 E-2	1470.612
7.787903E-2	1478.253	4.762443 E-2	1696.396	6.072895 E-2	1577.031
0.1038387	1576.441	6.349924 E-2	1812.762	8.097194E-2	1683.451
0.1297984	1674.629	7.937405 E-2	1929.128	0.1012149	1789.87
0.1557581	1772.817	9.524886E-2	2045.494	0.1214579	1896.289
0.1817177	1871.004	0.1111237	2161.861	0.1417009	2002.708
0.2076774	1969.192	0.1269985	2278.227	0.1619439	2109.128
0.2336371	2067.38	0.1428733	2394.593	0.1821869	2215.547
0.2595968	2067.38	0.1587481	2394.593	0.2024298	2215.547
0.2855564	2067.38	0.1746229	2394.593	0.2226728	2215.547
0.3115161	2067.38	0.1904977	2394.593	0.2429158	2215.547
0.3374758	2067.38	0.2063725	2394.593	0.2631588	2215.547

## 5- Les résultats de variation de carburant C3H8 en fonction l'abscisse

Richesse					
0.8		1		1.2	
abscisse x (mm)	YC <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	Abscisse x (mm)	YC <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	Abscisse x (mm)	YC <sub>3</sub> H <sub>8</sub>
-0.3374758	4.878049E-2	-0.2063725	6.024097E-2	-0.2631588	7.142857E-2
-0.3115161	4.878049E-2	-0.1904977	6.024097E-2	-0.2429158	7.142857E-2
-0.2855564	4.878049E-2	-0.1746229	6.024097E-2	-0.2226728	7.142857E-2
-0.2595968	4.878049E-2	-0.1587481	6.024097E-2	-0.2024298	7.142857E-2
-0.2336371	4.878049E-2	-0.1428733	6.024097E-2	-0.1821869	7.142857E-2
-0.2076774	4.878046E-2	-0.1269985	6.024094E-2	-0.1619439	7.142854E-2
-0.1817177	4.878037E-2	-0.1111237	6.024085E-2	-0.1417009	7.142846E-2
-0.1557581	4.877999E-2	-9.524886E-2	6.024046E-2	-0.1214579	7.142807E-2
-0.1297984	4.877841E-2	-7.937405 E-2	6.023889E-2	-0.1012149	7.142650E-2
-0.1038387	4.877199E-2	-6.349924E-2	6.023246E-2	-8.097194E-2	7.142007E-2
-7.787903E-2	4.874571E-2	-4.762443E-2	6.020619E-2	-6.072895 E-2	7.139380E-2
-5.191935E-2	4.86383E-2	-3.174962E-2	6.009877E-2	-4.048597 E-2	7.128638E-2
-2.595968E-2	4.819915E-2	-1.58748E-2	5.965962E-2	-2.024299 E-2	7.084722E-2
0	4.640376E-2	0	5.78642E-2	0	6.905177E-2
2.595968E-2	4.305688 E-2	1.587481E-2	5.451721E-2	2.024299 E-2	6.570468E-2
5.191935E-2	3.970952 E-2	3.174962E-2	5.11694E-2	4.048597 E-2	6.235642E-2
7.787903E-2	3.636017 E-2	4.762443E-2	4.781819E-2	6.072895 E-2	5.900340E-2
0.1038387	3.300268 E-2	6.349924E-2	4.445312E-2	8.097194E-2	5.563093E-2
0.1297984	2.961193 E-2	7.937405E-2	4.103139E-2	0.1012149	5.217895E-2
0.1557581	2.608521 E-2	9.524886E-2	3.737798E-2	0.1214579	4.840187E-2
0.1817177	2.200259 E-2	0.1111237	3.277742E-2	0.1417009	4.329570E-2
0.2076774	1.564722 E-2	0.1269985	2.430451E-2	0.1619439	3.275567E-2
0.2336371	0	0.1428733	0	0.1821869	0
0.2595968	0	0.1587481	0	0.2024298	0
0.2855564	0	0.1746229	0	0.2226728	0
0.3115161	0	0.1904977	0	0.2429158	0
0.3374758	0	0.2063725	0	0.2631588	0

## 6- Les résultats de variation de l'oxygène en fonction de l'abscisse

Richesse					
0.8		1		1.2	
abscisse x (mm)	Y <sub>O<sub>2</sub></sub>	Abscisse x (mm)	Y <sub>O<sub>2</sub></sub>	Abscisse x (mm)	Y <sub>O<sub>2</sub></sub>
-0.3374758	0.2217295	-0.2063725	0.2190581	-0.2631588	0.2164502
-0.3115161	0.2217295	-0.1904977	0.2190581	-0.2429158	0.2164502
-0.2855564	0.2217295	-0.1746229	0.2190581	-0.2226728	0.2164502
-0.2595968	0.2217295	-0.1587481	0.2190581	-0.2024298	0.2164502
-0.2336371	0.2217295	-0.1428733	0.2190581	-0.1821869	0.2164502
-0.2076774	0.2175602	-0.1269985	0.2140004	-0.1619439	0.2114482
-0.1817177	0.2129622	-0.1111237	0.2084226	-0.1417009	0.2059317
-0.1557581	0.2078913	-9.524886E-2	0.2022712	-0.1214579	0.1998479
-0.1297984	0.2022988	-7.937405 E-2	0.1954871	-0.1012149	0.1931384
-0.1038387	0.1961312	-6.349924E-2	0.1880053	-8.097194E-2	0.1857388
-7.787903E-2	0.1893292	-4.762443E-2	0.1797540	-6.072895 E-2	0.1775782
-5.191935E-2	0.1818278	-3.174962E-2	0.1706542	-4.048597 E-2	0.1685784
-2.595968E-2	0.1735548	-1.58748E-2	0.1606184	-2.024299 E-2	0.1586529
0	0.1644309	0	0.1495505	0	0.1477067
2.595968E-2	0.1545381	1.587481E-2	0.1375136	2.024299 E-2	0.1358032
5.191935E-2	0.1439719	3.174962E-2	0.1245830	4.048597 E-2	0.1230213
7.787903E-2	0.1326633	4.762443E-2	0.1106667	6.072895 E-2	0.1092681
0.1038387	0.1205359	6.349924E-2	9.566332E-2	8.097194E-2	9.444475E-2
0.1297984	0.1075054	7.937405E-2	7.946113E-2	0.1012149	7.844104E-2
0.1557581	9.347892E-2	9.524886E-2	6.193683E-2	0.1214579	6.113561E-2
0.1817177	7.835410 E-2	0.1111237	4.295441E-2	0.1417009	4.239459E-2
0.2076774	6.201795 E-2	0.1269985	2.236393E-2	0.1619439	2.207033E-2
0.2336371	4.434590 E-2	0.1428733	0	0.1821869	0
0.2595968	4.434590 E-2	0.1587481	0	0.2024298	0
0.2855564	4.434590 E-2	0.1746229	0	0.2226728	0
0.3115161	4.434590 E-2	0.1904977	0	0.2429158	0
0.3374758	4.434590 E-2	0.2063725	0	0.2631588	0



## 7- variation de fraction massique des produits en fonction de l'abscisse

richesse					
0.8			1		
X (mm)	Y <sub>CO<sub>2</sub></sub>	Y <sub>H<sub>2</sub>O</sub>	X (mm)	Y <sub>CO<sub>2</sub></sub>	Y <sub>H<sub>2</sub>O</sub>
-0.3374758	0	0	-0.2063725	0	0
-0.3115161	0	0	-0.1904977	0	0
-0.2855564	0	0	-0.1746229	0	0
-0.2595968	0	0	-0.1587481	0	0
-0.2336371	0	0	-0.1428733	0	0
-0.2076774	8.723375E-5	3.370209 E-6	-0.1269985	9.2655 E-5	3.380104 E-6
-0.1817177	2.248542 E-4	1.099128 E-5	-0.1111237	2.388281 E-4	1.102356 E-5
-0.1557581	4.419652 E-4	2.822487 E-5	-9.524886E-2	4.694317 E-4	2.830775 E-5
-0.1297984	7.844808 E-4	6.719531 E-5	-7.937405 E-2	8.332333 E-4	6.739260 E-5
-0.1038387	1.324835 E-3	1.553194 E-4	-6.349924E-2	1.407169 E-3	1.557755 E-4
-7.787903E-2	2.177302 E-3	3.545951 E-4	-4.762443E-2	2.312614 E-3	3.556362 E-4
-5.191935E-2	3.522160 E-3	8.052186 E-4	-3.174962E-2	3.741049 E-3	8.075828 E-4
-2.595968E-2	5.643814 E-3	1.824217 E-3	-1.58748E-2	5.994556 E-3	1.829573 E-3
0	8.990950 E-3	4.128484 E-3	0	9.549753 E-3	4.140605 E-3
2.595968E-2	1.337806 E-2	7.512407 E-3	1.587481E-2	1.426497 E-2	7.539828 E-3
5.191935E-2	1.836610 E-2	1.094326 E-2	3.174962E-2	1.977072 E-2	1.100527 E-2
7.787903E-2	2.430218 E-2	1.448021 E-2	4.762443E-2	2.652355 E-2	1.462046 E-2
0.1038387	3.173389 E-2	1.825712 E-2	6.349924E-2	3.524375 E-2	1.857428 E-2
0.1297984	4.152512 E-2	2.257663 E-2	7.937405E-2	4.706772 E-2	2.329383 E-2
0.1557581	5.503874 E-2	2.812312 E-2	9.524886E-2	6.378820 E-2	2.974494 E-2
0.1817177	7.442482 E-2	3.644420 E-2	0.1111237	8.823343 E-2	4.011164 E-2
0.2076774	0.1030753	5.103947 E-2	0.1269985	0.1248653	5.933268 E-2
0.2336371	0.1463415	7.982261 E-2	0.1428733	0.1807229	9.857612 E-2
0.2595968	0.1463415	7.982261 E-2	0.1587481	0.1807229	9.857612 E-2
0.2855564	0.1463415	7.982261 E-2	0.1746229	0.1807229	9.857612 E-2
0.3115161	0.1463415	7.982261 E-2	0.1904977	0.1807229	9.857612 E-2
0.3374758	0.1463415	7.982261 E-2	0.2063725	0.1807229	9.857612 E-2

## 8- variation de la fraction massique des produits de combustion en fonction de l'abscisse

Richesse 1.2			
X(mm)	Y <sub>co2</sub>	Y <sub>h2o</sub>	Y <sub>co</sub>
-0.2631588	0	0	0
-0.2429158	0	0	0
-0.2226728	0	0	0
-0.2024298	0	0	0
-0.1821869	0	0	0
-0.1619439	8.435288 E-5	3.382676 E-6	1.016993 E-4
-0.1417009	2.174285 E-4	1.103195 E-5	2.561010 E-4
-0.1214579	4.273694 E-4	2.832929 E-5	4.905164 E-4
-0.1012149	7.585736 E-4	6.744390 E-5	8.464098 E-4
-8.097194E-2	1.281083 E-3	1.558940 E-5	1.386733 E-3
-6.072895 E-2	2.105398 E-3	3.559069 E-4	2.207062 E-3
-4.048597 E-2	3.405841 E-3	8.081974 E-4	3.452499 E-3
-2.024299 E-2	5.457429 E-3	1.830965 E-3	5.343343 E-3
0	8.694028 E-3	4.143757 E-3	8.214056 E-3
2.024299 E-2	1.290675 E-2	7.546957 E-3	1.176543 E-2
4.048597 E-2	1.761968 E-2	1.102139 E-2	1.542285 E-2
6.072895 E-2	2.312174 E-2	1.465692 E-2	1.924129 E-2
8.097194E-2	2.986875 E-2	1.865673 E-2	2.330418 E-2
0.1012149	3.857978 E-2	2.348028 E-2	2.773821 E-2
0.1214579	5.038926 E-2	3.016656 E-2	3.273569 E-2
0.1417009	6.708689 E-2	4.106506 E-2	3.858863 E-2
0.1619439	9.149609 E-2	6.148865 E-2	4.574033 E-2
0.1821869	0.1280711	0.1034514	5.486384 E-2
0.2024298	0.1280711	0.1034514	5.486384 E-2
0.2226728	0.1280711	0.1034514	5.486384 E-2
0.2429158	0.1280711	0.1034514	5.486384 E-2
0.2631588	0.1280711	0.1034514	5.486384 E-2

## Les résultats obtenues pour le méthane (CH<sub>4</sub>)

### 1- Température adiabatique de fin de combustion

richesse	T (°K)
0.6	1670.203
0.7	1848.144
0.8	2016.487
0.9	2176.212
1	2328.132
1.1	2234.715
1.2	2146.407
1.4	1982.894
1.6	1833.137

### 2- Les fractions massiques des produits de combustion

richesse	Fraction massique xCO <sub>2</sub>	Fraction massique xH <sub>2</sub> O	Fraction massique xO <sub>2</sub>	Fraction massique xCO	Fraction massique xH <sub>2</sub>
0.6	0.0929054	7.601351E-2	9.009009E-2	0	0
0.7	0.1077828	8.818589E-2	6.718925E-2	0	0
0.8	0.1224944	0.1002227	4.454343E-2	0	0
0.9	0.1370432	0.1121262	2.214839E-2	0	0
1	0.1514317	0.1238987	0	0	0
1.1	0.1248536	0.1275927	0	2.59693E-2	8.83269E-4
1.2	0.1050176	0.1286069	0	4.754972E-2	2.050214E-3
1.4	8.025669E-2	0.1247647	0	8.093187E-2	4.995014E-3
1.6	6.711793E-2	0.1164659	0	0.1065423	8.381305E-3

### 3- La vitesse et l'épaisseur de la flamme

richesse	Vitesse de la flamme (m/s)	Epaisseur de la flamme (mm)
0.6	0.109206	1.07693
0.8	0.242055	0.4858704
1	0.401637	0.2928209
1.1	0.4317564	0.3441274
1.2	0.290028	0.4055148
1.4	0.2066664	0.569074
1.6	0.1443582	0.8146936

**Les résultats obtenues pour le n-decane (C<sub>10</sub>H<sub>22</sub>)****1-Température adiabatique de fin de combustion**

richesse	T (°K)
0.6	1714.438
0.8	2079.774
1	2412.305
1.1	2320.485
1.2	2232.603
1.4	2068.161
1.6	1916.681

**2- La vitesse et l'épaisseur de la flamme**

richesse	Vitesse de la flamme (m/s)	Epaisseur de la flamme (mm)
0.6	7.318833E-2	1.606919
0.8	0.1627095	0.7228082
1	0.2706047	0.434618
1.1	0.242289	0.4854026
1.2	0.21565662	0.5453482
1.4	0.1679558	0.7002302
1.6	0.1276398	0.9214029



```
! calcul de l'enthalpie des produits de combustion en cal mole
! precision epsilon
eps=1.d-04
! l'intervalle de la temperature
T1=1000
T2=3000
2005 continue
call enthalpie(T1)
Hpt1=Hproduit
call enthalpie(T2)
Hpt2=Hproduit
!
! verification si la temperature de combustion appartient à [T1,T2]
if(((Hpt1-Hreactif)*(Hpt2-Hreactif)).gt.0) then
read(*,*)T1
read(*,*)T2
goto 2005
endif
2006 continue
!
! valeur initiale de la temperature Tp
Tp=(T1+T2)/2.D0
! calcul de l'enthalpie standard des produits à la temperature Tp
call enthalpie(Tp)
Htm=Hproduit
!
! reduction de l'intervalle [T1,T2]
if(((Hpt1-Hreactif)*(Htm-Hreactif)).gt.0) then
T1=Tp
else
T2=TP
endif
if(abs(T1-T2).gt.eps) then
goto 2006
else
!
! affichages des resultats
write(*,*)'les fractions des produits'
write(*,*)'xco2=',xco2
write(*,*)'xh2o=',xh2o
write(*,*)'xn2=',xn2
write(*,*)'xo2=',xo2
write(*,*)'xco=',xco
write(*,*)'xh2=',xh2
write(*,*)'nt=',nt
!
write(*,*)' la temperature de fin de combustion Tc=',Tp
endif
```

```
! calcul la vitesse de la flamme
!
```

```
Tm=0.5d0*((0.5d0*(Te+Tp))+Tp)
write(*,*)'Tm=',Tm
```

```
mu=137.28d0*(n+m/4.d0)/(12.d0*n+m)
Yf=rc/(2.d0*(rc+mu))
Yo2=(1-Yf)*0.233d0*0.5d0
write(*,*)'Yf=',Yf,' ',Yo2=',Yo2'
```

```
rhom=((101325*29)/(8315*Tm))
write(*,*)'rhom(kg/m3)=' ,rhom
```

```
Ke=A*exp(-15098.d0/Tm)
write(*,*)'Ke((kmol/m3)l-i-j*(1/s))=',Ke
```

```
wf=Ke*rhom**(i+j)*(Yf/(12.d+02*n+m))**i*(Yo2/32.d0)**j
wf=-12.d0*n+m*wf
write(*,*)'wf(Kg/s.m3)=' ,wf
```

```
Dt=lenda/(1.16d0*Cp)
write(*,*)'Dt(m2/s)=' ,Dt
```

```
Sl=(-2.d0*Dt*(mu+1.d0)*wf/1.16d0)**(0.5d0)
write(*,*)'la vitesse de la flamme Sl(m/s)=' ,Sl
```

```
! calcul epaisseur de la flamme
```

```
delta=2.d0*Dt/Sl
```

```
write(*,*)'l epaisseur de la flamme delat(m)=' ,delta
```

```
stop
end
```

## SUBROUTINE de calcul l'enthalpie des produits

```
subroutine enthalpie(x)
```

```
IMPLICIT NONE
```

```
real(8) x,HCO2,HH2O,HN2,HO2,HCO,HH2,R,n,m,rc,Htpauvre,Htriche,Hts
```

```
real(8) Hproduit,x1,n1,n2,n3,n4,n5,n6,nt,Kp,a1,b1,c1,s,xco2,xh2o
```

```
+,xn2,xo2,xco,xh2
```

```
common/temperature/Htpauvre,Htriche,Hts,R,rc,n,m,Hproduit,n1,n2,n3
```

```
+,n4,n5,n6,nt,xco2,xh2o,xn2,xo2,xco,xh2
```

```
R=1.98719d0
```

```
HCO2=(4.4608041d0+(3.0981719d-03*x)/2.d0-(1.2392571d-06
+*x**2)/3.d0+(2.2741325d-10*x**3)/4.d0-(1.5525954d-14*x**4)/5.d0
+-(4.8961442d+04/x))*R*x
```

```
HH2O=(2.7167633d00+(2.9451374d-03*x)/2.d0-(8.0224374d-07
+*x**2)/3.d0+(1.0226668d-10*x**3)/4.d0-(4.8472145d-15*x**4)/5.d0
+-(2.9905826d+04/x))*R*x
```

```
HN2=(2.8963194d+00+(1.5154866d-03*x)/2.d0-(5.7235277d-07
+*x**2)/3.d0+(9.9807393d-11*x**3)/4.d0-(6.5223355d-15*x**4)/5.d0
+-(9.0586184d+02/x))*R*x
```

```
HO2=(3.6219535d+00+(7.3618264d-04*x)/2.d0-(1.9652228d-07
+*x**2)/3.d0+(3.6201558d-11*x**3)/4.d0-(2.8945627d-15*x**4)/5.d0
+-(1.2019825d+03/x))*R*x
```

```
HCO=(2.9840696d+00+(1.4891390d-03*x)/2.d0-(5.7899684d-07
+*x**2)/3.d0+(1.0364577d-10*x**3)/4.d0-(6.9353550d-15*x**4)/5.d0
+-(1.4245228d+04/x))*R*x
```

```
HH2=(3.1001901d+00+(5.1119464d-04*x)/2.d0+(5.2644210d-08
+*x**2)/3.d0-(3.4909973d-11*x**3)/4.d0+(3.6945345d-15*x**4)/5.d0
+-(8.7738042d+02/x))*R*x
```

```
IF (rc.eq.1.d0) then
```

```
n1=n
```

```
n2=0.5d0*m
```

```
n3=3.76d0*(n+m/4.d0)
```

```
n4=0.d0
```

```
n5=0.d0
```

```
n6=0.d0
```

```
nt=44.d0*n1+18.d0*n2+n3*28.d0+n4*32.d0+n5*28.d0+n6*2.d0
```

```
xco2=n1*44.d0/nt
```



```
xh2o=n2*18.d0/nt
  xn2=n3*28.d0/nt
  xo2=n4*32.d0/nt
  xco=n5*28.d0/nt
  xh2=n6*2.d0/nt
Hts=n1*HCO2+n2*HH2O+n3*HN2
  Hproduit=Hts
  else
  if(rc.LT.1) then
  n1=rc*n
  n2=0.5d0*m*rc
  n3=3.76d0*(n+m/4.d0)
  n4=(n+m/4.d0)*(1-rc)
  n5=0.d0
  n6=0.d0
  nt=44.d0*n1+18.d0*n2+n3*28.d0+n4*32.d0+n5*28.d0+n6*2.d0
  xco2=n1*44.d0/nt
  xh2o=n2*18.d0/nt
  xn2=n3*28.d0/nt
  xo2=n4*32.d0/nt
  xco=n5*28.d0/nt
  xh2=n6*2.d0/nt
  Htpauvre=n1*HCO2+n2*HH2O+n3*HN2+n4*HO2
  Hproduit=Htpauvre
  else
s=x/1000.d0
  x1=2.743d0-1.761d0/s-1.611d0/s**2.d0+0.2803d0/s**3.d0
  Kp=exp(x1)
  a1=1.d0-Kp
  b1=2.d0*(n+m/4.d0)*(1.d0+Kp*(rc-1.d0))+n*rc*(Kp-2.d0)
  c1=-Kp*n*rc*2.d0*(n+m/4.d0)*(rc-1.d0)
  n5=0.5d0*(-b1+(b1**2.d0-4.d0*a1*c1)**0.5d0)/a1
  n2=2.d0*(n+m/4.d0)-2.d0*n*rc+n5
  n3=3.76d0*(n+m/4.d0)
  n4=0.d0
  n1=n*rc-n5
  n6=2.d0*(n+m/4.d0)*(rc-1.d0)-n5
  nt=44.d0*n1+18.d0*n2+n3*28.d0+n4*32.d0+n5*28.d0+n6*2.d0
  xco2=n1*44.d0/nt
  xh2o=n2*18.d0/nt
  xn2=n3*28.d0/nt
  xo2=n4*32.d0/nt
  xco=n5*28.d0/nt
  xh2=n6*2.d0/nt
  Htriche=n1*HCO2+n2*HH2O+n3*HN2+n5*HCO+n6*HH2
  Hproduit=Htriche
  endif
  endif
  return
  end
```

## Références bibliographiques

- [1] HENNI MANSOUR ZOUBIR  
COURE DE THERMODYNAMIQUE- ENERGETIQUE  
Université de Blida 2003.
- [2] TECHNIQUE DE L'IGENIEURE B-8315 11-1995ET BE 8320 4-1999.
- [3] DEBBI Med ET KACEDALL BILLEL  
Elaboration d'un programme de calcule de la température de combustion et la composition molaire des produits de combustion d'un hydrocarbure ( $C_nH_m$ ).  
application à la combustion de kérosène  $C_{10,3}H_{20,6}$  et gasoil  $C_{14,4}H_{24,9}$   
Promoteur Mr. HENNI Mansour Zoubir (2004).
- [4] ROLAND BORGHI ET MICHEL CHAMPION  
Modélisation et théorie des flammes  
Edition tchnip paris 2000.
- [5] COLIN R. FERGUSON ET ALLAN T. KIRKPATRICK  
Internal combustion engines applied thermo-sciences  
Colorado state university.
- [6] R. BORGHI, M.DESTRIAU ET GERAD DE SOETE  
La combustion et les flammes  
Edition tchnip paris 1995.
- [7] G. DE SOETE ET A. FEUGIER  
Aspect physique et chimique de la combustion  
Institut français du pétrole recherche et témoignages  
Edition tchnip 1976.
- [8] STEPHEN R. TURNS  
An introduction to combustion concepts and application.  
mc graw-hill, inc 1996.
- [9] KUZMAN RAZNJVIC  
Tables et diagramme thermodynamique  
Edition Eyrolles 1970.