

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE

MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEURE
ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

UNIVERSITE DE BLIDA

FACULTE DES SCIENCES DE L'INGENIEUR

DEPARTEMENT D'AERONAUTIQUE



Mémoire de Fin d'Etude

EN VUE DE L'OBTENTION DU DIPLOME D'INGENIEUR
D'ETAT EN AERONAUTIQUE

OPTION : PROPULSION

Thème :

ELABORATION D'UN PROGRAMME
DE CALCUL DE LA TEMPERATURE
DE COMBUSTION ET LA
COMPOSITION MOLAIRE DES
PRODUITS DE COMBUSTION
D'UN HYDROCARBURE C_nH_m
APPLICATION A LA COMBUSTION :
KEROSENE $C_{10.3}H_{20.6}$
GASOIL $C_{14.4}H_{24.9}$

Promoteur :

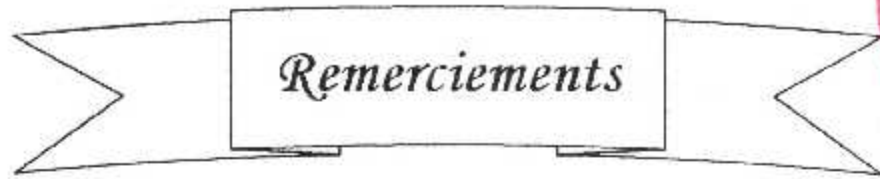
Mr. HENNI MANSOUR ZOUBIR



Présenté par :

Mr. DEBBI MOHAMED
Mr. KACEDALI BILLEL

PROMOTION 2004



Remerciements



Nous tenons à remercier le bon Dieu le tout puissant de nous avoir attribué la faveur de réussir nos études.

Nous tenons à remercier notre promoteur Mr. Henni Mansour Zoubir pour son constant suivi, son aide et ces précieux conseils, qui nous ont beaucoup aidé à ce modeste travail.

Nous remercions également tous les enseignants de l'institut d'aéronautique qui ont contribué à notre formation, tous nos amis et camarades de la promotion ainsi à tous qui ont collaboré de près ou de loin à la réalisation de ce projet.

Mes remerciements s'adresse aux membres de jury qui nous font l'honneur de bien juger ce travail.

Dedicace

Je dédie ce modeste travail à mes parents, mes frères Mostafa, Habib, Youssef, Ishak et mes sœurs Fatima, Souhila et Khadidja, ainsi à mes neveux et nièces et toute ma famille.

Je le dédie également à tous mes amis spécialement Adel, Abdou, Doraid, Hani, Halim, Rafik, Tarek, Morade, et tous mes collègues de l'université spécialement Meghzi, Laabassi, Saidoun, Said, Ali, Omar, Mokhtar, Nadir, Chouaib, Oualid, Issam ...

Je le dédie également à mon agréable binôme Bilal et à tous le groupe « Aero » de la peomotion 2004.



Mohamed

Dedicace

Je dédie ce modeste travail :

A mes deux chers parents : ma mère Fatmazohra, et mon père Sadek, symboles d'amour et de sacrifices pour leurs soutien moral durant mes longues années d'études. Je leurs souhaite de dieu tout puissant, une longue vie pleine de bonheur et de prospérité.

A ma chère sœur Soumeya, et mon frère Abdelmadjid.

A la famille Kacedali et à la famille Aouffen.

A mes chers amis Oulelyahin Mohamed, Galem Brahim, Benharkat Brahim, Rabah, Miloud, Mhamed.

A mon agréable binôme Mohamed et sa famille.

A tous mes amis de la promotion 2004.

Billel

NOTATION

SYMBOLE	DESIGNATION	UNITE
C_p	Chaleur spécifique à pression constante	Cal/mole °K
C_v	Chaleur spécifique à volume constant	Cal/mole °K
G	Enthalpie libre	Cal/mole
H	Enthalpie standards	Cal/mole
H_A	Enthalpie du mélange frais	Cal/mole
H_B	Enthalpie des gaz brûlés	Cal/mole
K_p	Constante d'équilibre	--
M	La masse molaire	g/mole
n	Nombre de mole	mole
N_t	Nombre de mole totale	mole
p	Pression	atm
P_{c_i}	Pouvoir calorifique inférieur	Kcal/Kg
P_{c_s}	Pouvoir calorifique supérieur	Kcal/Kg
Q	Chaleur libérée par la combustion	Cal/mole
Q_p	Chaleur de réaction à pression constante	Cal/mole
Q_v	Chaleur de réaction à volume constant	Cal/mole
R	Constante universelle des gaz parfait	Cal/mole °K
r_c	La richesse	--
S	Entropie molaire	Cal/mole °K
T_a	Température d'entrée d'air	°K
T_c	Température de combustion	°K
T_e	Température d'injection du carburant	°K
U	Energie interne	Cal/mole
x_i	Fraction molaire	--
α	Degré de dissociation	--
γ	Rapport de chaleurs spécifique	--
λ	Coefficients d'excès d'air	--
$(\Delta H_f)^{298^\circ}$	Enthalpie de formation à 298 °K	Cal/mole
ΔH_R	Enthalpie de réaction	Cal/mole
$[\Delta H]_{T_0}^{T_1}$	Enthalpie sensible de T_0 à T_1	Cal/mole

SOMMAIRE

INTRODUCTION	1
CHAPITRE I : GENERALITES ET DIFINITIONS	
I.1 LES COMBUSTIBLES	3
I.1.1 Définition	3
I.1.2 Caractéristiques des combustibles Viscosité – Distillation - Point d'écoulement - Point d'éclair - Densité - Pression de vapeur.	3
I.1.3 Carburants utilisés	4
I.1.3.1 Carburéacteur (Kérosène) Distillation – Densité - Tension de vapeur - Teneur en aromatiques - Point de congélation - Teneur en eau	4
I.1.3.2 Gasoil moteur Distillation - Densité - Viscosité - Indice de cétane - Point d'écoulement et teste de filtrabilité - Teneur en cendres - Teneur en eau - Teneur en soufre	6
I.1.3.3 Essence Indice d'octane - Volatilité	8
I.1.3.4 Gaz de pétrole liquéfié (GPL)	9
I.1 ETUDE DE LA FLAMME	10
I.1.1 L'auto inflammation	10
I.1.1.1 Inflammation chimique	10
I.1.1.2 Inflammation thermique	10
I.1.2 Limites d'inflammabilité	11
I.1.3 Propagation de la flamme	11
I.1.3.1 Propagation en subsonique (La déflagration)	12
I.1.3.2 Propagation en supersonique (La détonation)	12
I.1.4 Vitesse de la flamme	13
I.1.5 Stabilité de la flamme	13

CHAPITRE III : THEORIE DE CALCUL DE LA TEMPERATURE DE COMBUSTION D'UN HYDROCARBURE C_nH_m

III.1 INTRODUCTION	34
III.2 CALCUL DE LA TEMPERATURE DE FIN DE COMBUSTION	35
III. 2.1 Combustion à pression constante	35
III.3 CALCUL DE L'ENTHALPIE DES REACTIFS	36
III. 3.1 Calcul de l'enthalpie du combustible	36
III. 3.2 Calcul de l'enthalpie de l' air	37
III.4 CALCUL DE L'ENTHALPIE DES PRODUITS	38
III .4.1 Equations d'équilibre des réactions de dissociation	39
III .4.2 Bilan des atomes	40
III .4.3 Equation de nombre de moles totale	40
III.4.4 Détermination des constantes d'équilibre $Kp_k(t)$ pour T_1, T_2	41
III. 4.5 Calcul des Enthalpies des réactions d'équilibre	42
III. 4.6 Calcul des Entropies absolues des réactions d'équilibre	43
III.4.7 La méthode de résolution du système d'équations	44
III. 4.7.1 Principe de la méthode de Newton	44
III.4.7.2 Application de la méthode de Newton	46
III .4.8 Calcul de l'enthalpie des produits de combustion	47
III.5 CALCUL DE LA TEMPERATURE DE COMBUSTION PAR LA METHODE DE DICHOTOMIE	48
CHAPITRE IV : ORGANIGRAMME ET PROGRAMME	
IV.1 ORGANIGRAMME	49
IV.1 PROGRAMME	58
CHAPITRE V : RESULTATS ET INTERPRITATIONS	
V.1 ANALYSE DES RESULTATS	70
V.1.1 Evolution de la température de combustion en fonction de la richesse	70
V.1.2 Evolution de la température de combustion en fonction de la température d'entrée d'air	70
V.1.3 Evolution de la composition molaire des produits de combustion	

	en fonction de la température de combustion	70
V.1.4	Evolution de la composition molaire des produits de combustion en fonction de la richesse	71
V.1.5	Evolution de la composition molaire des produits de combustion en fonction de la température d'entrée d'air	71
V.1.6	Analyse des exemples	71
V.2	L'INFLUENCE DE LA RICHESSE ET LA TEMPERATURE D'ENTREE D'AIR SUR LA TEMPERATURE DE FIN DE COMBUSTION	72
V.2.1	Influence de la richesse sur la température de combustion	72
V.2.2	Influence de la richesse sur la température de combustion	73
V.3	L'INFLUENCE DE LA TEMPERATURE DE COMBUSTION, LA TEMPERATURE D'ENTREE D'AIR ET LA RICHESSE SUR LA COMPOSITION MOLAIRE DES PRODUITS DE COMBUSTION	74
V.3.1	Influence de la température de combustion sur la composition molaire des produits de combustion	74
V.3.2	Influence de richesse sur la composition molaire des produits de combustion	76
V.3.3	Influence de la température d'entrée d'air sur la composition des produits de combustion	78
V.4	EXECUTION DU PROGRAMME	82
V.4.1	Kérosène	82
V.4.2	Gasoil	86
	CONCLUSION	90
	ANNEXES	91
	Annexe 1 : La méthode de Newton	91
	Annexe 2 : Coefficients de Gordon & Mc Bride	92
	Annexe 3 : Tables des fonctions thermodynamiques	94
	Annexe 4 : Constantes d'équilibre	105
	BIBLIOGRAPHIE	112

INTRODUCTION

Les besoins énergétiques du monde actuel sont couverts, à raison d'environ 85 %, par la mise en oeuvre du potentiel chimique des réserves en combustibles naturels (principalement houille et pétrole) ; l'énergie hydraulique n'intervient que pour 10 % et l'énergie nucléaire pour 5 %.

La conversion de l'énergie chimique dans la production des diverses formes d'énergie directement utilisable (énergie électrique, énergie mécanique, lumière, etc...) comporte encore à l'heure actuelle, dans l'énorme majorité des cas, le passage par la production de chaleur assurée par la combustion vive du charbon ou des diverses fractions d'hydrocarbures extraits du pétrole brut.

La combustion est une réaction d'oxydation d'un réactif réducteur appelé combustible, par un réactif oxydant qu'on désigne par le terme comburant. Dans la plupart des cas, le comburant est l'oxygène de l'air bien que d'autres corps chimiques tels que protoxyde d'azote, fluor ou chlore, peuvent être utilisés comme oxydant dans des applications spéciales.

Les combustibles les plus courants sont des substances organiques parmi lesquelles les hydrocarbures tiennent une large place.

Les produits de ces réactions sont essentiellement le gaz carbonique et la vapeur d'eau.

La connaissance des propriétés thermodynamiques des produits de combustion et la détermination de leur état immédiatement après la réaction chimique, revêtent une importance essentielle dans l'étude des performances des machines thermiques.

L'objectif de cette étude est d'élaborer un programme permettant de calculer la température de combustion et la composition molaire des produits de combustion lors d'une combustion complète d'un hydrocarbure C_nH_m avec l'air en utilisant la méthode de Newton.

Et comme application, nous avons choisi comme combustible, le gasoil alimentant les moteurs alternatifs à piston (moteur Diesel) et le kérosène alimentant les moteurs rotatifs (turboréacteurs et turbopulseurs dans le cas des avions).

Il a été jugé utile de commencer cet exposé par quelques notions élémentaires sur les différents types de combustibles largement utilisés dans notre vie quotidienne comme le gasoil et le kérosène. Et on a parlé aussi sur la flamme et ses caractéristiques comme sa propagation, sa vitesse et sa stabilité.

Le second chapitre traite la théorie de la combustion des hydrocarbures, et le phénomène de dissociation qui influe directement sur la température de fin de combustion.

Le troisième chapitre est consacré en premier lieu aux calculs de la composition molaire des produits de combustion. Pour la résolution du système d'équation non linéaires notamment les équations d'équilibres, on a opté pour une méthode précise et puissante, il s'agit de la méthode de Newton. Pour le calcul de la température finale de combustion, nous avons choisi la méthode de Dichotomie.

Un quatrième chapitre a été consacré pour l'organigramme et le programme élaboré.

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

En fin, une conclusion termine notre étude.

Chapitre I

Généralités
et
définitions

I.1 LES COMBUSTIBLES :

I.1.1 Définition :

Substances dont la combustion fournit l'énergie nécessaire aux moteurs thermiques (moteur à allumage commandé, moteur diesel, moteur d'avion). Un carburant est un mélange de plus de 300 hydrocarbures différents issus du raffinage. On peut distinguer deux grandes catégories de carburant : les essences et les distillats, à savoir le gasoil et le kérosène.

I.1.2 Caractéristiques des combustibles :

A. Viscosité :

La viscosité d'un liquide est la résistance qu'opposent ses molécules à une force tendant à les déplacer les unes par rapport aux autres, elle mesure les frottements internes. La viscosité décroît lorsque la température s'élève.

B. Distillation :

La distillation consiste à chauffer un liquide jusqu'à son point d'ébullition puis à condenser les vapeurs produites en repérant la température pour différents volumes condensés.

C. Point d'écoulement :

Le point d'écoulement est la température la plus basse à la quelle le liquide peut encore couler, après avoir été refroidi dans les conditions normales.

D. Point d'éclair :

Les hydrocarbures dégagent à leur surface, bien avant leur température de combustion de petites quantités de vapeurs qui sont susceptibles de prendre feu au contact d'une flamme.

Le point d'éclair d'un hydrocarbure est la température minimale à la quelle il doit être porté pour les vapeurs émises s'enflamment en présence d'une flamme.

E. Densité :

La densité est le rapport du poids d'un certain volume d'échantillon à une température t au poids du même volume d'eau à une température standard. Le choix de l'état standard à 4° C permet l'identification des chiffres qui mesurent

la densité et la masse volumique. La densité légale en France se mesure à 20° C et a pour symbole :

$$d_4^{20} = \frac{\text{poids d'un volume de produit à } 20^\circ}{\text{poids du même volume d'eau à } 4^\circ}$$

(2)

Dans les pays anglo-saxons, la specific gravity est définie pour deux températures standards identiques, soit 60° F (15 °C), et a pour symbole : sp.gr. ou sp.gr. 60/60° F.

Les américains utilisent également pour mesurer la densité, le degré A.P.I. défini par l'*American petroleum institute*, comme une fonction hyperbolique de la specific gravity :

$$^\circ A.P.I. = \frac{141,5}{\text{sp.gr. } 60/60^\circ F} - 131,5$$

F. Pression de vapeur :

La pression de vapeur est la pression sous laquelle le corps placé seul à une température donnée constante, est en équilibre avec sa vapeur. Autrement dit, c'est la pression sous laquelle le liquide bout (ou encore le solide se sublime), à la température considérée.

I.1.3 Carburants utilisés :

exemple des carburants utilisés ;

(5)

I.1.3.1 Carburacteur (Kérosène) :

L'apparition et le développement de l'aviation à réaction ont ouvert un nouveau débouché à cette coupe C₁₀ - C₁₄, encore appelée kérosène. Les spécifications françaises ne font que reproduire celles prévues pour les deux qualités courantes de jet fuels américains **JP 4** et **JP 1** auxquels correspondent **TR 4** et **TR 0**.

Distillation :

Le TR 0 est approximativement une coupe de kérosène distillant entre 165° C et 240° C et utilisée par l'aviation commerciale, alors que le TR 4, constitué par une coupe plus large, contenant plus de légers, avec un point initial de 55° C et un point final de 240 °C est réservé à l'aviation militaire. Théoriquement un réacteur peut brûler n'importe quel combustible pourvu qu'il soit équipé d'un dispositif de pulvérisation efficace permettant une bonne combustion sans formation de dépôts. Cependant, son utilisation en aviation à

haute altitude impose des spécifications sévères assurant un maximum de garantie.

Densité :

Elle conditionne directement la rayon d'action de l'avion ; on a intérêt à utiliser des carburateurs de densité élevée pour avoir le maximum d'énergie dans un volume donné, celui des réservoirs, et réduire le poids et le volume des réacteurs. Mais cette densité élevée ne doit pas être obtenue par des fractions trop lourdes qui feraient diminuer le rendement de combustion en donnant des dépôts de carbone. C'est donc là encore une affaire de compromis ; la densité se situe aux environs de 0,800.

Tension de vapeur :

Cette spécification n'intervient que dans le cas du TR 4 ; la tension de vapeur doit être comprise entre 140 et 210 g/cm² pour éviter, sous la faible pression régnant à haute altitude, la vaporisation qui provoquerait des bouchons de vapeur et le désamorçage des pompes, sans parler des pertes par évaporation pour des réservoirs non pressurisés. Cependant, la présence d'éléments légers est indispensable pour l'allumage du réacteur au sol ou son réallumage en altitude, surtout s'il n'y a pas de dispositif de préchauffage de l'alimentation. La qualité TR 4 ou JP 4 a été conçue afin de permettre la résorption et une meilleur valorisation des excédents d'essence – moteur de mauvais indice d'octane que la raffinerie produit à différents stades des traitements.

Teneur en aromatiques :

On estime que la teneur en aromatique doit être inférieure à 25% pour limiter la formation des dépôts de carbone. En réalité, si les hydrocarbures ayant C/H élevé brûlent plus mal que les chaînes paraffiniques, il semble néanmoins que la qualité de dépôts formés dépend plus de l'atomisation du carburant que de sa structure chimique.

Point de congélation :

Il est fixé à - 40° C pour le TR 0 et à - 60° C pour le TR 4 et garantit ainsi la pompabilité du combustible aux très basses températures rencontrées en altitude et se situant environs de - 50 ou - 55° C. rappelons que le point de congélation correspond à l'apparition d'un trouble dans le carburant alors que la limite de pompabilité se situe environ 10° C plus bas, ce qui donne une marge de sécurité acceptable. D'ailleurs actuellement, on généralise les dispositifs de préchauffage des carburateurs au-dessus de 0° C pour éviter l'obstruction des

filtres. Le point de congélation est en relation assez étroite avec le point final de distillation.

Teneur en eau :

Les carburéacteurs doivent être exempts d'eau en suspension. Mais la solubilité de l'eau dans les hydrocarbures bien que très faible, n'est pas négligeable. La figure 1.1 montre en effet qu'à 30° C le kérosène est saturé par environ 0.01% en poids d'eau provenant des divers traitements, mais qu'à - 20°C la solubilité devient pratiquement nulle, de sorte que l'abaissement de la température en altitude provoque la démixtion de l'eau dissoute qui se cristallise instantanément et risque de boucher les filtres.

I.1.3.2 Gasoil moteur :

Sous cette appellation, il faut entendre un combustible susceptible d'être utilisé dans un moteur Diesel rapide tel que ceux dont sont équipés certains véhicules ainsi que les camions et les cars. Par ordre d'importance, les qualités suivantes sont requises pour le gasoil : propreté (carbone Conradson, sédiments, eau, soufre), combustion (indice de cétane), fluidité (viscosité et point de congélation) et volatilité (distillation, point d'éclair).

Distillation :

Les spécifications ne touchent que les fractions lourdes du gasoil : moins de 65% distillés à 250° C et plus de 85% à 350° C. faisant suite au kérosène, le gasoil a un point initial qui se situe aux environs de 220° C et ainsi, contient donc approximativement une gamme d'hydrocarbures comprise entre C₁₄ et C₂₀. Le point 50% de la courbe de distillation est représentatif des propriétés moyennes : volatilité, viscosité, point de congélation. Le point 85% inférieur à 350° C limite la teneur en produits lourds et obtient aisément à l'unité de distillation. Le dépassement de cette norme correspond à une mauvaise sélectivité de la séparation gasoil-brut réduit et en général, la couleur dans ce cas est mauvaise. Enfin, le point d'éclair doit être compris entre 55 et 120° C.

Densité :

Comprise entre 0,810 et 0,89, la densité n'est pas un élément déterminant ; elle conditionne uniquement le pouvoir calorifique au litre. En fait, les gasoils commerciaux se situent entre 0,825 et 0,850.

Viscosité :

Inférieure à 9 cSt à 20° C, la viscosité conditionne l'écoulement et la finesse de la pulvérisation dont dépendra la de la combustion. On estime que la viscosité doit être inférieure à 12 cSt et en aucun cas n'excéder 40 cSt en amont des trous d'injecteur pour que l'atomisation soit correcte.

cSt : (centistokes) l'unité de la viscosité cinématique

1 centistokes = 0,0036 m²/h

Indice de cétane :

Les spécifications imposent un indice de cétane supérieur à 50. pour les moteurs de faible cylindrée, les valeurs élevées de l'indice de cétane favorisent les départs à froid par diminution de la température d'auto inflammabilité du gasoil et rendent le fonctionnement du moteur Diesel moins dur et moins bruyant.

Point d'écoulement et teste de filtrabilité :

Dérivant directement de la valeur du point de distillation et de la teneur en paraffines cristallisables le point d'écoulement du gasoil est fixé à -12° C en hiver et - 7°C en été. Sa valeur détermine les conditions de réchauffage à envisager par temps froid et peut être abaissée par des additifs appropriés. En outre, le test de filtrabilité doit être inférieur ou égale à - 6° C en hiver.

Teneur en cendres :

Ce sont les sels et oxydes minéraux qui demeurent à l'état solide après combustion complète du gasoil ; parmi eux, on trouve principalement le silicium, le fer, le calcium, le sodium et le vanadium, ce dernier représentant dans certains cas 50% des cendres totales. Les spécifications prévoient des traces de cendres non dosables dans le gasoil pour éviter les dépôts solide sur les parties froides telles que les soupapes et la formation d'un amalgame abrasif avec l'huile de graissage. En outre, la teneur en sédiments doit être nulle.

Teneur en eau :

En elle-même, l'eau ne serait pas gênante, mais elle contient généralement, soit dissoute, soit en suspension, des matières organiques pouvant donner des cendres, en particulier de chlorures de sodium et magnésium. La teneur en eau est donc fixée à des traces non dosables. D'ailleurs, la purification des combustibles lourds peut se réaliser par agitation avec l'eau qui dissout les

matières organiques solubles, puis par centrifugation qui élimine cette eau charge ainsi que les matières en suspension.

Teneur en soufre :

Elle est comprise entre 0,45 et 0,55 % en poids. Quelle que soit la nature des composés sulfurés, ces derniers provoquent une corrosion des chemises, à froid, par l'acide sulfurique dilué qui se dépose et agissent sur la formation et la dureté des dépôts, formant de véritables vernis qui gomment les segments.

Des contrôles systématiques effectués depuis plusieurs années montrent une corrélation étroite entre la teneur en soufre et l'usure des chemises des moteurs Diesel.

I.1.3.3 Essence :

Les essences sont destinées aux moteurs à allumage commandé, moteurs dans les quels l'explosion du mélange air / essence dans le cylindre est déclenchée par l'étincelle de la bougie.

L'essence s'évapore entre la température ambiante et 215° C sous pression atmosphérique. La densité des essences liquides est d'environ 0,755, soit bien inférieure à celle de l'eau (1,000) ; leurs vapeurs sont trois fois plus lourdes que l'air. Ces hydrocarbures ont des points d'ébullition différents ; la courbe représentée par ces points est appelée courbe de distillation. On caractérise et différencie le plus souvent les essences par leur indice d'octane et leur volatilité.

Indice d'octane :

Le nombre d'octane est une valeur adimensionnelle permettant de caractériser l'auto inflammation d'un carburant, plus la valeur est élevée moins c'est sensible à l'auto inflammation. On notera que l'auto inflammation est la capacité d'un carburant à initier sa combustion spontanément. Lorsque une auto inflammation de la charge se produit dans un moteur, on appelle cela cliquetis ou knock.

On peut définir deux nombres d'octane :

- RON : nombre d'octane recherche
- MON : nombre d'octane moteur

La différence entre ces deux valeurs est le mode opératoire de mesure.

On a l'expression de RON :

$$RON = 100 + \frac{28.28 T}{1 + 0.736 T + (1 + 1.472 T - 0.435216 T^2)^{0.5}}$$

Où T est la teneur en plomb du mélange.

Pour un carburant, lorsque on quantifie à X le nombre RON, cela signifie que le mélange de X% isooctane + (100-X)% n-heptane aura le même comportement du point de vue auto inflammation.

Par exemple, le méthane à un indice RON de 130.

Le taux de compression détermine le rendement du moteur : c'est le rapport entre le volume du cylindre lorsque le piston a été repoussé vers le bas par la détente des gaz, et le volume lorsque le piston est en haut du cylindre. Plus le taux de compression du moteur est élevé, plus celui-ci est performant. Toutefois, le phénomène de compression, et sa manifestation peut fortement endommager les différents éléments du moteur. Une solution consiste à augmenter l'indice d'octane du carburant.

L'indice d'octane est déterminé par la composition du mélange d'un produit détonant, le heptane (indice 0), et d'iso octane, très résistant à la détonation (indice 100). Un carburant d'indice 95 a le même comportement qu'un mélange à 95 % d'iso octane et 5% de heptane. Pour accroître l'indice d'octane d'un carburant, on peut utiliser dans le supercarburant plombé, du plomb tétraméthyl ou du plomb tétraéthyl. Pour les supercarburants sans plomb, on utilise des composés organiques, comme le méthyl tertiobutyl éther.

Un supercarburant est caractérisé par l'indice recherche (RON), mesuré dans des conditions de vitesse et d'accélération faibles, et l'indice d'octane moteur (MON), déterminé dans des conditions d'essais plus sévères.

Volatilité :

Un suivi strict de la volatilité de l'essence est essentiel pour garantir un bon fonctionnement du moteur dans toutes les conditions. Si la volatilité est trop faible, le moteur démarre difficilement par temps froid ; si elle est trop élevée, le moteur peut caler ou présenter des difficultés de redémarrage par temps chaud.

I.1.3.4 Gaz de pétrole liquéfié (GPL) :

Constituant d'environ 50 % de butane et de 50 % de propane, le GPL est l'un des carburants « propres » les plus intéressants. En effet, sa disponibilité et sa production sont aisées et il peut être utilisé directement dans les moteurs traditionnels. Les émissions de gaz polluants sont très faibles.

I.2 ETUDE DE LA FLAMME :

I.2.1 L'auto inflammation :

Le processus d'auto inflammation des mélanges combustibles homogènes est caractérisé par le développement d'une réaction chimique rapide ; accompagnée de l'apparition d'une flamme à partir du développement relativement lent de réaction pré flamme. L'auto inflammation est la conséquence du déséquilibre entre la puissance thermique dégagée par les réactions chimiques et celles échangées par le système au réaction avec le milieu extérieur qui conduit à l'accroissement progressif à la vitesse de la réaction. Il existe deux types de l'auto inflammation chimique et thermique.

I.2.1.1 Inflammation chimique :

Est une réaction en chaîne résulte de la multiplication isotherme des radicaux élémentaires. Dans la théorie chimique de la réaction en chaînes, l'inflammation commence par une chaîne de réactions ramifiées, c'est à dire liées entre elles, la chaleur qui est dégagée n'a guère d'effet secondaire. Cette théorie explique entre autre l'existence de flammes froides.

I.2.1.2 Inflammation thermique :

Le taux de chaleur crée par l'exotherme de la réaction dans un volume V est très supérieur à la chaleur perdue aux parois. L'augmentation de la température devient rapide et incontrôlable, il y a apparition de la flamme lorsque cette température est suffisamment élevée. La théorie thermique est basée sur l'hypothèse que le processus de combustion ne peut être initié qu'à une température suffisamment élevée pour que les collisions moléculaires aient lieu avec une fréquence suffisamment élevé.

Analyse théorique de l'auto inflammation :

L'auto inflammation thermique appliquée à un volume de gaz permet de caractériser les grandeurs fondamentales :

- délai d'inflammation
- température critique d'auto inflammation
- condition spécifique de l'inflammation

I.2.2 Limites d'inflammabilité :

Les limites d'inflammabilité sont définies conventionnellement comme étant les pourcentages extrêmes en combustible entre lesquels le mélange est inflammable. En générale, il existe une limite supérieure et inférieure d'inflammabilité, mais l'une d'entre elle peut être inexistante. Il est d'usage d'indiquer la limite d'inflammabilité dans l'air ou dans l'oxygène, les limites d'inflammabilité dans l'oxygène étant plus grandes que celle dans l'air.

Par exemple pour l'hydrogène dans l'air : la limite inférieure est de 4% et la limite supérieure est de 74.5%, la température d'inflammation est de 570° C, pour une inflammation pratiquement semblable, le méthane a des limites d'inflammabilité inférieure et supérieure dans l'air de 5% et de 15%.

I.2.3 Propagation de la flamme :

Il existe toujours un mouvement relatif entre le mélange combustible et la flamme : soit que le mélange se déplace, la flamme étant alors stabilisée sur un brûleur, soit que la flamme se propage dans un mélange statique contenu à l'intérieur d'un récipient. Il existe plusieurs méthodes pour mesurer la vitesse de propagation de la flamme.

Dans le cas où la flamme est fixe, on mesure sa surface et le débit du mélange gazeux. La mesure de la surface est relativement facile d'il s'agit d'un cône parfait. Dans la plupart des cas, il est nécessaire de photographier la flamme avec un agrandissement connu et de mesurer sa surface à partir de la photographie. La vitesse est donnée par l'équation : $vitesse = \text{débit} / \text{surface}$.

Si la flamme est mobile, il suffit de mesurer le temps qu'elle met pour parcourir l'intervalle entre deux points de repère placés le long du tube de propagation. La méthode de le Chatelier utilise une caméra à tambour tournant qui cinématographie d'une manière continue le déplacement de la flamme entre deux repères. La connaissance de l'agrandissement de la caméra et de sa vitesse de rotation permet de déduire très facilement la vitesse de propagation de la flamme, par une mesure de la trace rectiligne faite sur le film.

La réaction de propagation est dite :

Déflagration : si la vitesse de propagation est subsonique (quelques cm/s).

Détonation : si la vitesse de propagation est supersonique (milliers m/s).

La déflagration se propage sous forme d'une onde de combustion appelée front de flamme cependant la propagation de la détonation s'accompagne d'une onde de choc entre tenue par la réaction qui suit immédiatement.

L'onde de choc d'une part et le front de flamme d'autre part constituent une zone de séparation de fine épaisseur entre le domaine réactif (produits initiaux) et celui des produits de combustion (produits finaux)

I.2.3.1 Propagation en subsonique (La déflagration) :

Une déflagration est l'ensemble des phénomènes consécutifs au passage rapide d'un front de réaction, le plus souvent d'un front de flamme (combustion d'un gaz ou d'une vapeur), au travers d'un mélange combustible. Dans un mélange homogène d'air et de gaz de vapeur combustible, une flamme se propage à une vitesse constante, assez rapide mais qui reste de l'ordre de grandeur de celle de phénomènes familiers. Elle est souvent de l'ordre de quelques centimètres à quelques mètres par seconde, donc comparable à celle d'un marcheur ou d'un coureur. C'est ce qui se passe lors de l'inflammation rapide du mélange de gaz et d'air au dessus d'un bec de cuisinière ou dans un four. Si la masse de gaz est faible, le phénomène est sans conséquence ; si la masse est importante, une explosion peut se produire. La flamme d'un brûleur est une déflagration se propage à une vitesse constante, dans une direction opposée à celle du flux gazeux.

Dans une déflagration, les gaz brûlés se déplacent dans le sens opposé à celui de la flamme, à une vitesse subsonique. Dans de nombreux cas, la propagation d'une flamme dans un mélange gazeux explosif de composition convenable peut s'accélérer brutalement et se transformer en une détonation.

I.2.3.2 Propagation en supersonique (La détonation) :

la détonation est le résultat d'une réaction chimique extrêmement rapide qui s'accompagne de la propagation d'une onde de choc, variation très rapide et intense de la pression. C'est l'existence de cette onde de choc et sa propagation qui confère à la détonation son caractère si violemment destructeur. La détonation est causée par la réaction extrêmement rapide de l'explosion mais le passage de l'onde de choc à travers l'explosif en provoque en même temps la décomposition très rapide : une fois l'onde de choc amorcée, elle ne s'arrête qu'après réaction quasi complète. L'onde de choc se propage ensuite dans le sol et l'atmosphère (comme l'onde créée par l'avion passant le mur du son), en amortissant plus ou moins rapidement, car elle perd rapidement son énergie, tout en causant des dégâts souvent très importants ou catastrophiques, suivant la nature et la quantité d'explosif mis en jeu. La vitesse de la détonation est de

l'ordre de 2 à 4 km par seconde dans les gaz, parfois plus rapide dans les explosifs solides. Les gaz brûlés se déplacent dans le même sens que l'onde.

1.2.4 Vitesse de la flamme :

La vitesse de propagation de la flamme (turbulente ou laminaire) par rapport au mélange frais peut être mesurée sur brûleurs, en bombe ou encore dans les tubes. Elle est déterminée sur brûleur en mesurant la surface de la flamme S_f . Si Q représente le débit volumique de mélange frais par rapport au front de flamme, la vitesse de propagation de la flamme ou vitesse de déflagration s'écrit $U_L = Q / S_f$.

La vitesse de la flamme est définie comme étant la vitesse à laquelle les gaz frais sont happés par la flamme. Ce n'est donc pas la vitesse de l'interface gaz frais/gaz brûlés. Cette vitesse dépend de plusieurs paramètres (température, pression, richesse, type de fuel ...etc.) et est définie différemment suivant le régime d'écoulement (laminaire ou turbulent).

1.2.5 Stabilité de la flamme :

Dans la majorité des applications pratiques, on désire réaliser une flamme qui reste stabilisée en un endroit bien déterminé du réacteur ; ce n'est pas le cas dans les moteurs à explosion interne, où on permet à la flamme d'aller à la rencontre du mélange inflammable dans tout le volume du cylindre. Par contre, dans les fours, les turboréacteurs et les statoréacteurs, on désire une flamme bien ancrée à un endroit déterminé et on envoie le mélange inflammable à travers elle.

Il existe généralement plusieurs méthodes pour stabiliser la flamme, on citera ces deux méthodes :

- on utilise un stabilisateur (obstacle), qui est placé dans l'écoulement perpendiculaire à la vitesse moyenne, et fait apparaître un sillage dans lequel s'établissent les courants de retour vers l'amont.
- on peut utiliser aussi un jet d'air dirigé perpendiculairement ou à contre-courant de l'écoulement principale.

Chapitre III

Théorie de la
combustion d'un
hydrocarbure



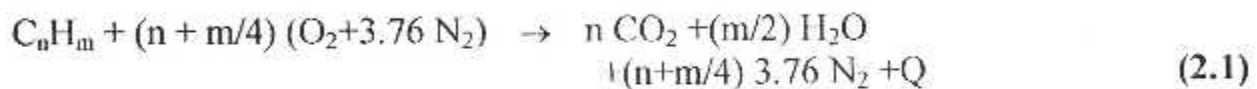
II.1 INTRODUCTION :

Toute combustion est une réaction d'oxydation d'un réactif réducteur appelé combustible, par un réactif oxydant qu'on désigne par le terme comburant. Dans la plupart des cas, le comburant est l'oxygène de l'air bien que d'autres corps chimiques tels que protoxyde d'azote, fluor ou chlore, peuvent être utilisés comme oxydant dans des applications spéciales.

Les combustibles les plus courants sont des substances organiques parmi lesquelles les hydrocarbures tiennent une large place.

Les produits de ces réactions sont essentiellement le gaz carbonique et la vapeur d'eau.

La combustion d'un hydrocarbure avec une quantité stœchiométrique d'air donne la réaction globale suivante :



Q : représente la quantité de chaleur libérée par mole de combustible brûlé, elle est appelée chaleur de combustion et égale à la différence entre la somme des chaleurs de formation des réactifs et celle des produits.

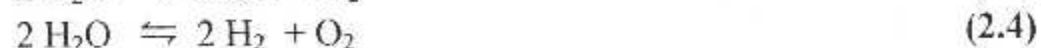
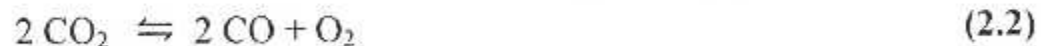
$$Q = - \Delta H_R$$

La valeur de Q dépend donc à la fois de la nature du combustible et du comburant.

Dans une combustion adiabatique, la totalité de l'énergie libérée est accumulée dans les produits de combustion comme chaleur sensible :

$$Q = \int_{T_i}^{T_f} C_{p(\text{produits})} dT$$

Cette expression montre que les produits de combustion (dont C_p est la chaleur spécifique par mole) sont portés de la température initiale T_i à la température T_f qui peut atteindre 2000 à 3000 °K. A ces températures relativement élevées, le gaz carbonique et la vapeur d'eau sont partiellement dissociés conformément aux équilibres suivants :



Les équilibres (2.2) à (2.8) peuvent être caractérisés par des constantes d'équilibre reliant les concentrations des différents espèces chimiques concentrées.

Ces constantes dépendent de la température et en général, de la pression également. Leur variation en fonction de la température doit être connue pour calculer la température d'équilibre (T_e) et les concentrations à l'équilibre de gaz carbonique, de l'oxyde de carbone, de la vapeur d'eau et de chacun de leurs produits de dissociation.

La connaissance exacte des températures d'équilibres des produits de combustion à une importance capitale pour les applications industrielles. Elles déterminent non seulement les performances des engins, mais elle fixent également les contraintes thermiques auxquelles sont soumis les matériaux; dans le cas des aubes des turbines à gaz par exemple, elle est d'une importance primordiale.

II.2 DONNEES THEORIQUES DE LA COMBUSTION DES HYDROCARBURES :

II.2.1 Rapport stœchiométrique 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 stœchiométrie, la composition du mélange air – comburant requise pour obtenir une combustion complète.

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

$$R = (\text{masse d'air} / \text{masse du carburant})_{\text{stoech}} \quad (2.9)$$

R est généralement compris entre 13 et 15 pour les hydrocarbures, plus précisément entre 14,2 et 14,4 pour les carburants classiques.

Un mélange stœchiométrique contient donc suffisamment d'oxygène pour oxyder tout le carbone et anhydride carbonique (CO_2), tout l'hydrogène en eau (H_2O) sans excès d'air.

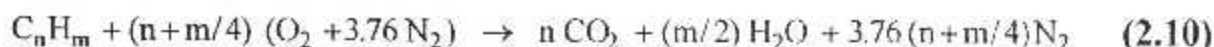
En admettant pour l'air la composition volumique suivante :

O_2 : 20.9 %

N_2 : 79.1 %

L'argon (Ar), 0.93 %, et les autres constituants présents à l'état de traces sont assimilés à l'azote.

La réaction de combustion stœchiométrique complète de l'hydrocarbure C_nH_m s'écrit :



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

Dans les moteurs thermiques, les conditions de combustion des hydrocarbures sont très souvent éloignées de celles correspondant à la stœchiométrie et se caractérisent soit par un excès, soit par un défaut de carburant par rapport à l'oxygène. La composition du milieu réactionnel s'exprime alors par un paramètre appelé richesse, note (r_c) et définie par la relation :

$$r_c = \frac{[(\text{masse de carburant}) / (\text{masse d'air})]_{\text{réel}}}{[(\text{masse de carburant}) / (\text{masse d'air})]_{\text{stœch}}} \quad (2.11)$$

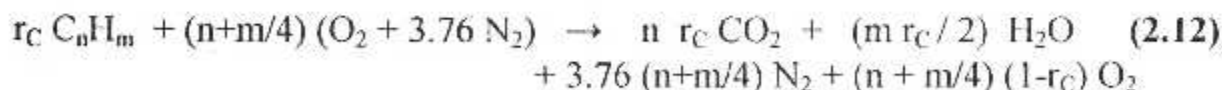
Soit : $r_c = [(\text{masse de carburant}) / (\text{masse d'air}) \text{ réel}] \times R$

La richesse se rapporte donc 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 stœchiométrique ($r_c = 1$).
- le mélange pauvre (avec excès d'air, $r_c < 1$).
- le mélange riche (avec excès de carburant, $r_c > 1$).

Certains auteurs emploient parfois le coefficient d'excès d'air (λ) qui est simplement l'inverse de la richesse : $\lambda = 1/r_c$. Il est à noter 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 rentrent localement en réaction.

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



L'hydrocarbure (C_nH_m) et l'oxygène (O_2) sont des réactifs;

L'anhydride carbonique (CO_2) et l'eau (H_2O) constituent les produits de combustion;

L'azote de l'air (N_2) exerce un rôle de diluant.

II.2.2 Pouvoir calorifique :

II.2.2.1 Définition :

On appelle pouvoir calorifique d'un combustible, la quantité de chaleur fournie ou dégagée par la combustion complète de 1 kg de combustible solide ou liquide ou de 1 N m³ (mètre cube normale) de combustible gazeux.

le N.m³ est donné dans les conditions normales de pression et de température (0°C, 760 mm Hg = 1013 m bar).

Le pouvoir calorifique P_c est fonction de l'état physique du produit de combustion.

On distingue le pouvoir calorifique supérieur (P_{c_s}) et inférieur (P_{c_i}) :

- le pouvoir calorifique est dit supérieur P_{c_s} (mesure au calorimètre) si l'on suppose ramener à 25 °C tous les produits de la combustion, la vapeur d'eau étant condensée (l'eau est à l'état liquide).
- le pouvoir calorifique est dit inférieur P_{c_i} (à utiliser dans des applications industrielles) si l'on suppose refroidir à 100 °C les produits de combustion sans condensation de la vapeur d'eau (l'eau est à l'état vapeur).

Le pouvoir calorifique dépend des conditions opératoires.

- Pouvoir calorifique à pression constante : $(P_c)_p = Q_p / m_c$ (2.13)

- Pouvoir calorifique à volume constant : $(P_c)_v = Q_v / m_c$ (2.14)

Pour les exprimer, on les ramène en kJ/kg pour combustible solide ou liquide et kJ/N.m³ pour les combustibles gazeux à (0°C et 760 mm hg).

N.m³ : mètre cube normal.

II.2.2.2 Relation entre pouvoir calorifique à volume constant $(P_c)_v$ et pouvoir calorifique à pression constante $(P_c)_p$:

Cherchons tout d'abord la relation entre (Q_p) chaleur de réaction à pression constante et (Q_v) . Chaleur de réaction à volume constant.

$$Q_v = U_2 - U_1 \quad (2.15)$$

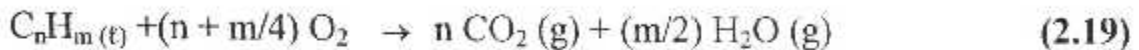
$$Q_p = H_2 - H_1 = (U_2 + P_2 V_2) - (U_1 + P_1 V_1) = (U_2 - U_1) + (P_2 V_2 - P_1 V_1) \quad (2.16)$$

$$P_1 = P_2 = P_o = \text{cte} \Rightarrow Q_p = Q_v + P_o(V_2 - V_1) \quad (2.17)$$

Si la réaction contient n_1 moles avant réaction et n_2 moles après réaction :

$$Q_p = Q_v + R(n_2 - n_1) T \quad (2.18)$$

Par exemple pour un carburant liquide C_nH_m , la réaction s'écrit :



$$n_2 - n_1 = (n + m/2) - (n + m/4) = m/4 \quad (2.20)$$

$$Q_p = Q_v + (RT \cdot \frac{m}{4}) \quad (2.21)$$

$$(Pc)_p = (Pc)_v + \frac{RT \cdot m/4}{12 \cdot n + m} \quad (2.22)$$

II.2.2.3 Détermination du pouvoir calorifique :

Considérons un combustible composé des éléments suivants (C), (H), (O), (S):

a -Pouvoir calorifique supérieur (Pc_s) :

D'après DULANG, le pouvoir calorifique peut être calculé approximativement par la formule suivante :

$$Pc_s = 8080 C + 34450 (H - \frac{O}{8}) + 2250.S \quad \text{en Kcal / kg} \quad (2.23)$$

$$Pc_s = 33823 C + 144206 (H - \frac{O}{8}) + 9419.S \quad \text{en Kj / kg} \quad (2.24)$$

Si le combustible contient de l'oxygène, on a (O)kg d'oxygène qui se combine avec $\frac{O}{8}$ kg d'hydrogène pour donner de l'eau, ce qui revient à brûler $(H - \frac{O}{8})$ kg d'hydrogène.

b -Pouvoir calorifique inférieur (Pc_i) :

La différence entre le pouvoir calorifique supérieur Pc_s et le pouvoir calorifique inférieur Pc_i , provient de la chaleur de condensation de l'eau formée.

- la chaleur latente de vaporisation de l'eau à 100 °C est :

$$L_v = 2256 \text{ Kj/kg} = 539 \text{ Kcal/kg}$$

- la chaleur libérée en ramenant l'eau de 100 °C à 25 °C est :

$$Q = C \cdot \Delta T = 1 \cdot (100 - 25) = 75 \text{ Kcal / kg} \quad \text{ou} \quad 314 \text{ Kj / kg}$$

Ainsi, la chaleur libérée par kg de vapeur d'eau à la pression atmosphérique par condensation et refroidissement est :

$$Q = 2256 + 314 = 2570 \text{ Kj / kg}$$

Dans le combustible on a 'y' kg d'hydrogène dans 100 kg de combustible, ce qui donne :

$$(y/2) H_2O = (y/2) \cdot 18 = 9 y \text{ kg d'eau.}$$

Si on brûle 1 kg d'hydrogène, on aura 9 kg H_2O ce qui donne :

$$2570 \times 9 \left(H - \frac{O}{8} \right) = 23130 \left(H - \frac{O}{8} \right)$$

$\left(H - \frac{O}{8} \right)$: quantité d'hydrogène qui brûle.

$9 \left(H - \frac{O}{8} \right)$: quantité d'eau formée.

Alors le pouvoir calorifique inférieur P_{ci} sera :

$$P_{ci} = P_{cs} - 23130 \left(H - \frac{O}{8} \right) \quad (2.25)$$

Puisque $P_{cs} = 33823 C + 144206 \left(H - \frac{O}{8} \right) + 9419 . S$ (2.26)

$$P_{ci} = (33823 C) + (144206 - 23180) \cdot \left(H - \frac{O}{8} \right) + 9419 . S \quad (2.27)$$

$$P_{ci} = 33823 C + 121076 \left(H - \frac{O}{8} \right) + 9419 . S \quad \text{Kj / kg} \quad (2.28)$$

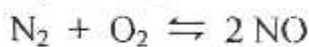
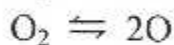
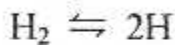
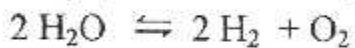
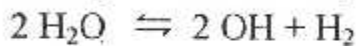
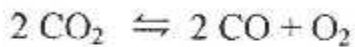
$$P_{ci} = 8080 C + 28924 \left(H - \frac{O}{8} \right) + 2250 . S \quad \text{Kcal / kg} \quad (2.29)$$

II.3 TEMPERATURE ET COMPOSITION DES PRODUITS DE COMBUSTION :

Après combustion complète du carburant, le carbone se trouve normalement sous forme d'anhydride carbonique (CO_2) et l'hydrogène sous forme d'eau (H_2O). 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 (CO), et de l'hydrogène (H_2). 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.

Les réactions chimiques qui se déroulent dans la zone de chambre de combustion correspondent généralement à l'évolution quasi complète des produits initiaux vers l'état d'équilibre thermodynamique.

Si l'on suppose que cet équilibre thermodynamique est atteint, il est possible de calculer la composition finale de combustion pour un mélange pauvre ($rc < 1$), et ce en tenant compte des équilibre relatifs aux dissociations endothermiques qui deviennent importantes au fur et à mesure que le niveau thermique s'élève. Pour les combustibles les plus usuels, les équilibres principaux à considérer, sont les suivants :



Lorsque le combustible hydrocarbure par exemple est en excès, il intervient de plus toute une série d'équilibres relatifs aux réactions de déshydratation et de cracking qui rendent le calcul de la composition globale d'équilibre pratiquement impossible.

Lorsque le système évolue sans dissipation d'énergie, il en résulte de l'exothermique de la réaction que les produits se trouvent portés à une température considérablement élevée appelée température de combustion. La valeur de cette dernière varie selon les conditions d'inflammabilité (composition et concentration) et signifie que pour un combustible donné, il y a autant de température de combustion que de façon de réaliser cette combustion. On considère en particulier :

II.3.1 La température théorique de combustion :

C'est la température atteinte par les produits de la combustion d'un combustible brûlé dans les conditions suivantes :

- le combustible et l'air sont pris à la température ambiante.
- la combustion est complète (totale) et neutre (stœchiométrique).
- les parois du foyer n'absorbent et ne transmettent aucune quantité de chaleur.

II.3.2 La température réelle de combustion :

Quand un combustible est brûlé dans une chambre de combustion d'abord, les parois absorbent et transmettent au milieu extérieur une partie de la chaleur de combustion, il s'ensuit que la température réellement atteinte par les produits de la combustion est inférieure à la température théorique déjà définie.

Cette température réelle peut encore être abaissée par le fait de certaines circonstances comme : l'emploi d'un excès d'air, l'oxydation partielle du carbone en oxyde de carbone (CO) et la présence d'imbrûlés parmi les produits de combustion. Cette température réelle peut aussi être relevée si l'on utilise un mélange (air-combustible) préalablement réchauffé.

L'estimation de la température des produits de combustion n'est possible que si on suppose la composition idéale d'équilibre exactement atteinte. Ce calcul est très complexe, il résulte du bilan entre les calories dégagées par la réaction d'une part, et celle absorbée d'autre part, aussi bien par l'échauffement des produits de réaction, y inclus les radicaux et les atomes, que par les processus endothermiques de formation de ces derniers. Les chaleurs spécifiques à utiliser sont des valeurs moyennes valables pour un intervalle de température considéré. Les systèmes d'équations à résoudre pour ce calcul comprend donc les relations d'équilibre, les relations de conservations des atomes (relations relatives à la stœchiométrie), ainsi que l'équation exprimant la conservation de l'énergie. Ce système est en général insoluble sans faire appel à des méthodes d'analyse numérique.

L'utilisation des ordinateurs de nos jours a beaucoup contribué à rendre ces déterminations très faciles.

II.4 CONDITION D'EQUILIBRE THERMODYNAMIQUE :

Les équations qui régissent la composition 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 :

$$g = \sum G_m n_m \quad (2.30)$$

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

$$G_m = \partial g / \partial n_m \quad (2.31)$$

Pour expliquer les potentiels chimiques G 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 :

$$(G^\circ)_m = (H^\circ)_m - T (S^\circ)_m \quad (2.32)$$

$$\text{Avec : } \Delta H_k(T) = \sum v_{ki} \cdot H_i(T) \quad (2.33)$$

$$\Delta S^\circ_k(T) = \sum v_{ki} \cdot S^\circ_i(T) \quad (2.34)$$

$$\Delta G^\circ_k = \Delta H_k(T) - T \Delta S^\circ_k(T) \quad (2.35)$$

Les conditions d'équilibre s'écrivent :

$$\ln K_{p_k}(T) = -\Delta G^\circ_k(T) \quad (2.36)$$

$$\ln K_{p_k}(T) = (-\Delta H_k(T) + T \cdot \Delta S^\circ_k(T)) / R \cdot T \quad (2.37)$$

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 K_{p_k} ne dépendent que de la température T et peuvent être calculées à partir des grandeurs thermodynamiques relatives aux constituants de chaque équilibre.

II.5 CALCUL DE LA TEMPERATURE DE COMBUSTION :

II.5.1 Carburant et comburant ayant une même température

$$T_a = T_r = 298 \text{ }^\circ\text{K} :$$

- **Convention des thermotechniciens :**

$$T_o : \text{température de référence} \quad T_o = 298^\circ\text{K}$$



$\Delta H_R = -Q$: chaleur engendrée par la combustion.

Les thermotechniciens comptent positivement la chaleur de combustion.

$$\text{Réaction à volume constant : } (\Delta H_R)_V = -Q_V$$

$$\text{Réactions à pression constante : } (\Delta H_R)_P = -Q_P$$

$$\text{Avec : } \Delta H_R > 0$$

- Conventions des thermodynamiciens :

Contrairement à la convention des thermotechniciens qui comptent positivement la chaleur de combustion, la convention des thermodynamiciens comptent négativement la chaleur de combustion ($\Delta H_R < 0$).

Hypothèses :

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

A : mélange carburant – comburant (réactants).

B : ensemble des produits de combustion (réactés).

$$\text{D'après le 1^{er} principe} \quad W_{AB} + Q_{AB} = \Delta U = U_B - U_A \quad (2.38)$$

$$\text{Avec :} \quad U_A = \sum n_{Ai} \cdot U_{Ai} \quad (2.39)$$

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

U_{Ai} : énergie interne molaire du $i^{\text{ème}}$ constituant.

$$\text{Même chose pour les produits} \quad U_B = \sum n_{Bi} \cdot U_{Bi} \quad (2.40)$$

II.5.1.1 combustion à volume constant :

$$\text{- combustion isochore (} V = \text{Cste) } \Rightarrow W_{AB} = - \int p \, dv = 0 \quad (2.41)$$

$$\text{- combustion adiabatique } \Rightarrow Q_{AB} = 0 \quad Q_{AB} \text{ (chaleur échangée avec le milieu extérieur)}$$

$$U_B - U_A = 0 \quad \text{ou} \quad U_A = U_B \quad (2.42)$$

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.

$$\text{Alors :} \quad U_A(T_A) = U_B(T_B) \quad (2.43)$$

L'énergie interne n'est définie que par rapport à un état de référence T_0 °K,
 $(\Delta U)_{T_0}$

$$[\Delta U_A]_{T_0}^{T_A} = U_A(T_A) - U_A(T_0) \quad (2.44)$$

$$[\Delta U_B]_{T_0}^{T_B} = U_B(T_B) - U_B(T_0) \quad (2.45)$$

Or $U_A(T_A) = U_B(T_B) \Rightarrow [\Delta U_B]_{T_0}^{T_B} = U_A(T_A) - U_B(T_0)$ (2.46)

Ajoutant et retranchant à l'équation (2.46), $U_A(T_0)$

$$[\Delta U_B]_{T_0}^{T_B} = \underbrace{U_A(T_A) - U_A(T_0)} + \underbrace{U_B(T_0) - U_B(T_0)} \quad (2.47)$$

$$[\Delta U_B]_{T_0}^{T_B} = [\Delta U_A]_{T_0}^{T_A} - [U_B(T_0) - U_A(T_0)] \quad (2.48)$$

Or d'après le 1^{er} principe :

$$U_B(T_0) - U_A(T_0) = (\Delta U_A^B)_{T_0} = (Q_{AB})_{T_0} \quad (2.49)$$

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

$$(Q_{AB})_{T_0} = -Q_V \quad (2.50)$$

D'où

$$[\Delta U_B]_{T_0}^{T_B} = [\Delta U_A]_{T_0}^{T_A} + Q_V \quad (2.51)$$

Etat initial T_A connue $\Rightarrow [\Delta U_A]_{T_0}^{T_A} = U_A(T_A) - U_A(T_0)$ (2.52)

Connaissant la composition du mélange, on peut calculer Q_V , de là on déduit :

$$[\Delta U_B]_{T_0}^{T_B} = [\Delta U_A]_{T_0}^{T_A} + Q_V \quad (2.53)$$

Et à partir des tables on tire T_B (température de combustion).

II.5.1.2 Combustion à pression constante :

- 1^{er} principe de la thermodynamique (système ouvert) :

$$W_{TAB} + Q_{AB} = \Delta H_A^0 \quad (2.54)$$

avec :

$$W_T = \int_A^B v dp = 0 \quad \text{car } p = \text{Cte} \quad (2.55)$$

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

$$Q_{AB} = 0 \quad (2.56)$$

$$\Rightarrow H_B = H_A \quad (2.57)$$

Soit :

T_A : température avant combustion .

T_B : température en fin de combustion .

$$\Rightarrow H_A(T_A) = H_B(T_B) \quad (2.58)$$

$$H_B = \underbrace{(\Delta H_f)_B^{298}}_{\text{enthalpie de formation à } 298^\circ\text{K}} + \underbrace{\int_{T_0}^{T_B} C_p dT}_{\text{enthalpie sensible}} = (\Delta H_f)_B^{298} + [\Delta H_B]_{T_0}^{T_B} \quad (2.59)$$

$$H_A = (\Delta H_f)_A^{298} + \int_{T_0}^{T_A} C_p dT = (\Delta H_f)_A^{298} + [\Delta H_A]_{T_0}^{T_A} \quad (2.60)$$

H_A et H_B sont des enthalpies standards .

(2.60) - (2.59) donnent :

$$H_B - H_A = (\Delta H_f)_B^{298} - (\Delta H_f)_A^{298} + \int_{T_0}^{T_B} (C_p dT)_B - \int_{T_0}^{T_A} (C_p dT)_A \quad (2.61)$$

Or $H_A = H_B \Rightarrow$

$$(\Delta H_f)_B^{298} + [\Delta H_B]_{T_0}^{T_B} - [\Delta H_A]_{T_0}^{T_A} = 0 \quad (2.62)$$

$$(\Delta H_f)_B^{298} = H_B(T_0) - H_A(T_0) = -Q_p \quad (2.63)$$

$$\Rightarrow \underbrace{[\Delta H_B]_{T_0}^{T_B}}_{\text{enthalpie sensible (B)}} = \underbrace{Q_p}_{\text{chaleur de réaction à } 298^\circ\text{K}} + \underbrace{[\Delta H_A]_{T_0}^{T_A}}_{\text{enthalpie sensible (A)}} \quad (2.64)$$

$$[\Delta H_{T_0}^{T_B}] = \sum \frac{n_{A_i}}{n_B} \cdot [\Delta H_{A_i}]_{T_0}^{T_A} + \sum \frac{n_{A_i}}{n_B} \cdot Q_{p_i} \quad (2.65)$$

Avec H' : enthalpie molaire

Q_{p_i} : chaleur dégagée à T_0 ($^\circ\text{K}$) à pression constante.

Soient :

Enthalpie des produits : H_p

Enthalpie des réactants : H_R

d'après l'équation (2.64) $[\Delta H_B]_{T_0}^{T_B} = [\Delta H_A]_{T_0}^{T_A} + Q_p$

$$[\Delta H_p]_{T_1}^{T_2} = \underbrace{[\Delta H_A]_{T_1}^{T_1}}_{=0} + (Q_p)_{298} = (Q_p)_{298} \quad (2.66)$$

ici la température initiale est $T_1 = T_0 = 298^\circ\text{K}$

$$Q_p = (\Delta H_p)_{T_2} - (\Delta H_p)_{T_1} = \int_{T_1}^{T_2} \sum v C_{p_{pC}} dT = \int_0^{T_2} \sum v C_{p_{pC}} dT - \int_0^{T_1} \sum v C_{p_{pC}} dT \quad (2.67)$$

Avec :

$\int_0^{T_1} \sum v C_{p_{pC}} dT$: enthalpie sensible ou enthalpie d'échauffement.

$Q_p = \int_{T_1}^{T_2} \sum v C_{p_{pC}} dT$: énergie nécessaire pour chauffer les produits de combustion de T_1 à T_2 .

$$(2.67) \Rightarrow \underbrace{(\Delta H_p)_{T_2}}_{\text{Enthalpie sensible des produits de combustion à } T_2} = \underbrace{(\Delta H_p)_{T_1}}_{\text{Enthalpie sensible des produits de combustion à } T_1=298^\circ\text{K}} + \underbrace{(Q_p)_{298}}_{\text{enthalpie de réaction à } 298^\circ\text{K}} \quad (2.68)$$

$(\Delta H_p)_{T_1}$ étant calculée, on en déduit par interpolation la température T_2 de combustion.

II.5.2 Température de combustion avec carburant et comburant à des températures différentes :

- Bilan enthalpique.
- Tenir compte de l'état initial du carburant et du comburant (températures différentes).
- La chaleur de réaction est totalement utilisée pour échauffer les gaz brûlés.
(combustion adiabatique, pas de pertes de chaleur avec le milieu extérieur).
- Enthalpie standard du fluide en déplacement se conserve.

A : mélange avant combustion.

B : état des gaz brûlés.

$$H_A(T_i) = H_B(T_b) \quad (2.69)$$

L'enthalpie standard s'écrit :

$$H_A^T = \underbrace{(\Delta H_f^0)^{Tr}}_{\text{enthalpie de formation}} + \underbrace{\int_{T_r}^{T_b} C_{p_i} dt}_{\text{enthalpie sensible}} \quad (2.70)$$

Combustible → indice (1)

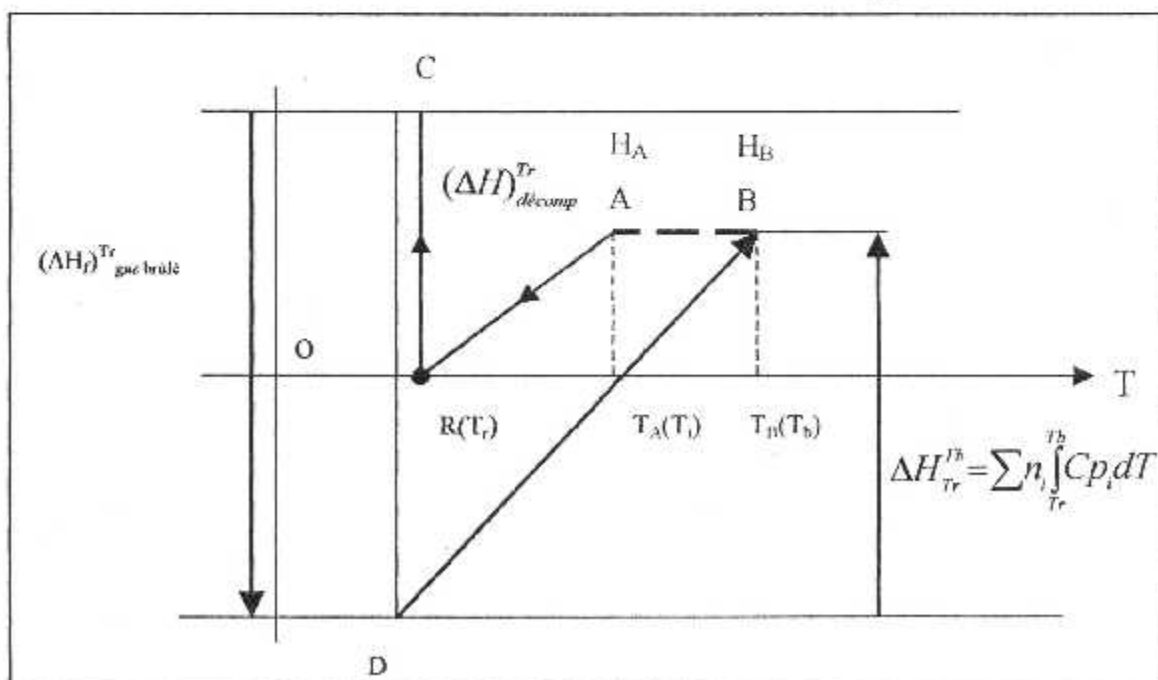
Comburant → indice (2)

$H_A^{(1)}$, $H_A^{(2)}$ et H_A représentent respectivement enthalpies massiques du carburant, comburant et mélange carburé (carburant + comburant)

$$(m_1 + m_2) \cdot H_A = m_1 \cdot H_A^{(1)} + m_2 \cdot H_A^{(2)}$$

$$H_A \cdot \left(1 + \frac{m_1}{m_2}\right) = H_A^{(2)} + \frac{m_1}{m_2} \cdot H_A^{(1)} \rightarrow \quad (2.71)$$

$$H_A = \frac{m \cdot H_A^{(1)} + H_A^{(2)}}{1 + m} \quad \text{avec} \quad m = \frac{m_1}{m_2} = \frac{\text{masse carburant}}{\text{masse air}} : \text{dosage}$$



- Température de référence : $T_r = 298 \text{ }^\circ\text{K}$.
- Les enthalpies de formation des éléments sont nulles au point (R) axe T.
- Chacun des corps actifs est décomposé en éléments simples figurant dans la composition de référence point (C).
- La chaleur de décomposition à fournir est égale à la chaleur de formation changée de signe.

$$(\Delta H)_{\text{décomp}}^{\text{Tr}} = -(\Delta H_f)_{\text{réactifs}}^{\text{Tr}} = -\frac{[m(\Delta H_f)^{\text{Tr}(1)} + (\Delta H_f)^{\text{Tr}(2)}]}{m+1} \quad (2.72)$$

$$\text{avec : } m = \frac{m_1}{m_2} = \frac{C}{A} \quad (2.73)$$

- A partir de ces éléments, on suppose que l'on forme à la température de référence T_r , un mélange dont la composition est identique à celle des gaz brûlés point (D), qui correspond à une diminution d'enthalpie. Les chaleurs de formation des gaz étant généralement négatives.

$$(\Delta H_f)_{\text{gaz brûlés}}^{\text{Tr}} = \sum n_i (\Delta H_f)_i^{\text{Tr}} \quad (2.74)$$

avec n_i : nombre de moles de chaque constituant dans le mélange.

- On chauffe le mélange jusqu'à T_b , température de fin de combustion, par l'apport de chaleur

$$(\Delta H)_c^{\text{Tb}} = \sum n_i \int_{T_r}^{\text{Tb}} (Cp)_i dT \quad (2.73)$$

- Combustion adiabatique à pression constante.

$$H_A(T_i) = H_B(T_b) \quad (2.73)$$

- Enthalpie standard des produits frais égale à celle des gaz brûlés à partir des éléments pris à la température T_r .
- Variation d'enthalpie de (C) à (B) par deux chemins différents (C-R-A-B) et (C-R-D-B), il suffit d'écrire :

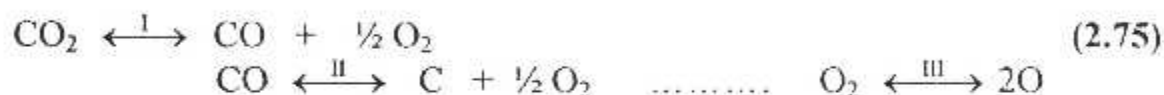
$$-\underbrace{(\Delta H_{\text{décomp}}^{\text{Tr}})}_{\text{Réactifs}} + (H_A - H_R) = \underbrace{(\Delta H_f)_{\text{gaz brûlés}}^{\text{Tr}}}_{\text{Gaz brûlés}} + (\Delta H)_{\text{Tr}}^{\text{Tb}} = \sum n_i (\Delta H_f)_i^{\text{Tr}} + \int_{T_r}^{\text{Tb}} Cp dT \quad (2.74)$$

II.6 PHENOMENE DE DISSOCIATION :

II.6.1 Introduction :

Lorsque la température de la combustion est suffisamment élevée (2000 °K à 3000 °K), les produits de combustion se dissocient (décomposition des molécules polyatomiques en radicaux ou en atomes.

A ces températures relativement élevées, le gaz carbonique et la vapeur d'eau des produits de combustion sont partiellement dissociés conformément aux équilibres suivants.



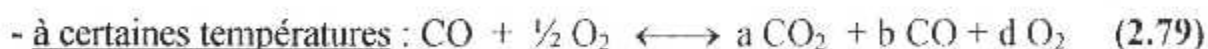
Les équilibres I à VI peuvent être caractérisés par des constantes d'équilibre reliant les concentrations des différentes espèces chimiques. Ainsi

$$\text{Pour l'équilibre I : } k_p = \frac{p_{\text{CO}} \cdot p_{\text{O}_2}^{1/2}}{p_{\text{CO}_2}}$$

$$\text{Pour l'équilibre II : } k_p = \frac{p_{\text{C}} \cdot p_{\text{O}_2}^{1/2}}{p_{\text{CO}}} \quad \text{etc.....}$$

Ces constantes dépendent de la température et en général de la pression également.

Prenons comme exemple le cas de l'équilibre I.



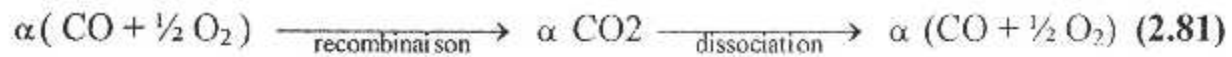
Pour une (1) mole de CO_2 participant à la réaction, il y'a a moles qui seront décomposées (ou dissociées) pour donner b moles de CO et d moles de O_2 .

La dissociation régie par la réaction d'équilibre.



A mesure que le CO se dissocie en CO et O_2 , il y'a recombinaison d'une partie de ces produits de combustion pour obtenir du CO_2 .

Il y'a inversion continue entre les moles de CO , O_2 et CO_2 .



Réactions avec des rapports stœchiométriques c'est-à-dire que le nombre de moles qui se dissocient satisfait à l'équation (2.78).

Equation (2.79) :

Bilan des atomes

$$\left. \begin{array}{l} \text{Carbone : } 1 = a + b \\ \text{Oxygène : } 2 = 2a + b + 2d \\ \text{ou : } 1 = a + \frac{1}{2}b + d \end{array} \right\} \Rightarrow \begin{array}{l} a = 1 - b \\ d = \frac{1}{2}b \end{array} \quad (2.82)$$

Réécrivons l'équation (2.79) :



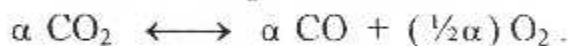
b moles de CO_2 ont été dissociées en b moles de CO et $\frac{1}{2}b$ mole de O_2 .

b → l'équation (2.83)

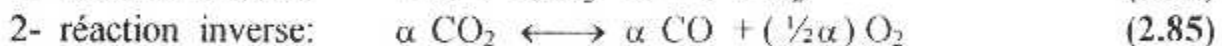
α → l'équation (2.80)

À l'équilibre : $CO_2 \longleftrightarrow CO + \frac{1}{2} O_2$.

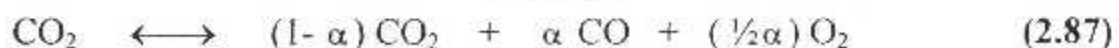
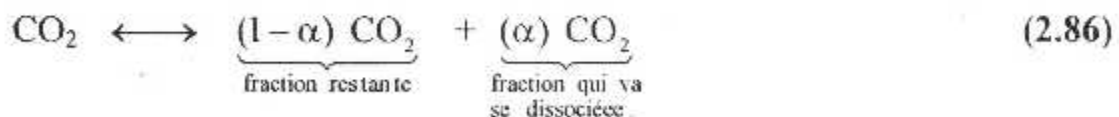
Pour α moles du CO_2 dissociées .



II.6.2 Décomposition de l'ensemble du processus :



3- dissociation du CO_2 :



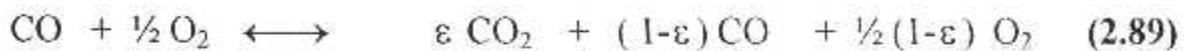
4- réaction finale :



Réactions (2.83) et (2.88) $\alpha \equiv b$
 α moles du CO_2 se dissocient en α moles de CO et $(\frac{1}{2}\alpha)$ moles de O_2 .

α : degré de dissociation .
 $\varepsilon = (1 - \alpha)$: degré de réaction .

Avec $\varepsilon = (1 - \alpha)$.



II.6.3 Calcul du degré de dissociation du dioxyde de carbone :

Equation stœchiométrique $2 CO_2 \longleftrightarrow 2 CO + O_2$

$P = 1 \text{ atm}$

$T = 2000 \text{ }^\circ\text{K}$ à $2000 \text{ }^\circ\text{K}$ $\Delta H_T^\circ = 555.95 \text{ kJ / mole}$
 $\Delta S_T^\circ = 168 \text{ j / mole }^\circ\text{K}$

Valeur de la constante d'équilibre :

$$\ln kp = -\frac{\Delta G^\circ}{R \cdot T} = -\frac{219,97 \cdot 10^3}{8,31 \cdot 2000} \Rightarrow kp = 1.8 \cdot 10^{-6} \quad (2.90)$$

Le degré de dissociation α rapporté à une mole de CO_2 .

Nombre de moles des composants .

CO_2 : $2(1-\alpha)$
 CO : 2α
 O_2 : α
 Totale $N = (2 + \alpha)$

Gaz parfait $kp = \frac{p_{CO}^2 \cdot p_{O_2}}{p_{CO_2}^2}$ avec $p_i = \frac{n_i}{N} \cdot P$ soit :

$$\left\{ \begin{array}{l} p_{CO} = \frac{2\alpha}{2+\alpha} \cdot P \\ p_{CO_2} = \frac{2(1-\alpha)}{2+\alpha} \cdot P \\ p_{O_2} = \frac{\alpha}{2+\alpha} \cdot P \end{array} \right. \quad P = 1 \text{ atm} \quad (2.91)$$

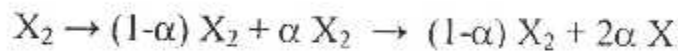
$$k_p = \frac{[4\alpha^2/(2+\alpha)^2] \cdot [\alpha/(2+\alpha)]}{[4(1-\alpha)^2/(2+\alpha)^2]} = 1,8 \cdot 10^{-6} \Rightarrow \frac{\alpha^3}{(2+\alpha) \cdot (1-\alpha)^2} = 1,8 \cdot 10^{-6}$$

$$\Rightarrow \alpha = 0,015 = 1,5 \% \text{ de moles dissocié}$$

II.6.4 Constante d'équilibre et degré de dissociation :

a - Réaction du type $X_2 \rightleftharpoons 2 X$:

Exemple : $N_2 \rightleftharpoons 2 N$



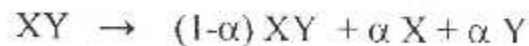
Ou : $X_2 \rightarrow (1-\alpha) X_2 + 2\alpha X$

$$k_p = \frac{P_X^2}{P_{X_2}} \quad \text{avec} \quad \begin{cases} P_X = \frac{2\alpha P}{1+\alpha} \\ P_{X_2} = \frac{1-\alpha P}{1+\alpha} \end{cases} \Rightarrow k_p = \frac{4\alpha^2 P}{(1+\alpha)^2} \frac{1+\alpha}{(1-\alpha)P} \quad (2.92)$$

$$k_p = \frac{4\alpha^2}{1-\alpha^2} P \quad (2.93)$$

b - Réaction du type $XY \rightleftharpoons X + Y$:

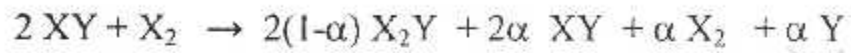
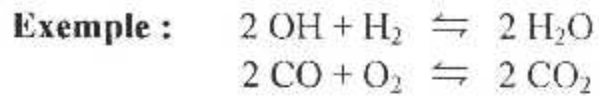
Exemple : $NO \rightleftharpoons N + O$



$$k_p = \frac{P_X P_Y}{P_{XY}} \quad \text{avec} \quad \begin{cases} P_X = P_Y = \frac{\alpha}{1+\alpha} P \\ P_{XY} = \frac{1-\alpha}{1+\alpha} P \end{cases} \Rightarrow k_p = \frac{\alpha^2 P^2}{(1+\alpha)^2} \frac{1+\alpha}{(1-\alpha)P} \quad (2.94)$$

$$k_p = \frac{\alpha^2}{1-\alpha^2} P \quad (2.95)$$

c - Réaction du type $2 XY + X_2 \rightleftharpoons 2 X_2Y$:



$$k_p = \frac{P_{XY}^2 P_{X_2}}{(P_{X_2Y})^2} \quad \text{avec} \quad \begin{cases} P_{XY} = \frac{2\alpha}{2+\alpha} P \\ P_{X_2} = \frac{\alpha}{2+\alpha} P \\ P_{X_2Y} = \frac{2(1-\alpha)}{2+\alpha} P \end{cases} \quad N = 2 + \alpha \quad (2.96)$$

$$k_p = \frac{\alpha^3 P}{(1-\alpha)^2 (2+\alpha)} \quad (2.97)$$

Chapitre III

Théorie de calcul
de la température
de combustion
d'un hydrocarbure
 C_nH_m

III.1 INTRODUCTION :

Considérons la réaction exothermique de combustion d'un hydrocarbure C_nH_m , utilisant l'air comme comburant, la composition de ce dernier est telle qu'une mole d'oxygène est associée à 3,76 moles d'azote.

Le mélange initial, de richesse ($rc < 1$), entre dans la chambre de combustion à une pression p et une température d'entrée T_e ($^{\circ}K$) données. On suppose après la combustion, que l'on se trouve en équilibre thermodynamique et que l'énergie cinétique est négligeable devant l'enthalpie et que la combustion est adiabatique.

Nous admettons aussi que les produits ultimes de la transformation à l'état gazeux se comportent comme des gaz parfaits.

Les calculs seront effectués sous forme molaire, en utilisant les valeurs molaires des propriétés thermodynamiques suivantes :

$(\Delta H_f)_{T_0}^{\circ}$: désigne l'enthalpie de formation molaire de l'espèce (i) considéré à la température de référence $T_0 = 298,15$ ($^{\circ}K$) et à la pression $P_0 = 1$ bar.

$Hi(T)$ et $Hi(T_0)$: désignent les valeurs d'enthalpies sensibles molaires du constituants (i) respectivement en T et en T_0 .

$S^{\circ}(T)$: désigne l'entropie molaire de l'espèce (i) considéré à la température T ($^{\circ}K$) et à la pression $P_0 = 1$ bar.

Rappelons que la valeur de la constante des gaz parfaits : $R = 1,987$ cal / (mole $^{\circ}k$).

Les indices, $i = 1, 2, 3, \dots, 10, 11$; désignent suivant cet ordre les espèces chimiques respectives suivantes : $CO_2, H_2O, O_2, N_2, NO, OH, CO, H_2, O, H, N$.

III.2 CALCUL DE LA TEMPERATURE DE FIN DE COMBUSTION :**III.2.1 Combustion à pression constante :**

L'application du premier principe de la thermodynamique pour un système ouvert :

$$W_T + Q = \Delta H \quad (3.1)$$

Et pour une transformation à pression constante :

$$W_T - \int v dp = 0 \quad (p = \text{cte})$$

Et puisque la transformation est adiabatique :

$$Q = 0 \Rightarrow \Delta H = 0$$

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

$$H_R(T_e) = H_P(T_c) \quad (3.2)$$

Pour déterminer la valeur de T_c solution de l'équation $f(T) = H_P(T) - H_R(T) = 0$, il faut choisir un intervalle de température $[T_1, T_2]$, et calculer $f(T_1)$, $f(T_2)$ mais il faut s'assurer que T_c appartient à cet intervalle, cela est traduit par la condition :

$$f(T_1) \cdot f(T_2) < 0 \Rightarrow [H_P(T_1) - H_R(T_c)] \cdot [H_P(T_2) - H_R(T_c)] < 0 \quad (3.3)$$

Il existe plusieurs méthodes de résolution.

- Méthode de dichotomie.
- Méthode de la sécante
- Méthode de newton... etc.

III.3 CALCUL DE L'ENTHALPIE DES REACTIFS (H_R) :

Le mélange initial considéré comporte :

(r_c) mole de combustible (C_nH_m) .

$(n + \frac{m}{4})$ moles d'oxygène (O_2) .

$(n + \frac{m}{4}) \times 3.76$ moles d'azote (N_2) .

III.3.1 Calcul de l'enthalpie du combustible :

$H_R^{(1)}$: désigne l'enthalpie du combustible C_nH_m à une température d'entrée T_e ($^{\circ}K$) donnée .

$H_R^{(2)}$: désigne l'enthalpie de l'air à une température d'entrée air T_a ($^{\circ}K$) donnée .

Ou :

$$H_R^{(1)} = r_c \left((\Delta H_f^{\circ})_c^{298} + \int_{T_0}^{T_e} C_{p_c} dT \right) \quad (3.4)$$

$(\Delta H_f^{\circ})_c^{298}$: représente l'enthalpie de formation molaire du combustible C_nH_m .

$\int_{T_0}^{T_e} C_{p_c} dT$: représente la variation de l'enthalpie sensible du combustible entre T_0 et T_e .

Ou bien, si on connaît l'évolution de l'enthalpie sensible en fonction de la température

$H_R^{(1)}$ devient :

$$H_R^{(1)} = r_c \left((\Delta H_f^{\circ})_c^{298} + H_c^s(T_e) - H_c^s(T_0) \right) \quad (3.5)$$

Pour un combustible C_nH_m donné, l'évolution de l'enthalpie sensible en fonction de la température est donnée par la formule suivante :

$$H_c^s(T) = \frac{((0.403 \times T) + (0.000405 \times T^2))}{\sqrt{((0.9952 \times d_1^{29}) + 0.00806)}} \times (12n + m) \quad [\text{cal /mole}] \quad [3] \quad (3.6)$$

$$d_4^{20} = \frac{\text{poids d'un volume de produit à } 20^\circ\text{C}}{\text{poids du même volume d'eau à } 4^\circ\text{C}} \quad [6] \quad (3.7)$$

$$d_4^{20} (\text{Kérosène}) C_{10,3} H_{20,6} = 0.80 \quad [6]$$

$$d_4^{20} (\text{gasoil}) C_{14,4} H_{24,9} = 0.85$$

- Pour les moteurs d'avion $r_C = 0.2 \sim 0.3$
- Pour un moteur diesel $r_C = 0.4 \sim 0.5$

III. 3.2 Calcul de l'enthalpie de l'air :

$$H_R^{(2)} = \left(n + \frac{m}{4}\right) (H_{R(O_2)} + 3,76 \cdot H_{R(N_2)}) \quad (3.8)$$

$$H_{R(O_2)} = (\Delta H_f^\circ)_{O_2}^{298} + \int_{T_0}^{T=T_a} C_{p \text{ air}} dT \quad (3.9)$$

$$H_{R(N_2)} = (\Delta H_f^\circ)_{N_2}^{298} + \int_{T_0}^{T=T_a} C_{p \text{ air}} dT \quad (3.10)$$

L'enthalpie standard de l'oxygène et de l'azote sont calculées directement à l'aide du polynôme d'interpolation de Gordon et Mc Bride :

$$H(T) = \left(a_1 + \frac{a_2 \cdot T}{2} + \frac{a_3 \cdot T^2}{3} + \frac{a_4 \cdot T^3}{4} + \frac{a_5 \cdot T^4}{5} + \frac{a_6}{T}\right) \cdot R \cdot T \quad [2] \quad (3.11)$$

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.

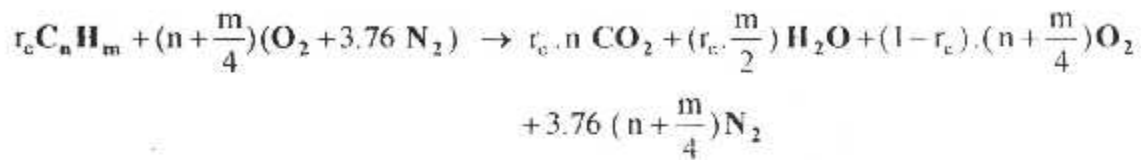
$$H_R^{(2)} = \left(n + \frac{m}{4}\right) \times (H_{R(O_2)} + 3.76 \times H_{R(N_2)}) \quad (3.12)$$

Donc l'enthalpie standard des réactifs est : $H_R = \sum_{i=1}^2 H_R^{(i)}$

$$\text{D'ou :} \quad H_R = H_R^{(1)} + H_R^{(2)} \quad (3.13)$$

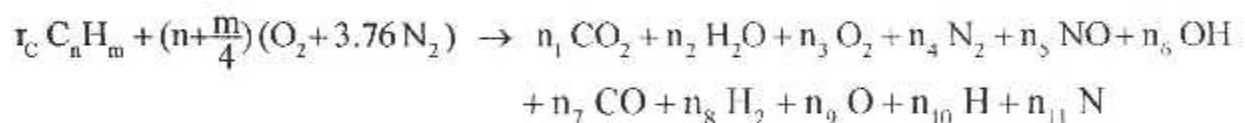
III.4 CALCUL DE L'ENTHALPIE DES PRODUITS H_p :

1. Combustion complète d'un hydrocarbure C_nH_m sans dissociation des produits de combustion, et d'une richesse $r_c < 1$ (mélange pauvre) on a :

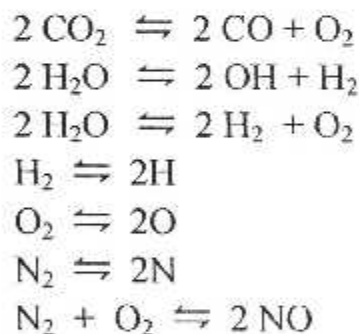


Les produits de combustion sont : CO_2 , H_2O , O_2 et N_2 .

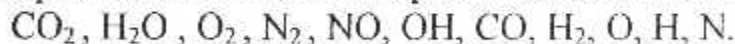
2. Combustion complète d'un hydrocarbure C_nH_m avec dissociation a partir de 1500 à 1600 °K, les produits de combustion se dissocient pour donner des atomes et des radicaux, et l'équation s'écrit :



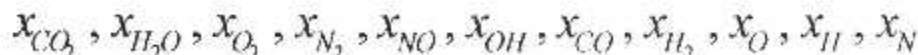
Les équations d'équilibre sont :



Les produits de combustion après dissociation sont donc :



Les fractions molaires sont :



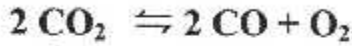
Le problème est donc, de déterminer la composition molaire des 11 espèces de produits de combustion, et en plus le nombre de mole totale N_t .

$$N_t = \sum_{i=1}^{11} n_i \tag{3.14}$$

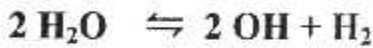
On a donc 12 inconnues, il nous faut 12 équations qui sont :

- 7 équations d'équilibre
- 4 équations de bilan des atomes.
- Une équation de nombre de mole totale (3.14).

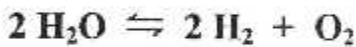
III .4.1 Equations d'équilibre des réactions de dissociation :



$$Kp_1 = \frac{P_{\text{CO}}^2 \cdot P_{\text{O}_2}}{P_{\text{CO}_2}^2} \Rightarrow Kp_1 = \frac{n_{\text{CO}}^2 \cdot n_{\text{O}_2} \cdot P}{n_{\text{CO}_2}^2 \cdot Nt} \Rightarrow Kp_1 = \frac{x_{\text{CO}}^2 \cdot x_{\text{O}_2} \cdot P}{x_{\text{CO}_2}^2} \quad (3.15)$$



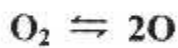
$$Kp_2 = \frac{P_{\text{OH}}^2 \cdot P_{\text{H}_2}}{P_{\text{H}_2\text{O}}^2} \Rightarrow Kp_2 = \frac{n_{\text{OH}}^2 \cdot n_{\text{H}_2} \cdot P}{n_{\text{H}_2\text{O}}^2 \cdot Nt} \Rightarrow Kp_2 = \frac{x_{\text{OH}}^2 \cdot x_{\text{H}_2} \cdot P}{x_{\text{H}_2\text{O}}^2} \quad (3.16)$$



$$Kp_3 = \frac{P_{\text{H}_2}^2 \cdot P_{\text{O}_2}}{P_{\text{H}_2\text{O}}^2} \Rightarrow Kp_3 = \frac{n_{\text{H}_2}^2 \cdot n_{\text{O}_2} \cdot P}{n_{\text{H}_2\text{O}}^2 \cdot Nt} \Rightarrow Kp_3 = \frac{x_{\text{H}_2}^2 \cdot x_{\text{O}_2} \cdot P}{x_{\text{H}_2\text{O}}^2} \quad (3.17)$$



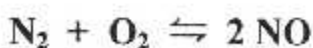
$$Kp_4 = \frac{P_{\text{H}}^2}{P_{\text{H}_2}} \Rightarrow Kp_4 = \frac{n_{\text{H}}^2 \cdot P}{n_{\text{H}_2} \cdot Nt} \Rightarrow Kp_4 = \frac{x_{\text{H}}^2 \cdot P}{x_{\text{H}_2}} \quad (3.18)$$



$$Kp_5 = \frac{P_{\text{O}}^2}{P_{\text{O}_2}} \Rightarrow Kp_5 = \frac{n_{\text{O}}^2 \cdot P}{n_{\text{O}_2} \cdot Nt} \Rightarrow Kp_5 = \frac{x_{\text{O}}^2 \cdot P}{x_{\text{O}_2}} \quad (3.19)$$



$$Kp_6 = \frac{P_{\text{N}}^2}{P_{\text{N}_2}} \Rightarrow Kp_6 = \frac{n_{\text{N}}^2 \cdot P}{n_{\text{N}_2} \cdot Nt} \Rightarrow Kp_6 = \frac{x_{\text{N}}^2 \cdot P}{x_{\text{N}_2}} \quad (3.20)$$



$$Kp_7 = \frac{P_{\text{NO}}^2}{P_{\text{N}_2} \cdot P_{\text{O}_2}} \Rightarrow Kp_7 = \frac{n_{\text{NO}}^2}{n_{\text{N}_2} \cdot n_{\text{O}_2}} \Rightarrow Kp_7 = \frac{x_{\text{NO}}^2}{x_{\text{N}_2} \cdot x_{\text{O}_2}} \quad (3.21)$$

$$p_i = \frac{n_i}{n_T} \cdot P = x_i \cdot P \quad (3.22)$$

x_i : fraction molaire de l'élément i

- la compression est adiabatique et la pression P est donnée par la 2^{ème} loi de Poisson :

$$P = \left(\frac{T_a}{T_o} \right)^{\frac{\gamma}{\gamma-1}} \cdot P_o \quad (3.23)$$

III .4.2 Bilan des atome en fraction molaire :

- **En nombre de mole :**

$$\text{Carbone : } n_{CO_2} + n_{CO} = r_c \cdot n \quad (3.24)$$

$$\text{Oxygène : } 2n_{CO_2} + n_{CO} + 2n_{O_2} + n_{H_2O} + n_{OH} + n_O + n_{NO} = 2 \cdot \left(n + \frac{m}{4} \right) \quad (3.25)$$

$$\text{Hydrogène : } 2n_{H_2} + 2n_{H_2O} + n_H + n_{OH} = r_c \cdot m \quad (3.26)$$

$$\text{Azote : } 2n_{N_2} + n_N + n_{NO} = 7.52 \left(n + \frac{m}{4} \right) \quad (3.27)$$

- **En fraction molaire :**

En appliquant la loi de conservation de la masse (bilan des atomes) pour chaque atome :

$$\text{Carbone : } x_{CO_2} + x_{CO} = r_c \frac{n}{Nt} \quad (3.28)$$

$$\text{Oxygène : } 2x_{CO_2} + x_{CO} + 2x_{O_2} + x_{H_2O} + x_{OH} + x_O + x_{NO} = \frac{2(n + \frac{m}{4})}{Nt} \quad (3.29)$$

$$\text{Hydrogène : } 2x_{H_2} + 2x_{H_2O} + x_H + x_{OH} = r_c \frac{m}{Nt} \quad (3.30)$$

$$\text{Azote : } 2x_{N_2} + x_N + x_{NO} = 7.52 \frac{(n + \frac{m}{4})}{Nt} \quad (3.31)$$

III .4.3 Equation de nombre de mole totale :

$$n_{CO_2} + n_{H_2O} + n_{O_2} + n_{N_2} + n_{NO} + n_{OH} + n_{CO} + n_{H_2} + n_O + n_H + n_N = Nt \quad (3.32)$$

III.4.4 Détermination des constantes d'équilibre $K_{p_k}(t)$ pour T_1, T_2 :

En général pour une réaction, les expressions générales des constantes d'équilibre sont données par les relations suivantes :

$$\begin{aligned} \text{Ln}[k_p(T)] &= -\Delta G^\circ(T)/R \times T \quad \text{avec} \quad \Delta G_T^\circ = \Delta H_T^\circ - T \Delta S_T^\circ \\ \Rightarrow \text{Ln}[k_p(T)] &= -\frac{\Delta H_T^\circ}{R \times T} + \frac{\Delta S_T^\circ}{R} \end{aligned} \quad (3.33)$$

$$\text{Avec} \quad \Delta H_{T_0}^\circ = \Delta H_{T_0=298}^\circ + (\Delta H^S)_{T_0}^T \quad (3.34)$$

$$\Delta H_{T_0=298}^\circ = \sum n_i' (\Delta H_f^\circ)_P^{298} - \sum n_i (\Delta H_f^\circ)_R^{298} \quad (3.35)$$

$$(\Delta H^S)_{T_0}^T = \sum n_i' \int_{T_0}^T (Cp)_P dT - \sum n_i \int_{T_0}^T (Cp)_R dT \quad (3.36)$$

$$\Delta S_T^\circ = \Delta S_{T_0=298}^\circ + (\Delta S)_{T_0}^T \quad (3.37)$$

$$\Delta S_{T_0=298}^\circ = \sum n_i' (\Delta S_f^\circ)_P^{298} - \sum n_i (\Delta S_f^\circ)_R^{298} \quad (3.38)$$

$$(\Delta S)_{T_0}^T = \sum n_i' \int_{T_0}^T (Cp)_R \frac{dT}{T} - \sum n_i \int_{T_0}^T (Cp)_R \frac{dT}{T} \quad (3.39)$$

Applications aux 7 équations d'équilibre :

Pour chaque un des 11 constituants i du mélange de fin de combustion nous avons :

$$\Delta H_i(T) = \Delta H_{i,T_0=298}^\circ + (\Delta H_i^S)_{T_0}^T \quad (3.40)$$

$$\Delta S_i(T) = \Delta S_{i,T_0=298}^\circ + (\Delta S_i^S)_{T_0}^T \quad (3.41)$$

Pour simplifier les calculs de $\Delta H_T^\circ, \Delta S_T^\circ$ à chaque valeur de température on utilisera le polynôme d'interpolation de (Gordon et Mc Bride).

$$H^\circ(T) = \left[a_1 + \left(\frac{a_2}{2}\right) \times T + \left(\frac{a_3}{3}\right) \times T^2 + \left(\frac{a_4}{4}\right) \times T^3 + \left(\frac{a_5}{5}\right) \times T^4 + \frac{a_6}{T} \right] \times R \times T \quad [2] \quad (3.42)$$

$$S^\circ(T) = \left[a_1 \times \text{Ln}(T) + a_2 \times T + \left(\frac{a_3}{2}\right) \times T^2 + \left(\frac{a_4}{3}\right) \times T^3 + \left(\frac{a_5}{4}\right) \times T^4 + a_7 \right] \times R \quad [2] \quad (3.43)$$

Où les constantes a_1, a_2, \dots, a_7 , sont des coefficients propres à chaque espèce

III. 4.5 Calcul des Enthalpies des réactions d'équilibre :

Pour $k = 1$ $2 CO_2 \rightleftharpoons 2 CO + O_2$

$$\Delta H_1(T=T_1, T_2) = 2 (\Delta H_f^\circ)_{CO}^{298} - 2 (\Delta H_f^\circ)_{CO_2}^{298} + 2 \int_{T_0}^T C_{p,(CO)} dT + \int_{T_0}^T C_{p,(O_2)} dT - 2 \int_{T_0}^T C_{p,(CO_2)} dT \quad (3.44)$$

pour $k = 2$ $2 H_2O \rightleftharpoons 2 OH + H_2$

$$\Delta H_2(T=T_1, T_2) = 2 (\Delta H_f^\circ)_{OH}^{298} - 2 (\Delta H_f^\circ)_{H_2O}^{298} + 2 \int_{T_0}^T C_{p,(OH)} dT + \int_{T_0}^T C_{p,(H_2)} dT - 2 \int_{T_0}^T C_{p,(H_2O)} dT \quad (3.45)$$

pour $k = 3$ $2 H_2O \rightleftharpoons 2 H_2 + O_2$

$$\Delta H_3(T=T_1, T_2) = -2 (\Delta H_f^\circ)_{H_2O}^{298} + 2 \int_{T_0}^T C_{p,(H_2)} dT + \int_{T_0}^T C_{p,(O_2)} dT - 2 \int_{T_0}^T C_{p,(H_2O)} dT \quad (3.46)$$

pour $k = 4$ $H_2 \rightleftharpoons 2H$

$$\Delta H_4(T=T_1, T_2) = 2 (\Delta H_f^\circ)_{H}^{298} + 2 \int_{T_0}^T C_{p,(H)} dT - \int_{T_0}^T C_{p,(H_2)} dT \quad (3.47)$$

pour $k = 5$ $O_2 \rightleftharpoons 2O$

$$\Delta H_5(T=T_1, T_2) = 2 (\Delta H_f^\circ)_{O}^{298} + 2 \int_{T_0}^T C_{p,(O)} dT - \int_{T_0}^T C_{p,(O_2)} dT \quad (3.48)$$

pour $k = 6$ $N_2 \rightleftharpoons 2N$

$$\Delta H_6(T=T_1, T_2) = 2 (\Delta H_f^\circ)_{N}^{298} + 2 \int_{T_0}^T C_{p,(N)} dT - \int_{T_0}^T C_{p,(N_2)} dT \quad (3.49)$$

pour $k = 7$ $N_2 + O_2 \rightleftharpoons 2 NO$

$$\Delta H_7(T=T_1, T_2) = 2 (\Delta H_f^\circ)_{NO}^{298} + 2 \int_{T_0}^T C_{p,(NO)} dT - \int_{T_0}^T C_{p,(N_2)} dT - \int_{T_0}^T C_{p,(O_2)} dT \quad (3.50)$$

$$(\Delta H_f^\circ)_{H_2}^{298} = (\Delta H_f^\circ)_{O_2}^{298} = (\Delta H_f^\circ)_{N_2}^{298} = 0 \quad (3.51)$$

III. 4.6 Calcul des Entropies absolues des réactions d'équilibre :

$$K=1 \quad \Delta S_1(T=T_1, T_2) = 2 \int_{0^\circ K}^T C_{P(CO)} \frac{dT}{T} + \int_{0^\circ K}^T C_{P(O_2)} \frac{dT}{T} - 2 \int_{0^\circ K}^T C_{P(CO_2)} \frac{dT}{T} \quad (3.52)$$

$$K=2 \quad \Delta S_2(T=T_1, T_2) = 2 \int_{0^\circ K}^T C_{P(H_2O)} \frac{dT}{T} + \int_{0^\circ K}^T C_{P(H_2)} \frac{dT}{T} - 2 \int_{0^\circ K}^T C_{P(H_2O)} \frac{dT}{T} \quad (3.53)$$

$$K=3 \quad \Delta S_3(T=T_1, T_2) = 2 \int_{0^\circ K}^T C_{P(H_2)} \frac{dT}{T} + \int_{0^\circ K}^T C_{P(O_2)} \frac{dT}{T} - 2 \int_{0^\circ K}^T C_{P(H_2O)} \frac{dT}{T} \quad (3.54)$$

$$K=4 \quad \Delta S_4(T=T_1, T_2) = 2 \int_{0^\circ K}^T C_{P(H)} \frac{dT}{T} - \int_{0^\circ K}^T C_{P(H_2)} \frac{dT}{T} \quad (3.55)$$

$$K=5 \quad \Delta S_5(T=T_1, T_2) = 2 \int_{0^\circ K}^T C_{P(O)} \frac{dT}{T} - \int_{0^\circ K}^T C_{P(O_2)} \frac{dT}{T} \quad (3.56)$$

$$K=6 \quad \Delta S_6(T=T_1, T_2) = 2 \int_{0^\circ K}^T C_{P(N)} \frac{dT}{T} - \int_{0^\circ K}^T C_{P(N_2)} \frac{dT}{T} \quad (3.57)$$

$$K=7 \quad \Delta S_7(T=T_1, T_2) = 2 \int_{0^\circ K}^T C_{P(NO)} \frac{dT}{T} - \int_{0^\circ K}^T C_{P(N_2)} \frac{dT}{T} - \int_{0^\circ K}^T C_{P(O_2)} \frac{dT}{T} \quad (3.58)$$

En fin, pour $k=1, 7$:

$$Kp_K(T=T_1, T_2) = \exp\left(-\frac{\Delta H_K^\circ}{R \cdot T} + \frac{\Delta S_K^\circ}{R}\right) \quad (3.59)$$

III.4.7 La méthode de résolution du système d'équations :

Toutes les données du problème sont maintenant connues. L'étape suivante est de choisir la méthode de résolution du système :

Il existe plusieurs méthodes numériques de résolution d'un système d'équations non linéaires selon la forme du système :

- Méthode de Newton .
- Méthodes de type « approximations successives » :
 - Méthode de Jacobi .
 - Méthode de Gauss Seidel .

III.4.7.1 Principe de la méthode de Newton :

Soit à résoudre un système de n équations à n variables :

$$\left. \begin{aligned} F_1 (X_1, X_2, \dots, X_n) &= 0 \\ F_2 (X_1, X_2, \dots, X_n) &= 0 \\ F_3 (X_1, X_2, \dots, X_n) &= 0 \\ F_4 (X_1, X_2, \dots, X_n) &= 0 \\ \dots & \\ F_n (X_1, X_2, \dots, X_n) &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (3.60)$$

écrit simplement sous la forme $F(x) = 0$, $X [x_1, x_2, \dots, x_n]^T$ et 0 est un vecteur nul de \mathbb{R}^n

supposons qu'à la $j^{\text{ème}}$ itération on ait trouvé la $j^{\text{ème}}$ solution approchée :

$$X^{(j)} = [x_1^j, x_2^j, \dots, x_n^j] \quad (3.61)$$

La solution exacte étant :

$$X = \begin{bmatrix} x_1^{(j)} + \varepsilon_1^{(j)} \\ x_2^{(j)} + \varepsilon_2^{(j)} \\ \dots \\ x_n^{(j)} + \varepsilon_n^{(j)} \end{bmatrix} \quad (3.62)$$

On aura par conséquent pour la $i^{\text{ème}}$ équation et à la $j^{\text{ème}}$ itération :

$$f_i (x_1^{(j)} + \varepsilon_1^{(j)}, x_2^{(j)} + \varepsilon_2^{(j)}, \dots, x_n^{(j)} + \varepsilon_n^{(j)}) = 0 \quad (3.63)$$

Appliquons la formule de développement en série de Taylor d'ordre 1 pour une fonction à plusieurs Variables :

$$f_i = f_i(x_1^{(j)}, x_2^{(j)}, \dots, x_n^{(j)}) + \frac{\partial f_i}{\partial x_1} \varepsilon_1^{(j)} + \frac{\partial f_i}{\partial x_2} \varepsilon_2^{(j)} + \dots + \frac{\partial f_i}{\partial x_n} \varepsilon_n^{(j)} \quad (3.64)$$

Si l'on fait varier i de 1 à n , on aura n équations du même type que la précédente, système qui peut s'écrire tout simplement sous la forme suivante :

$$f(X^{(j)}) + B(X^{(j)}) \times E^{(j)} = 0 \quad (3.65)$$

avec :

$$B(X^{(j)}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial X_1} & \frac{\partial f_1}{\partial X_2} & \dots & \frac{\partial f_1}{\partial X_n} \\ \frac{\partial f_2}{\partial X_1} & \frac{\partial f_2}{\partial X_2} & \dots & \frac{\partial f_2}{\partial X_n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \frac{\partial f_n}{\partial X_1} & \frac{\partial f_n}{\partial X_2} & \dots & \frac{\partial f_n}{\partial X_n} \end{bmatrix} \quad (3.66)$$

On donne la matrice [B] en annexe 1.

$$\text{et } E^{(j)} = [\varepsilon_1^{(j)}, \varepsilon_2^{(j)}, \varepsilon_3^{(j)}, \dots, \varepsilon_n^{(j)}] \quad (3.67)$$

En supposant que $B(X^{(j)})$ est une matrice inversible, on aura :

$$E^{(j)} = -B^{-1}(X^{(j)}) \times f(X^{(j)}) \quad (3.68)$$

d'où il vient

$$X^{(j+1)} = X^{(j)} - B^{-1}(X^{(j)}) \times f(X^{(j)}) \quad (3.69)$$

Avec $j = 0, 1, 2, \dots$

Pour $j = 0$, on prendra $X^{(0)}$ des valeurs quelconques (ou pour certains problèmes les valeurs initiales)

III.4.7.2 Application de la méthode de Newton :

Le choix de l'ordre des équations (f_i) est fait de manière de ne pas avoir des zéro dans la diagonale de la matrice B, pour l'inverser facilement :

Pour une itération j nous avons :

1- Calcul des douze fonctions f_i du système :

$$f_7^{(j)} = n(7) \cdot \sqrt{n(3) \cdot p} - n(1) \cdot \sqrt{kp(1) \cdot n(12)}$$

$$f_6^{(j)} = n(6) \cdot \sqrt{n(8) \cdot p} - n(2) \cdot \sqrt{kp(2) \cdot n(12)}$$

$$f_8^{(j)} = n(8) \cdot \sqrt{n(3) \cdot p} - n(2) \cdot \sqrt{kp(3) \cdot n(12)}$$

$$f_{10}^{(j)} = n(10) \cdot \sqrt{p} - \sqrt{kp(4) \cdot n(12) \cdot n(8)}$$

$$f_9^{(j)} = n(9) \cdot \sqrt{p} - \sqrt{kp(5) \cdot n(12) \cdot n(3)}$$

$$f_{11}^{(j)} = n(11) \cdot \sqrt{p} - \sqrt{kp(6) \cdot n(12) \cdot n(4)}$$

$$f_5^{(j)} = n(5) - \sqrt{kp(7) \cdot n(4) \cdot n(3)}$$

$$f_1^{(j)} = n(1) + n(7) - r_c \cdot n$$

$$f_3^{(j)} = 2 \cdot n(1) + n(7) + 2 \cdot n(3) + n(2) + n(6) + n(9) + n(5) - (2 \cdot (n + (\frac{m}{4})))$$

$$f_2^{(j)} = 2 \cdot n(8) + 2 \cdot n(2) + n(10) + n(6) - (r_c \cdot m)$$

$$f_4^{(j)} = 2 \cdot n(4) + n(11) + n(5) - (7.52 \cdot (n + (\frac{m}{4})))$$

$$f_{12}^{(j)} = n(1) + n(2) + n(3) + n(4) + n(5) + n(6) + n(7) + n(8) + n(9) + n(10) + n(11) - n(12)$$

Ensuite :

2- Calcul des éléments de la matrice B d'après la formule (3.66)

3- Calcul de l'inverse de B, B^{-1} .

4- Calcul des nouvelles valeurs des nombres de moles des 11 espèces produits de Combustion, et aussi la nouvelle valeur du nombre de mole total $n(12)$, par la formule (3.69)

refaire les même étapes de 1 à 4 pour l'itération (j+1) jusqu'à une précision souhaitée (ϵ).

III .4.8 Calcul de l'enthalpie des produits de combustion :

On calcul l'enthalpie de produits de combustion pour T_1 et T_2 .

Pour T_1 :

$$H (T_1) = \sum_{i=1}^{11} n_i(T_1) H_i(T_1) \quad (3.70)$$

$$H (T_1) = \sum_{i=1}^{11} x_i(T_1) Nt(T_1) H_i(T_1) \quad (3.71)$$

$$\boxed{H (T_1) = Nt(T_1) \sum_{i=1}^{11} [x_i(T_1) H_i(T_1)]} \quad (3.72)$$

Pour T_2 :

$$H (T_2) = \sum_{i=1}^{11} n_i(T_2) H_i(T_2) \quad (3.73)$$

$$H (T_2) = \sum_{i=1}^{11} x_i(T_2) Nt(T_2) H_i(T_2) \quad (3.74)$$

$$\boxed{H (T_2) = Nt(T_2) \sum_{i=1}^{11} [x_i(T_2) H_i(T_2)]} \quad (3.75)$$

Avec :

$$H_i(T) = (\Delta H_f^\circ)_i + [\Delta H_i]_{T_0}^T = (\Delta H_f^\circ)_i + \int_{T_0}^T C_{p,i} dT \quad (3.76)$$

Ce qui donne :

$$H(T=T_f, T_2) = Nt(T) \left[x_{CO_2}(T) [(\Delta H_f^\circ)_{CO_2}^{T_0} + \int_{T_0}^T C_{p,CO_2} dT] + \dots + x_N(T) [(\Delta H_f^\circ)_N^{T_0} + \int_{T_0}^T C_{p,N} dT] \right] \quad (3.77)$$

III.5 CALCUL DE LA TEMPERATURE DE COMBUSTION PAR LA MÉTHODE DE DICHOTOMIE :

D'après la formule (3.2) :

$$H_R(T_e) = H_p(T_p) \quad (3.78)$$

Peut s'exprimer par :

$$\Delta H(T_p) = H_p(T_p) - H_R = 0 \quad (3.79)$$

$$f(T) = H_p(T_p) - H_R = 0 \quad (3.80)$$

donc pour $T = T_1, T_2$ on a :

$$f(T_1) = H_p(T_1) - H_R = 0 \quad (3.81)$$

$$f(T_2) = H_p(T_2) - H_R = 0 \quad (3.82)$$

Si $f(T_1) \cdot f(T_2) < 0 \Rightarrow T_p \in [T_1, T_2]$.

D'ou :

$$T_o = \frac{T_1 + T_2}{2} \quad (3.83)$$

- Si $f(T_o) \cdot f(T_2) < 0 \Rightarrow T_p \in [T_o, T_2]$.

$$\Rightarrow T_p = \frac{T_o + T_2}{2} \quad (3.84)$$

- Si $f(T_o) \cdot f(T_1) < 0 \Rightarrow T_p \in [T_1, T_o]$.

$$\Rightarrow T_p = \frac{T_1 + T_o}{2} \quad (3.85)$$

On arrête les calculs jusqu'à avoir :

$$|T_p - T_o| \leq \epsilon \quad \text{avec} \quad \epsilon \ll 1 \quad (3.86)$$

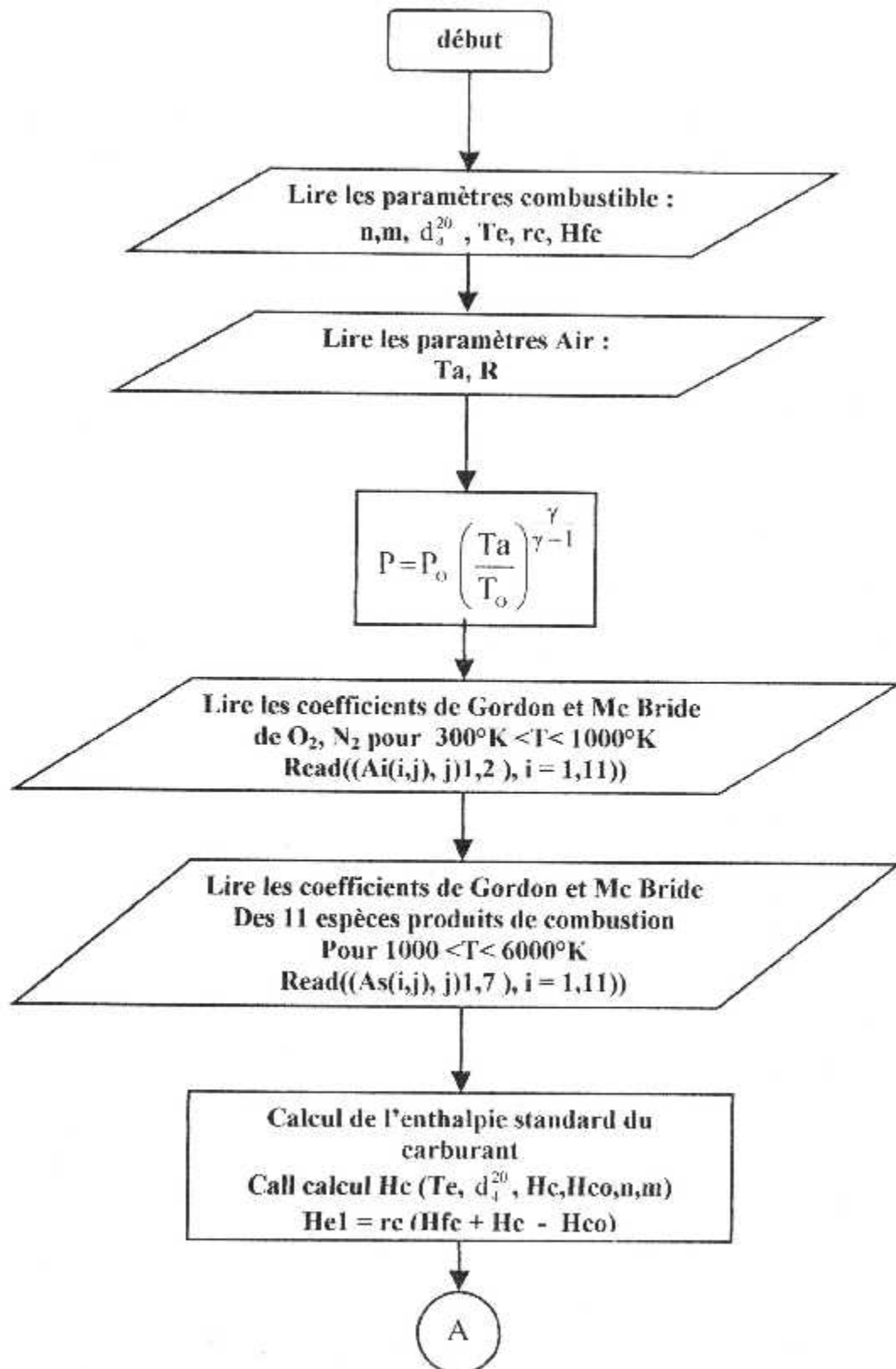
D'ou :

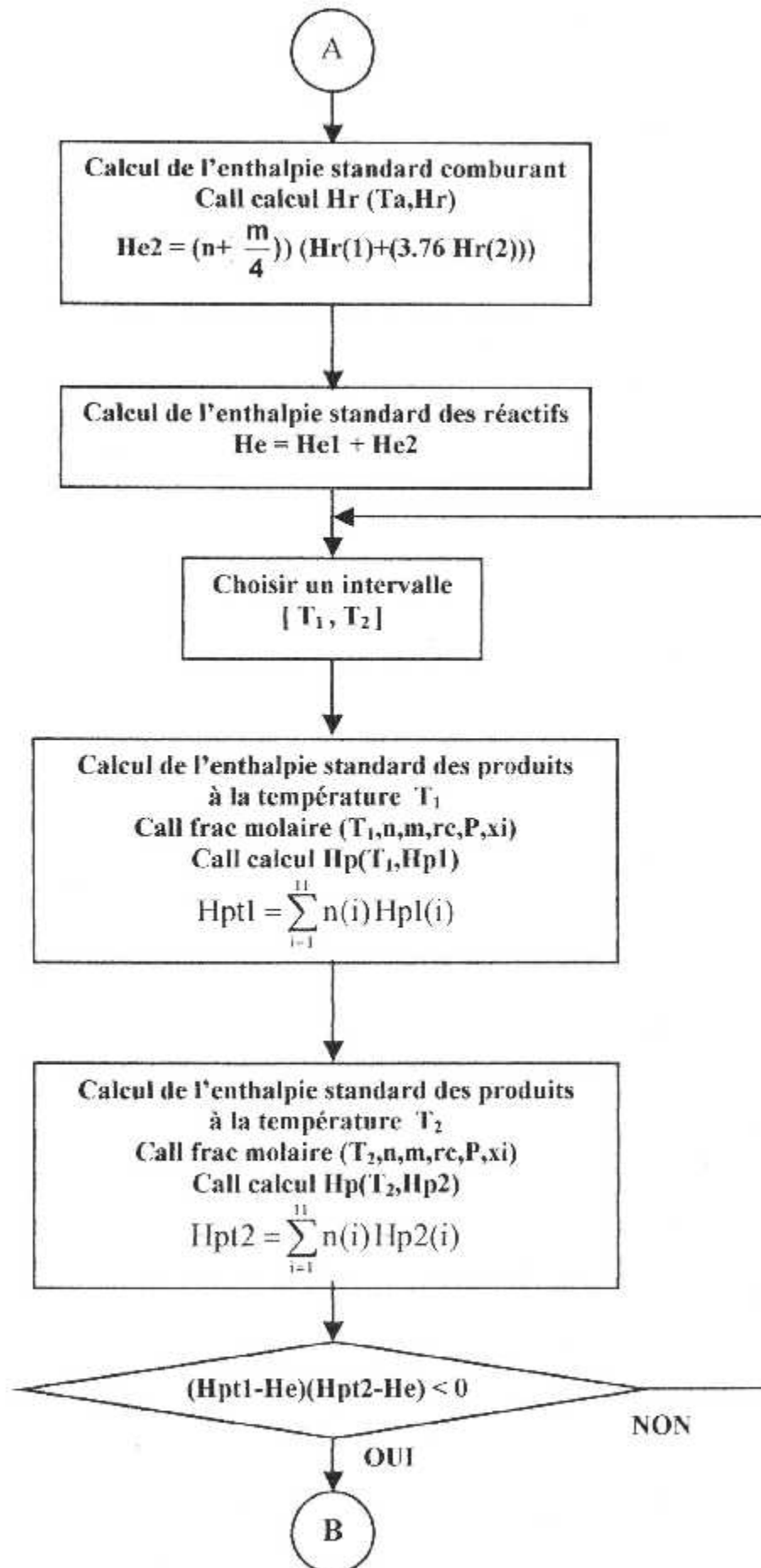
$$T_C \approx T_p$$

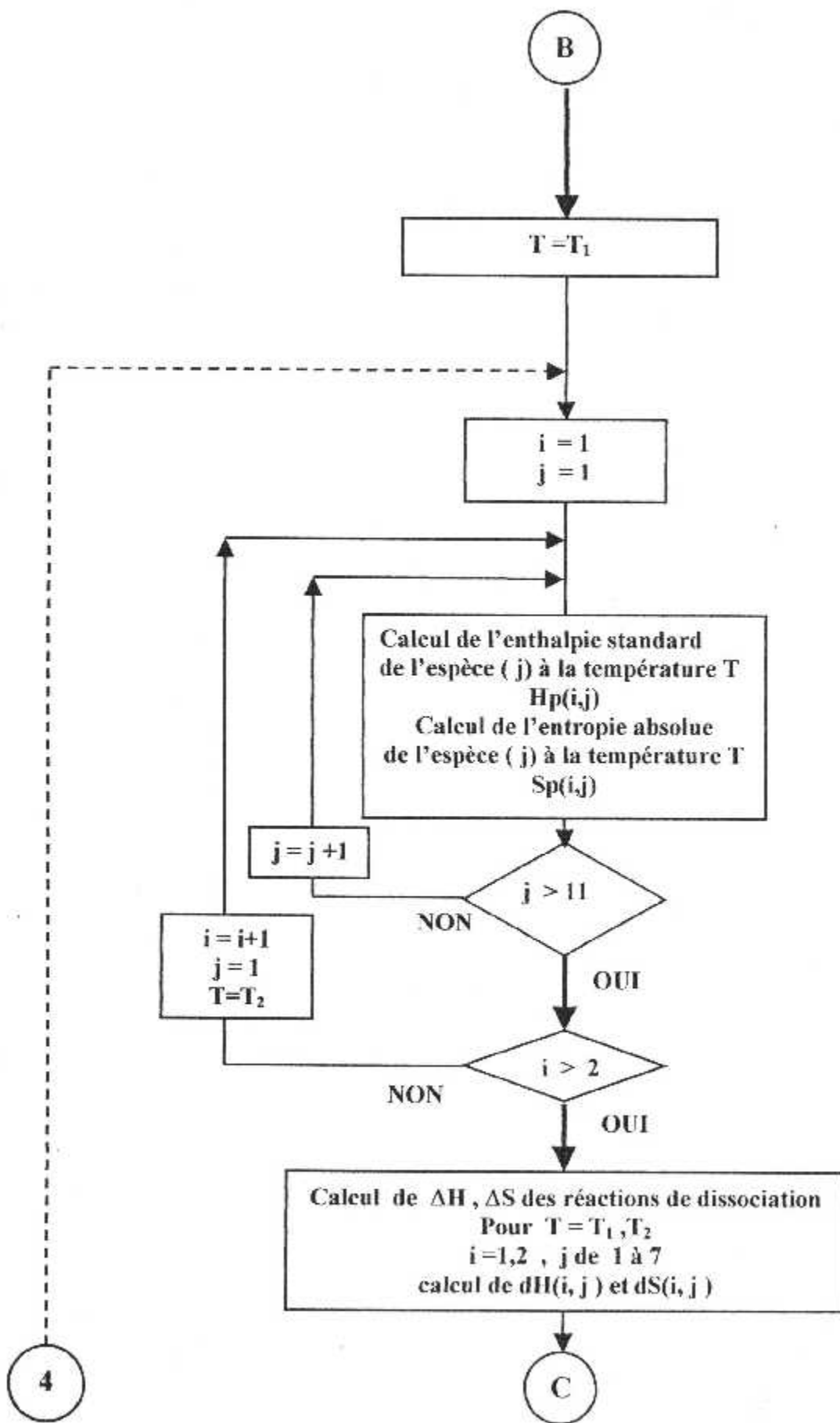
Chapitre IV

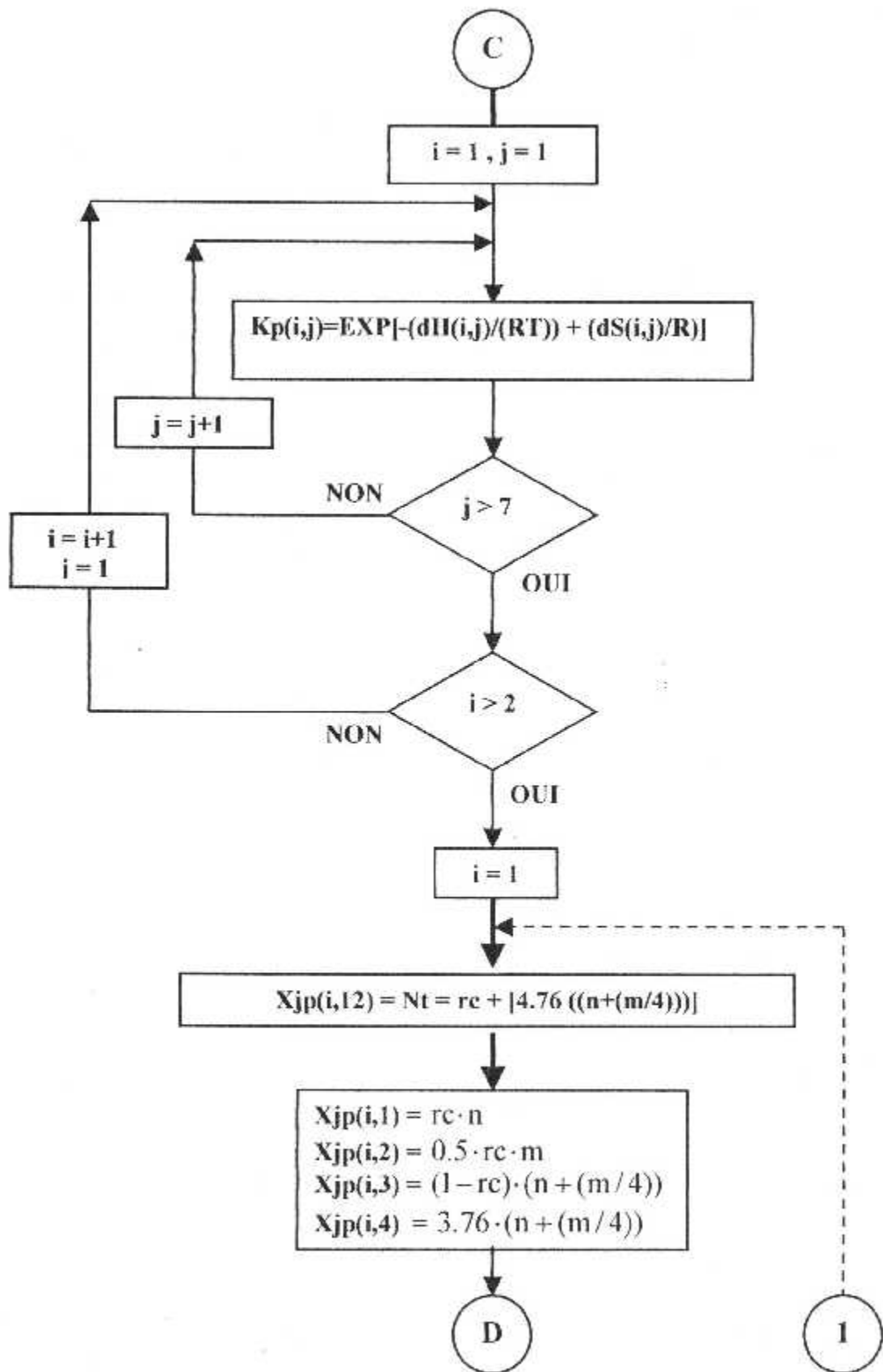
Organigramme
et
programme

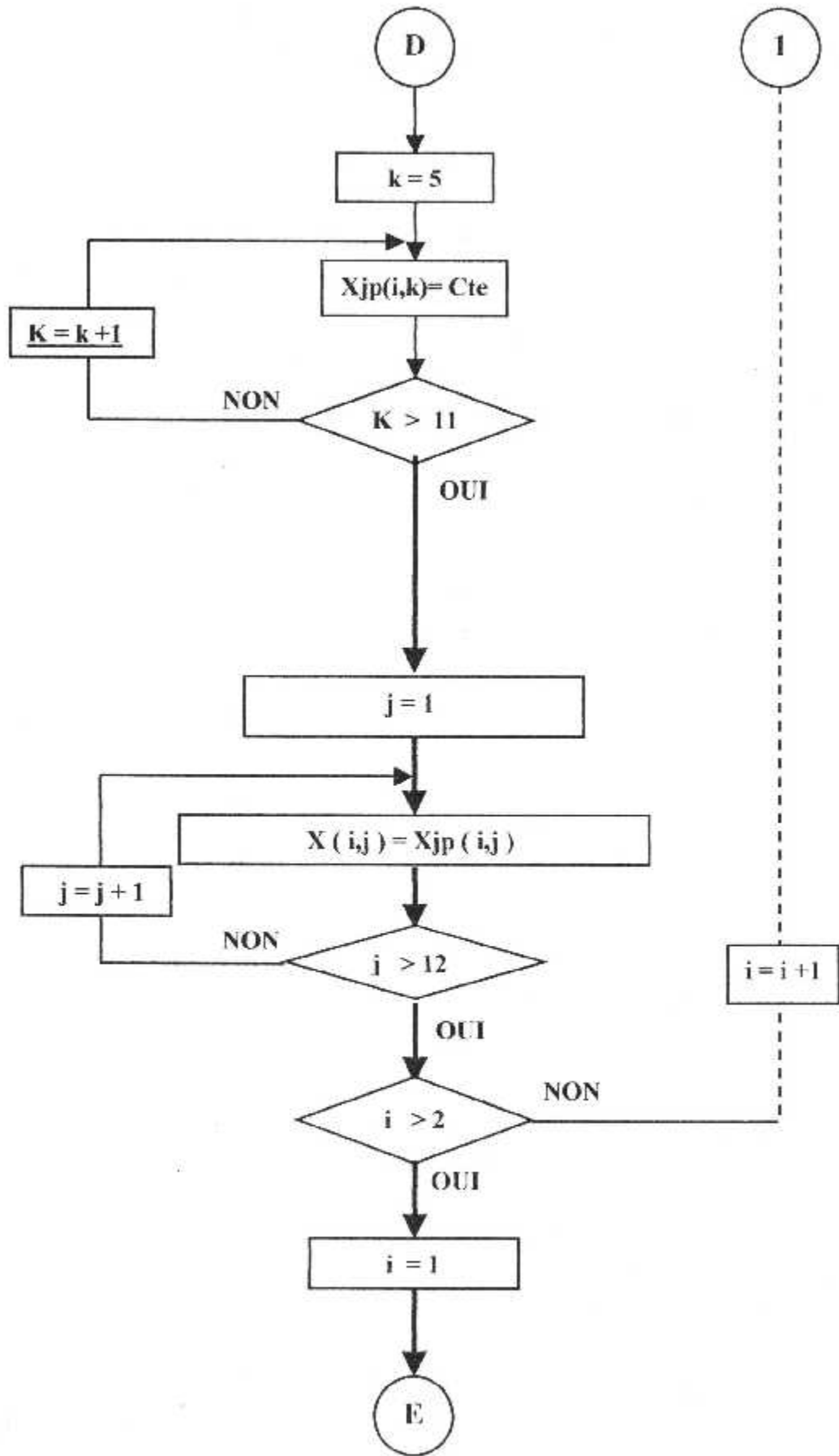
IV.1 ORGANIGRAMME :

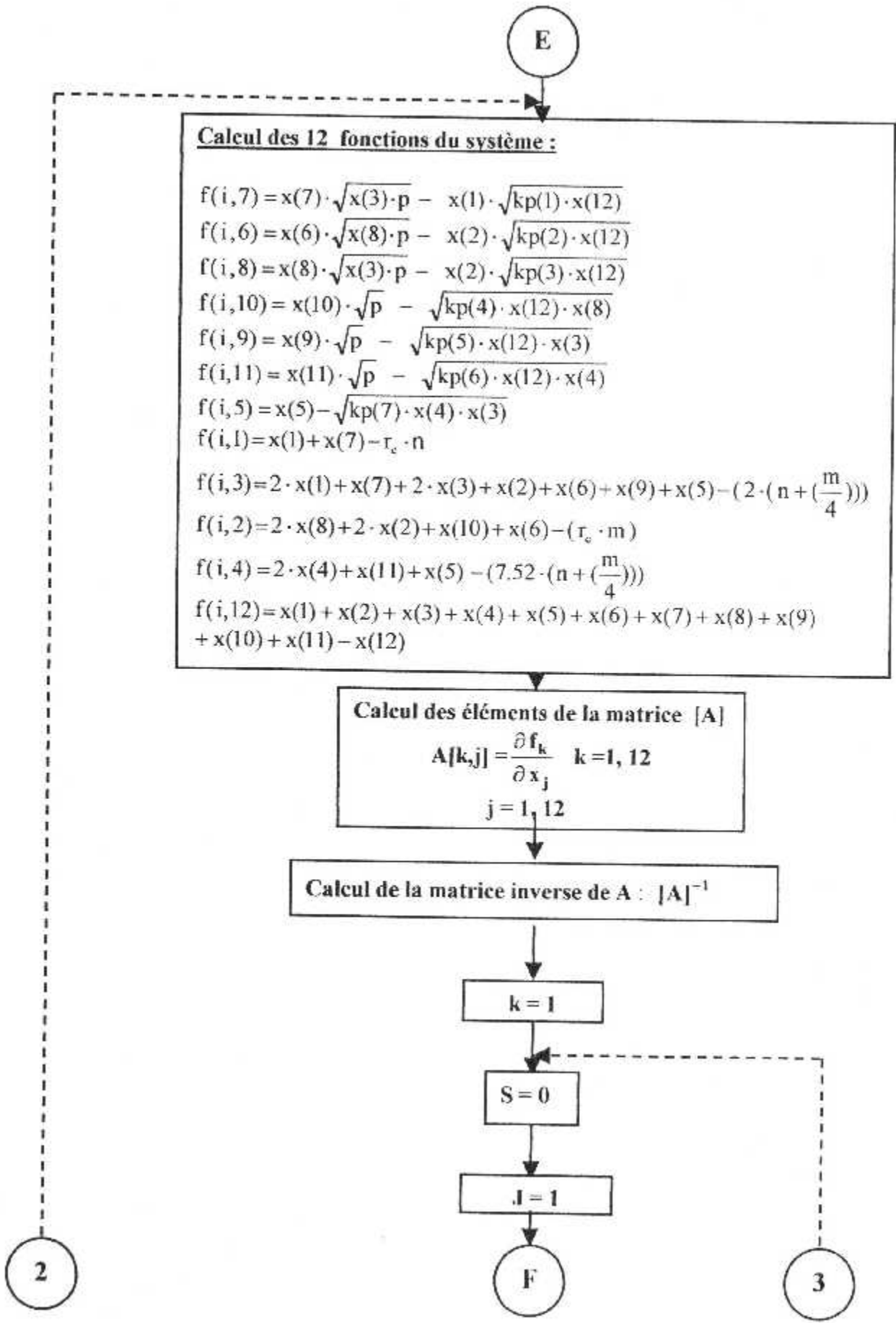


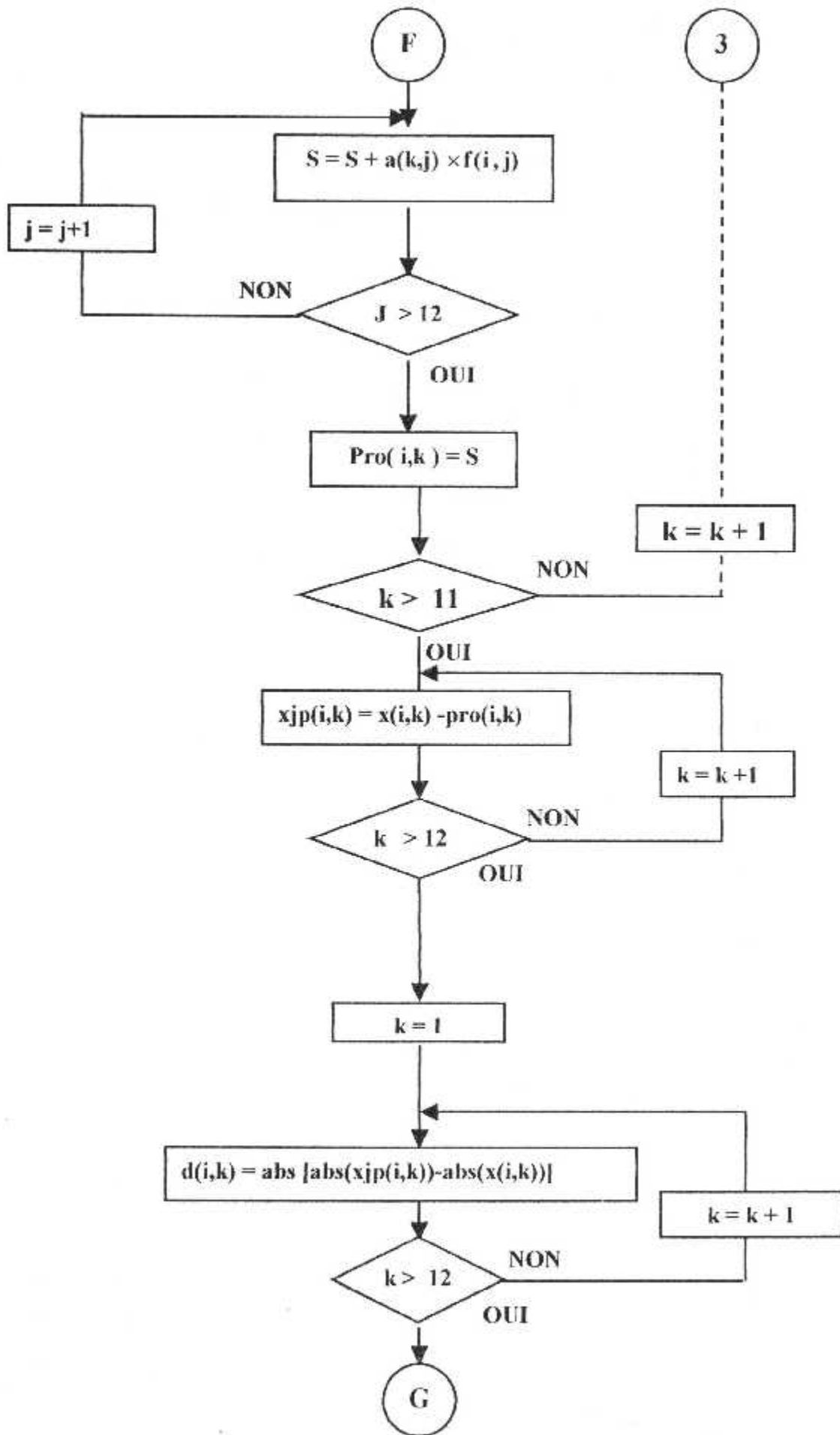


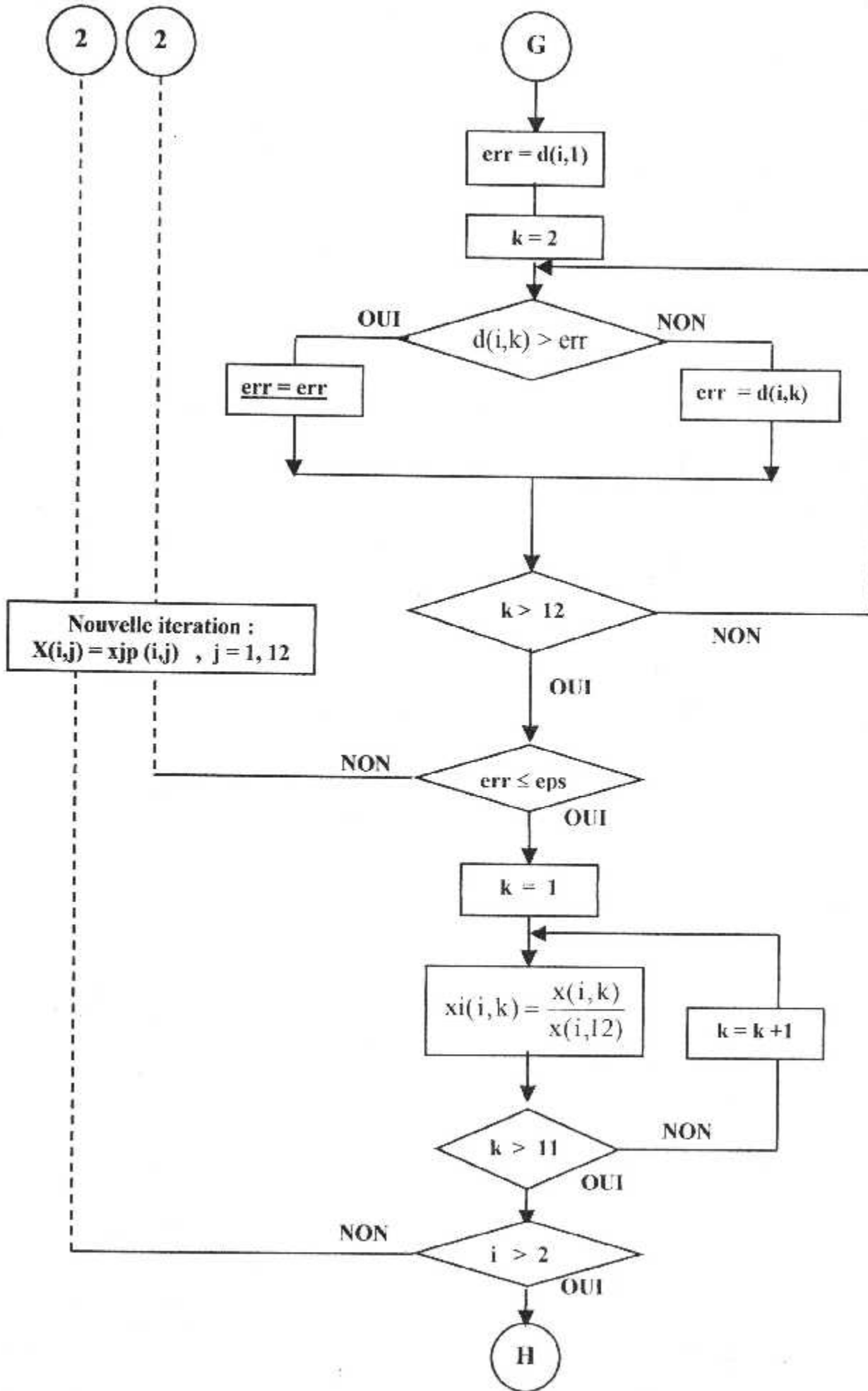


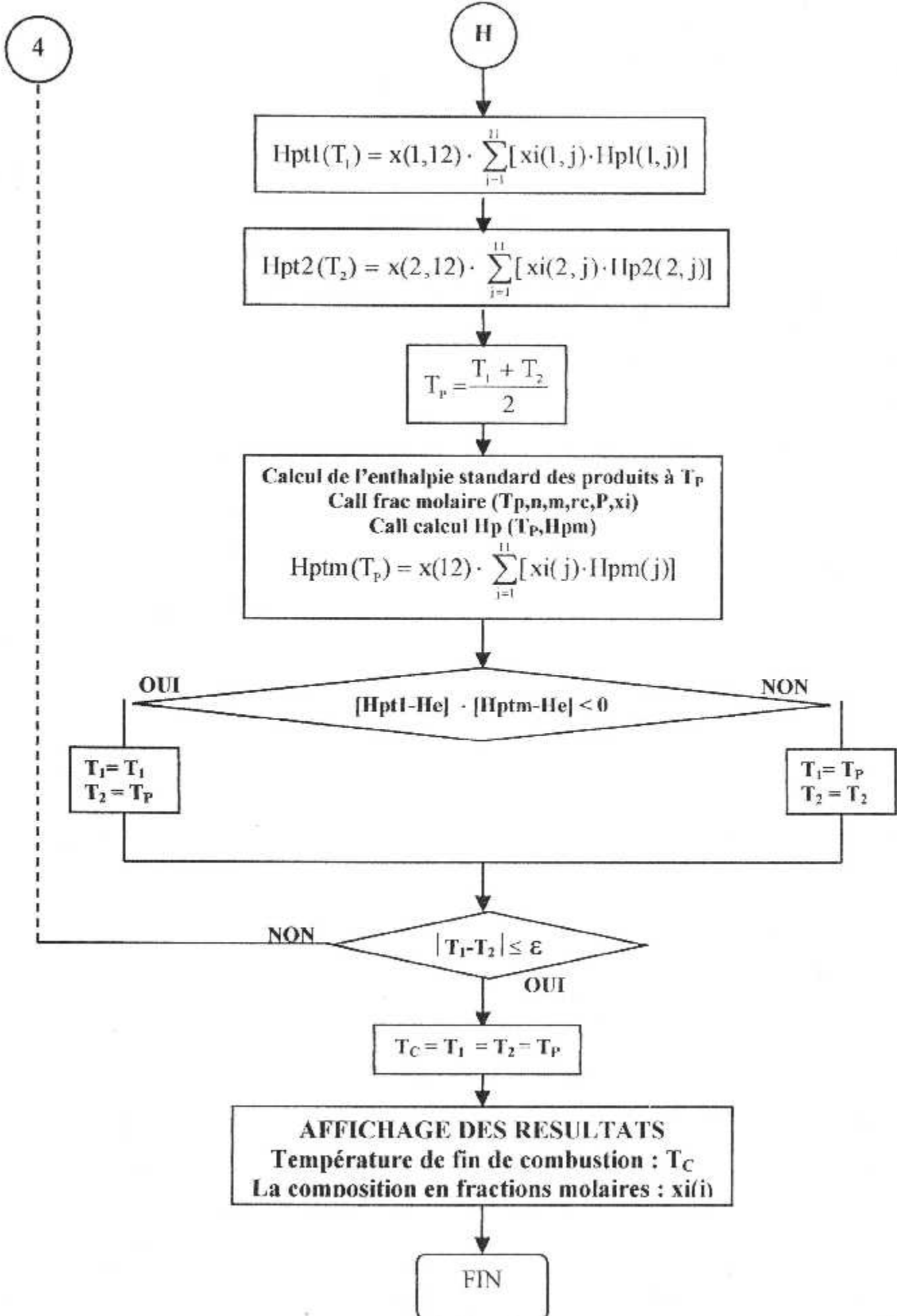












IV.2 PROGRAMME :

```

c*****
*   Programme de Calcul de la température de combustion d'un hydrocarbure CnHm   *
c*****

real(8)rc, d,Te,Ta,T,n,m,Hfc,Hc,Hco,He1,He2,He,Hr(2),Kp(7),xi(12)
+,p,T1,T2,Hp1(11),Hp2(11),Hpt1,Hpt2,epsd,TP,Hpm(11),Hptm,Hp(11)

write(*,*)'donner la valcur de n et m'
read(*,*)n,m
write(*,*)'donner la temperature d entrée du combustible Te'
read(*,*)Te
write(*,*)'donner la teperature d entrée de l air Ta'
read(*,*)Ta
write(*,*)'donner l enthalpie de formation du combustible'
read(*,*)Hfc
write(*,*)'donner la densité de combustible '
read(*,*)d
write(*,*)'donner la valeur de la richesse rc'
read(*,*)rc

c*****
c*****          Calcul de l'enthalpie standard des réactifs          *****
c*****

c Calcul de la pression par la formule de poisson

      p=((Ta/298)**3)*(sqrt(Ta/298))

c Calcul de l'enthalpie standard du carburant

      call calculHc(Te,d,Hc,Hco,n,m)
      He1=rc*(Hfc+Hc-Hco)

c Calcul de l'enthalpie standard du comburant

      call calculHr(Ta,Hr)
      He2=(n+(m/4))*(Hr(1)+(3.76*Hr(2)))

c Calcul de l'enthalpie standard des réactifs

      He=He1+He2

```

```

c*****
c                               LA METHODE DE DICHOTOMIE
c*****

```

c erreur de la méthode

```
951   epsd=1E-10
```

c l'intervalle de température

```
8282  continue
      T1=1000
      T2=4100
```

c Calcul de l'enthalpie standard des produits à la température T1

```

      call frac molaire (T1,n,m,rc,p,xi)
      call calculHp(T1,Hp1)
      Som=0
      do 2004 i=1,11
        Som=Som+(xi(i)*Hp1(i))
2004  continue
      Hpt1=Som*xi(12)

```

c Calcul de l'enthalpie standard des produits à la température T2

```

      call frac molaire (T2,n,m,rc,p,xi)
      call calculHp(T2,Hp2)
      Som=0
      do 2005 i=1,11
        Som=Som+(xi(i)*Hp2(i))
2005  continue
      Hpt2=Som*xi(12)

```

c Vérification si la température de combustion appartient à [T1,T2]

```

      if(((Hpt1-He)*(Hpt2-He)).gt.0)goto 8282
8383  continue

```

c Valeur initiale de la température Tp

```
Tp=(T1+T2)/2
```

c Calcul de l'enthalpie standard des produits à la température Tp

```

      call frac molaire (Tp,n,m,rc,p,xi)
      call calculHp(Tp,Hpm)
      Som=0
      do 2006 i=1,11
        Som=Som+(xi(i)*Hpm(i))

```


2006 continue

$$H_{ptm} = \text{Som} * xi(12)$$

c Réduction de l'intervalle [T1,T2]

```

if(((Hpt1-He)*(Hptm-He)).gt.0)then
  T1=Tp
else
  T2=Tp
endif
if(abs(T1-T2).gt.cpsd)then
goto 8383
else

```

```

c*****
c
c
c*****

```

ECRITURE DES RESULTATS

```

write(*,*)'enthalpie standards des reactifs He=',He
write(*,*)'enthalpie standards des produits Hp=',Hptm
write(*, '/')
write(*,*)'la température de fin de combustion Tc=',T1
write(*, '/')

```

```

write(*,*)'CO2 =', xi(1)
write(*,*)'H2O =', xi(2)
write(*,*)'O2 =', xi(3)
write(*,*)'N2 =', xi(4)
write(*,*)'NO =', xi(5)
write(*,*)'OII =',xi(6)
write(*,*)'CO =', xi(7)
write(*,*)'H2 =', xi(8)
write(*,*)'O =',xi(9)
write(*,*)'H =',xi(10)
write(*,*)'N =',xi(11)

```

```

write(*,*)'Le nombre de mole total Nt =', xi(12)

```

```

endif
753 stop
end

```

```

c*****
c
c
c*****

```

FIN DU PROGRAMME

```

c*****
c          LES SUBROUTINES DU PROGRAMME
c*****

```

```

c*****
c*****      Subroutine Calcul enthalpie standard pour 300<T<1000 °K      *****
c*****

```

```

      subroutine calculHr(y,H)
      real(8) A,B,C,D,E,F,y,H(2),Ai(7,2),R
      R=1.98719
      open(unit=5,file='coef1.dat',status='unknown')
      do 10 i=1,7
      read(5,'(2E15.7)')(Ai(i,j),j=1,2)
10    continue
      close(5)

```

```

      do 105 j=1,2
      A=Ai(1,j)
      B=(Ai(2,j)/2)*y
      C=(Ai(3,j)/3)*(y**2)
      D=(Ai(4,j)/4)*(y**3)
      E=(Ai(5,j)/5)*(y**4)
      F=Ai(6,j)/y
      H(j)=(A+B+C+D+E+F)*R*y
105  continue
      return
      end

```

```

c*****
c*****      Subroutine Calcul enthalpie standard pour 1000<T<6000 °K      *****
c*****

```

```

      subroutine calculHp(y,Hp)
      real(8) A,B,C,D,E,F,y,R,Hp(11),As(7,11),Hb(11),Ho(11)
      R=1.98719
      open(unit=6,file='coef3.dat',status='unknown')
      do 40 i=1,7
      read(6,'(11E15.7)')(As(i,j),j=1,11)
40    continue
      close(6)

```

```

      do 110 j=1,11
      A=As(1,j)
      B=(As(2,j)/2)*y
      C=(As(3,j)/3)*(y**2)
      D=(As(4,j)/4)*(y**3)
      E=(As(5,j)/5)*(y**4)

```

```

      F=As(6,j)/y
      Hp(j)=(A+B+C+D+E+F)*R*y
110  continue
      return
      end

```

```

c*****
c***** Subroutine Calcul enthalpie standard pour le combustible *****
c*****

```

```

      subroutine calculHc(z,d,lld1,Hd2,n,m)
      real(8) kl2,kl1,bl,lld1,Hd2,z,zo,y,n,m
      y=z-273
      kl1=(0.403*y)+(0.000405*(y**2))
      bl=sqrt((0.9952*d)+0.00806)
      Hd1=(kl1/bl)*((12*n)+m)
      zo=25
      kl2=(0.403*zo)+(0.000405*(zo**2))
      Hd2=(kl2/bl)*((12*n)+m)
      return
      end

```

```

c*****
*
c***** Subroutine Calcul entropie molaire pour 1000<T<6000 °K *****
c*****
*

```

```

      subroutine calculSp(y,Sp)
      real(8) A,B,C,D,E,F,y,R,Sp(11),As(7,11)
      R=1.98719
      open(unit=7,file='coef3.dat',status='unknown')
      do 70 i=1,7
70  read(7,'(11E15.7)')(As(i,j),j=1,11)
      continue
      close(7)

```

```

      do 115 j=1,11
      A=As(1,j)*log(y)
      B=As(2,j)*y
      C=(As(3,j)/2)*(y**2)
      D=(As(4,j)/3)*(y**3)
      E=(As(5,j)/4)*(y**4)
      F=As(7,j)
      Sp(j)=(A+B+C+D+E+F)*R
115  continue
      return
      end

```

```

c*****
c*****      Soubroutine calcul la constatnte d'équilibre Kp      *****
c*****

```

```

subroutine calculKp(y,Kp)
real(8) Kp(7),dH(7),dS(7),Hp(11),Sp(11),y,R
R=1.98719

```

```

call calculHp(y,Hp)

```

```

dH(1)=(2*Hp(7))+Hp(3)-(2*Hp(1))
dH(2)=(2*Hp(6))+Hp(8)-(2*Hp(2))
dH(3)=(2*Hp(8))+Hp(3)-(2*Hp(2))
dH(4)=(2*Hp(10))-Hp(8)
dH(5)=(2*Hp(9))-Hp(3)
dH(6)=(2*Hp(11))-Hp(4)
dH(7)=(2*Hp(5))-Hp(3)-Hp(4)

```

```

call calculSp(y,Sp)

```

```

dS(1)=(2*Sp(7))+Sp(3)-(2*Sp(1))
dS(2)=(2*Sp(6))+Sp(8)-(2*Sp(2))
dS(3)=(2*Sp(8))+Sp(3)-(2*Sp(2))
dS(4)=(2*Sp(10))-Sp(8)
dS(5)=(2*Sp(9))-Sp(3)
dS(6)=(2*Sp(11))-Sp(4)
dS(7)=(2*Sp(5))-Sp(3)-Sp(4)

```

```

do 120 i=1,7

```

```

Kp(i)=exp(-(dH(i)/(R*y))+(dS(i)/R))

```

```

120 continue

```

```

return
end

```

```

c*****
c***** SUBROUTINE DE CALCUL DES FRACTIONS MOLAIRES *****
c*****

```

```

c*****
c***** LA METHODE DE NEWTON *****
c*****

```

subroutine frac molaire (T,na,m,phi,p,xi)

```

double precision f(12),a(12,12),x(12),xi(12),pro(12)
+,d(12),xjp(12)
double precision kp(7),na,m,phi,p,eps,err
+,s,epsb,v1(26),v2(26),v3(26),v4(26),v5(26),v6(26),v7(26)
+,v8(26),v9(26),v10(26),v11(26),v12(26)

```

eps=1.000E-12

call calculKp(T,kp)

```

c***** LE VECTEUR INITIAL DES NOMBRES DE MOLE DES ESPECES *****

```

```

x(1)=phi*na
x(2)=phi*m*0.5
x(3)=(1-phi)*(na+(m/4))
x(4)=3.76*(na+(m/4))
x(5)=2
x(6)=2
x(7)=2
x(8)=2
x(9)=2
x(10)=2
x(11)=2

x(12)=phi+(4.76*(na-(m/4)))

```

```

c***** CALCUL DES FONCTIONS (Fi) DU SYSTEME *****

```

```

888 f(7)=(x(7)*dsqrt(x(3)*p))-(dsqrt(kp(1)*x(12))*x(1))
f(6)=(x(6)*dsqrt(x(8)*p))-(dsqrt(kp(2)*x(12))*x(2))
f(8)=(x(8)*dsqrt(x(3)*p))-(dsqrt(kp(3)*x(12))*x(2))
f(10)=(x(10)*sqrt(p)) - dsqrt((kp(4)*x(12)*x(8)))
f(9)=(x(9)*sqrt(p)) - dsqrt((kp(5)*x(3)*x(12)))
f(11)=(x(11)*sqrt(p)) - dsqrt(kp(6)*x(4)*x(12))
f(5)=(x(5)) - dsqrt((kp(7)*x(4)*x(3)))
f(1)=abs(x(1))+abs(x(7)) - (phi*na)

```

```

f(3)=abs(2*x(1))+abs(x(7))+abs(2*x(3))+abs(x(2))+abs(x(6))
++abs(x(9))+abs(x(5))
+-(2*(na+(m/4)))
f(2)=abs(2*x(8))+abs(2*x(2))+abs(x(10))+abs(x(6))-(phi*m)
f(4)=abs(2*x(4))+abs(x(11))+abs(x(5))-(7.52*(na+(m/4)))
f(12)=abs(x(1))+abs(x(2))+abs(x(3))+abs(x(4))+abs(x(5))
++abs(x(6))+abs(x(7))+abs(x(8))
++abs(x(9))+abs(x(10))+abs(x(11))-abs(x(12))

```

```

a(7,7)=dsqrt(x(3)*p)
a(7,3)=(x(7)*0.5*dsqrt(p/x(3)))
a(7,1)=-(dsqrt(kp(1)*x(12)))
a(7,12)= -0.5*(dsqrt(kp(1)/x(12))*x(1))

```

```

a(6,6)=dsqrt(x(8)*p)
a(6,8)=(x(6)*0.5*dsqrt(p/x(8)))
a(6,2)=-(dsqrt(kp(2)*x(12)))
a(6,12)= -0.5*(dsqrt(kp(2)/x(12))*x(2))

```

```

a(8,8)=dsqrt(x(3)*p)
a(8,3)=(x(8)*0.5*dsqrt(p/x(3)))
a(8,2)=-(dsqrt(kp(3)*x(12)))
a(8,12)= -0.5*(dsqrt(kp(3)/x(12))*x(2))

```

```

a(10,10)=(sqrt(p))
a(10,8)= -0.5* dsqrt((kp(4)*x(12)/x(8)))
a(10,12)= -0.5* dsqrt((kp(4)*x(8)/x(12)))

```

```

a(9,9)=(sqrt(p))
a(9,3)= -0.5* dsqrt((kp(5)*x(12)/x(3)))
a(9,12)= -0.5* dsqrt((kp(5)*x(3)/x(12)))

```

```

a(11,11)=sqrt(p)
a(11,4)= -0.5* dsqrt(kp(6)*x(12)/x(4))
a(11,12)= -0.5* dsqrt(kp(6)*x(4)/x(12))

```

```

a(5,5)=1.0
a(5,4)= -0.5* dsqrt((kp(7)*x(3)/x(4)))
a(5,3)= -0.5* dsqrt((kp(7)*x(4)/x(3)))

```

```

a(1,1)=1.0
a(1,7)=1.0

```

```

a(3,1)=2.0
a(3,7)=1.0
a(3,3)=2.0
a(3,2)=1.0
a(3,6)=1.0
a(3,9)=1.0
a(3,5)=1.0

```

```

a(2,8)=2.0
a(2,2)=2.0
a(2,10)=1.0
a(2,6)=1.0

```

```

a(4,4)=2.0
a(4,11)=1.0
a(4,5)=1.0

```

```

a(12,1)=1.0
a(12,2)=1.0
a(12,3)=1.0
a(12,4)=1.0
a(12,5)=1.0
a(12,6)=1.0
a(12,7)=1.0
a(12,8)=1.0
a(12,9)=1.0
a(12,10)=1.0
a(12,11)=1.0
a(12,12)=-1.0

```

```

c***** CALCUL DE LA MATRICE INVERSE DE [A] *****

```

```

n=12
call escalade(n,a)

```

```

c***** CALCUL DES NOMBRES DE MOLE A L'ITERATION i+1 *****

```

```

do 147 i=1,12
  s=0

  do 148 j=1,12
    s=s+(a(i,j)*f(j))
148  continue
  pro(i)=s
147  continue
  do 149 i=1,12
    xjp(i)=x(i)-pro(i)
149  continue

  do 115 i=1,12
    d(i)=abs(abs(xjp(i))-abs(x(i)))
115  continue
  err=d(1)
  do 116 i=2,12
    if(d(i).gt.err) then
      err=d(i)
    else

```

```

        err=err
        endif
116    continue

c***** TEST DE CONVERGENCE DE LA METHODE DE NEWTON *****

        if(err.gt.eps) then

            do 117 i=1,12

                x(i)=abs(xjp(i))
117    continue

                goto 888
            else
                do 118 i=1,11
                    xi(i)= x(i)/x(12)
118    continue
                    xi(12)=x(12)

                endif
            return
        end

```

```

c*****
c***** SUBROUTINE DE CALCUL DE LA MATRICE INVERSE *****
c*****

```

```

subroutine escalade(n,a)
double precision a(12,12),p(12),q(12),r,d,s

        d=(a(1,1)*a(2,2))-a(1,2)*a(2,1)
        r=a(1,1)
        a(1,1)=a(2,2)/d
        a(2,2)=r/d
        a(1,2)=-a(1,2)/d
        a(2,1)=-a(2,1)/d
        if(n.eq.2) then
            do 55 i=1,n
                do 56 j=1,n
                    a(i,j)=a(i,j)
56    continue
55    continue
            goto 30
        endif
        do 50 i=2,(n-1)

```


c Calcul de p(i)

```

do 10 j=1,i
  s=0
  do 11 k=1,i
    s=s+a(j,k)*a(k,i+1)
11  continue
    p(j)=s
10  continue

```

c Calcul de q(i)

```

do 110 j=1,i
  s=0
  do 13 k=1,i
    s=s+a(i+1,k)*a(k,j)
13  continue
    q(j)=s
110 continue

```

c Calcul de r

```

s=0
do 14 j=1,i
  s=s+q(j)*a(j,i+1)
14  continue
  r=a(i+1,i+1)-s

```

c Calcul de a(i+1,i+1)

$$a(i+1,i+1)=1.00/r$$

c Calcul de a3

```

do 15 j=1,i
  a(i+1,j)=-a(i+1,i+1)*q(j)
15  continue

```

c Calcul de a2

```

do 16 j=1,i
  a(j,i+1)=-p(j)*a(i+1,i+1)
16  continue

```

c Calcul de a1

```

do 17 j=1,i
  do 18 k=1,i
    a(j,k)=a(j,k)-p(j)*a(i+1,k)
18  continue

```

```
17  continue
    if(i.eq.n-1) then
      goto 30
    else
      do 19 j=1,i+1
      do 20 k=1,i+1
        a(j,k)=a(j,k)
20  continue
19  continue
    endif
50  continue
30  write(*, '/')

    return
    end
```

Chapitre V

Résultats
et
interprétations

V.1.4 Evolution de la composition molaire des produits de combustion en fonction de la richesse :

L'influence de la richesse est montrée sur les graphes (Fig9 et fig10) pour le Kérosène et (Fig11 et fig12) pour le Gas-oil.

On remarque que les concentrations de (O_2 et N_2) diminuent avec l'augmentation de la richesse, par contre les autres concentrations croient sauf les courbes de (NO , OH et O) qui augmentent jusqu'à un maximum et en suite elles diminuent.

V.1.5 Evolution de la composition molaire des produits de combustion en fonction de la température d'entrée d'air :

L'évolution de la composition molaire des produits de combustion est montrées sur les graphes (fig13 jusqu'à fig19) pour le Kérosène et les graphes (fig20 jusqu'à fig26) pour le Gas-oil.

Il apparaît clairement que les courbes des produits de base de combustion (CO_2 , H_2O , O_2 et N_2) diminuent avec l'augmentation de la température d'entrée d'air, par contre les autres augmentent avec la température d'entrée d'air, cela est du à la dissociation des molécules en radicaux et atomes.

V.1.6 Analyse des exemples :

V.1.6.1 Kérosène :

On remarque que l'augmentation de la richesse fait augmenter les pourcentages de (CO_2 , CO et OH), par contre il n'y a pas une grande différence sur les pourcentages de ces derniers lorsque la température d'entrée d'air augmente. Donc on peut dire que la richesse influe directement sur la pollution.

V.1.6.2 Gasoil :

Il est claire que le gasoil est plus polluant que le kérosène, et on remarque la même chose sur l'influence de la richesse sur l'augmentation de la composition molaire de (CO_2 , CO et OH).

V.1 ANALYSE DES RESULTATS :

V.1.1 Evolution de la température de combustion en fonction de la richesse :

La température de fin de combustion est fonction de la richesse, son évolution en fonction de celle-ci est illustrée par une série de courbes (Fig1 et Fig2), pour les deux combustibles et pour différentes températures d'entrée d'air T_a .

En examinant l'allure d'une des courbes, nous pouvons remarquer que la température de combustion augmente avec la richesse jusqu'à atteindre une valeur maximale pour une richesse voisine de l'unité (mélange stœchiométrique).

Nous pouvons remarquer aussi que l'allure des courbes ne dépend pas de type de combustible, ce qui donne forte ressemblance à ces courbes.

V.1.2 Evolution de la température de combustion en fonction de la température d'entrée d'air :

L'effet de préchauffage des réactifs sur la température de fin de combustion est illustré par les graphes (Fig3 et Fig4) qui montre aussi la variation de la température de combustion pour différentes richesses et pour les deux combustibles.

On remarque que la température de fin de combustion augmente avec le température d'entrée d'air, cet effet s'explique par le fait que ce paramètre fait augmenter l'enthalpie des réactifs et des produits de combustion.

Le préchauffage correspond à la phase de compression pour le moteur d'avion par un compresseur, ou bien par un piston pour les moteurs à piston (moteur diesel).

V.1.3 Evolution de la composition molaire des produits de combustion en fonction de la température de combustion :

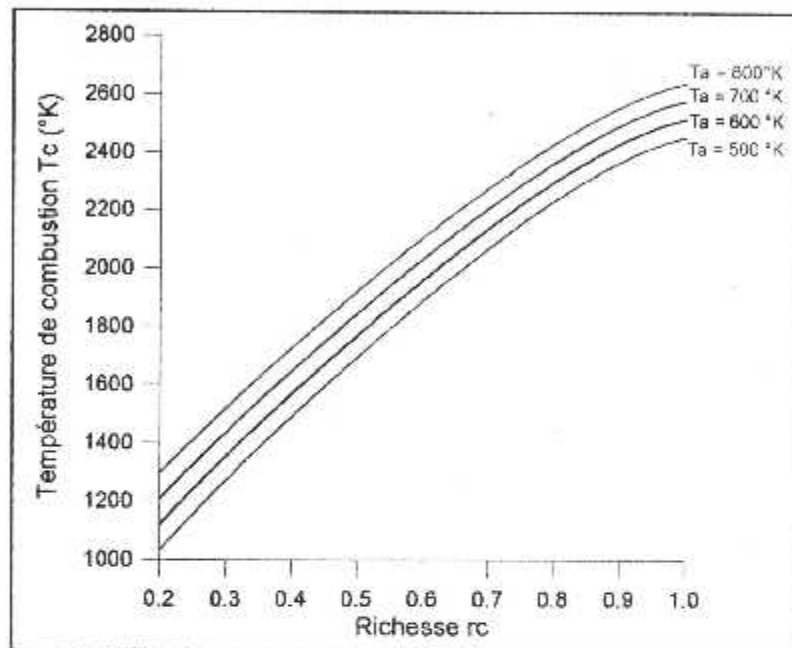
Les graphes (Fig5 et Fig6) montre l'évolution de la composition molaire des produits de combustion pour le Kérosène. Et les graphes (Fig7 et Fig8) pour le Gasoil.

On remarque que les fractions molaires de (H_2O et CO_2) diminuent avec l'augmentation de la température par contre les autres fractions molaires des produits de combustion augmentent avec l'augmentation de la température, mais la seule fraction qui a une allure différente est celle du O_2 . Et cela est dû au phénomène de la dissociation qui est importante à haute température.

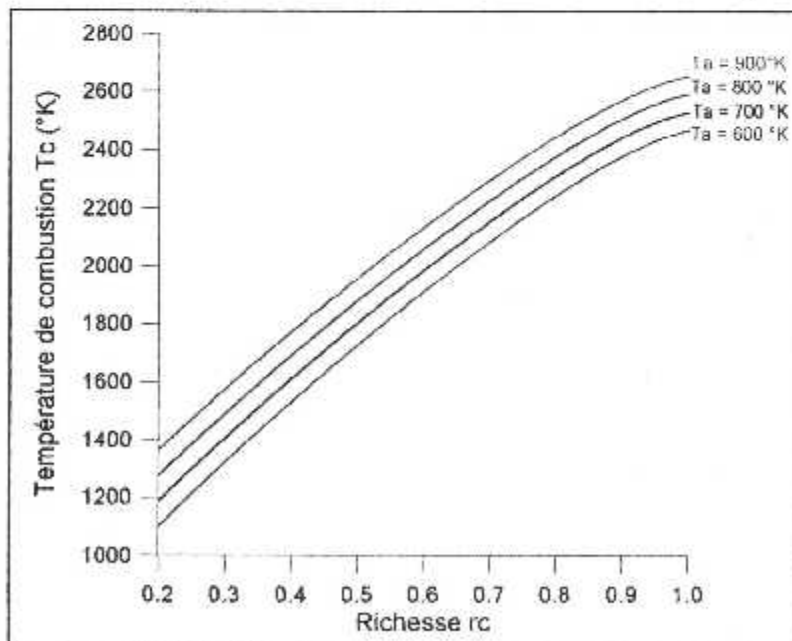
V.2 L'INFLUENCE DE LA RICHESSE ET LA TEMPERATURE D'ENTREE D'AIR SUR LA TEMPERATURE DE FIN DE COMBUSTION :

V.2.1 Influence de la richesse sur la température de combustion :

Pour étudier l'influence de la richesse sur la variation de la température de combustion, nous faisons varier le paramètre richesse (r_c) de 0.2 à 1.0 avec un pas de (1/100) pour différentes températures d'entrée d'air.



**Fig.1 - Evolution de la température de combustion en fonction de la richesse
Température d'injection du Kérosène ($T_e = 420$ °K)**



**Fig.2 – Evolution de la température de combustion en fonction de la richesse
Température d'injection du Gasoil ($T_e = 350$ °K)**

V.2.2 Influence de la température d'entrée d'air sur la température de combustion :

Pour chaque valeur des trois richesses considérées, l'évolution de la température de fin de combustion en fonction de la température d'entrée d'air pour les deux combustibles le Kérosène $C_{10.3}H_{20.6}$ et le Gasoil $C_{14.4}H_{24.9}$ sont représentés sur les figures (3 et 4).

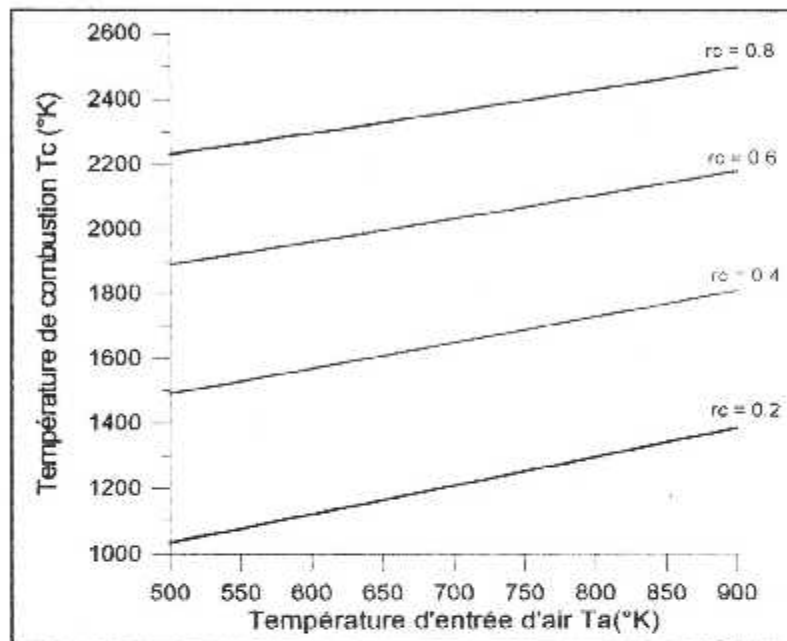


Fig.3 - Température de combustion en fonction de la température d'entrée d'air Kérosène $C_{10.3}H_{20.6}$ (la température d'entrée du carburant $T_e = 420^\circ K$)

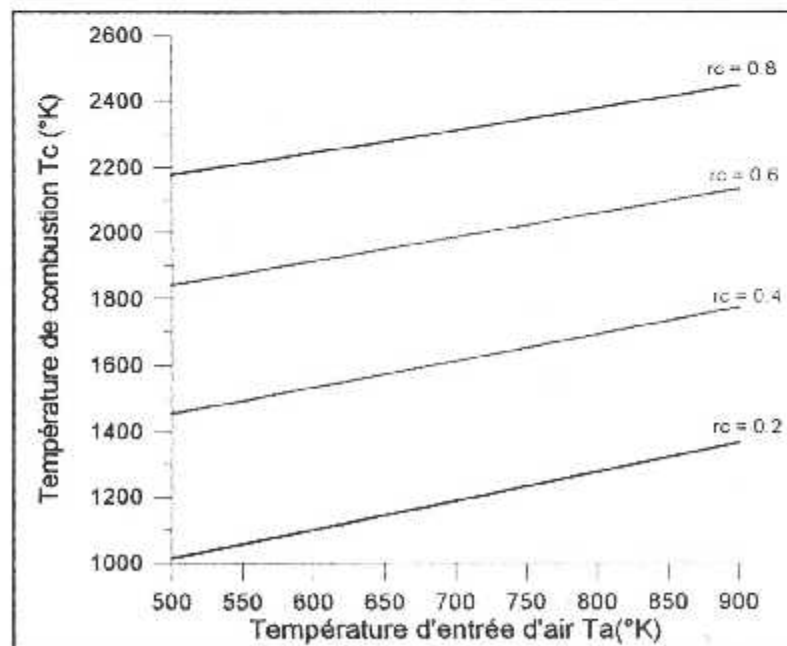


Fig.4 - Température de combustion en fonction de la température d'entrée d'air Gasoil $C_{14.4}H_{24.9}$ (la température d'entrée du carburant $T_e = 350^\circ K$)

V.3 L'INFLUENCE DE LA TEMPERATURE DE COMBUSTION, LA TEMPERATURE D'ENTRÉE D'AIR ET LA RICHESSE SUR LA COMPOSITION MOLAIRE DES PRODUITS DE COMBUSTION :

V.3.1 Influence de la température de combustion sur la composition molaire des produits de combustion :

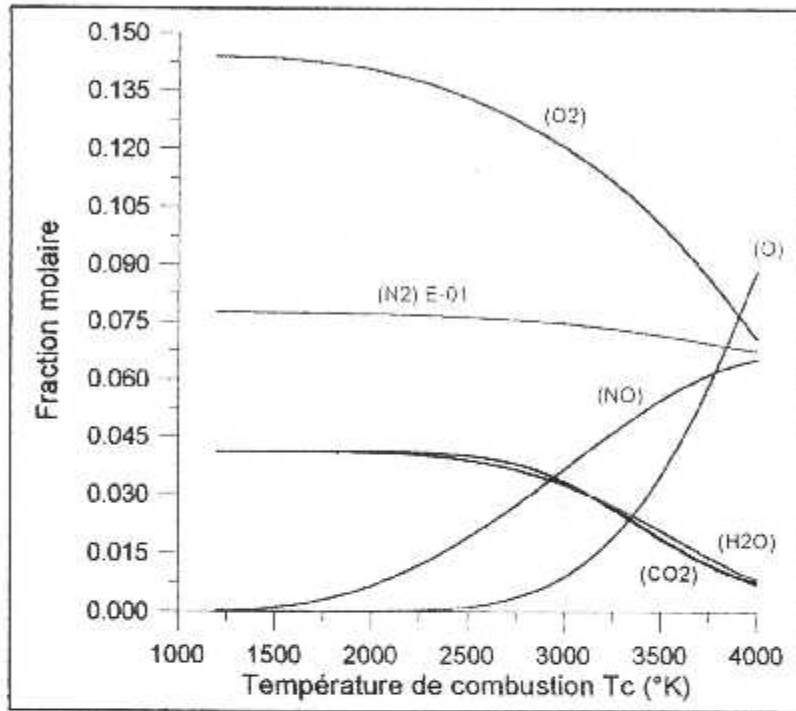


Fig.5 - Evolution de la composition molaire en fonction de la température de combustion Kérosène $C_{10.3}H_{20.6}$ (richesse $rc = 0.3$, $T_a = 700$ °K, $p = 20$ bars)

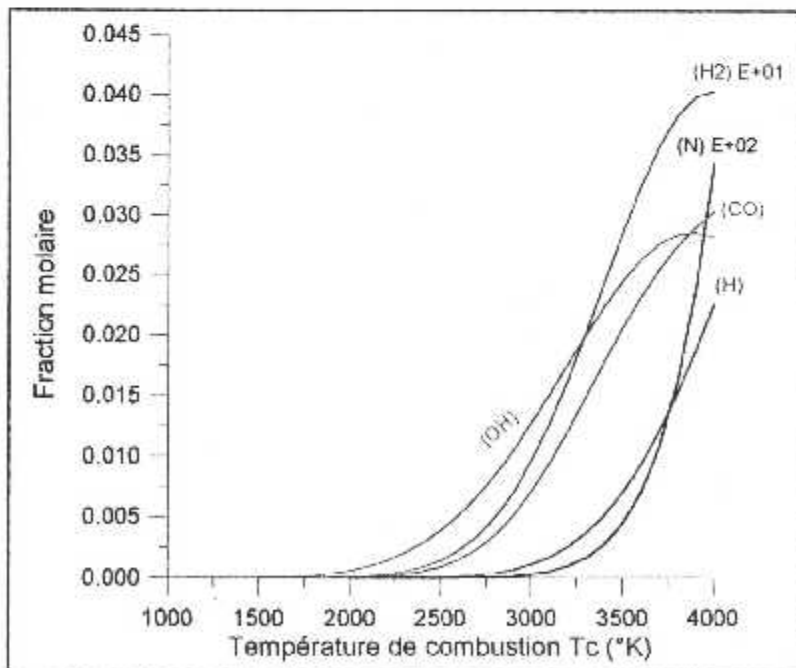


Fig.6 - Evolution de la composition molaire en fonction de la température de combustion Kérosène $C_{10.3}H_{20.6}$ (richesse $rc=0.3$, $T_a = 700$ °K, $p = 20$ bars)

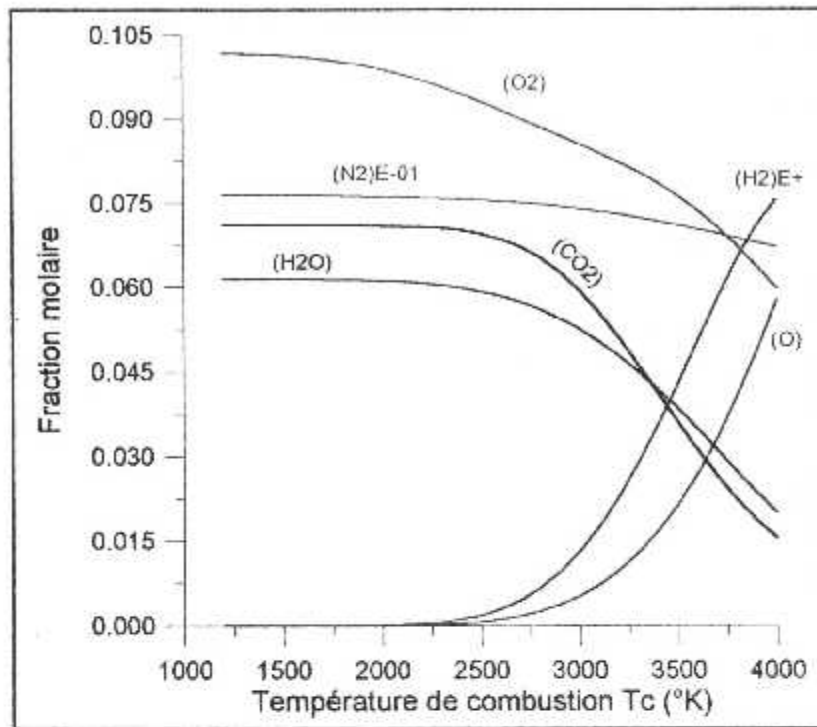


Fig.7 - Evolution de la composition molaire en fonction de la température de combustion Gasoil C_{14.4} H_{24.9} (richesse $r_c = 0.5$, $T_a = 850$ °K, $p = 40$ bars)

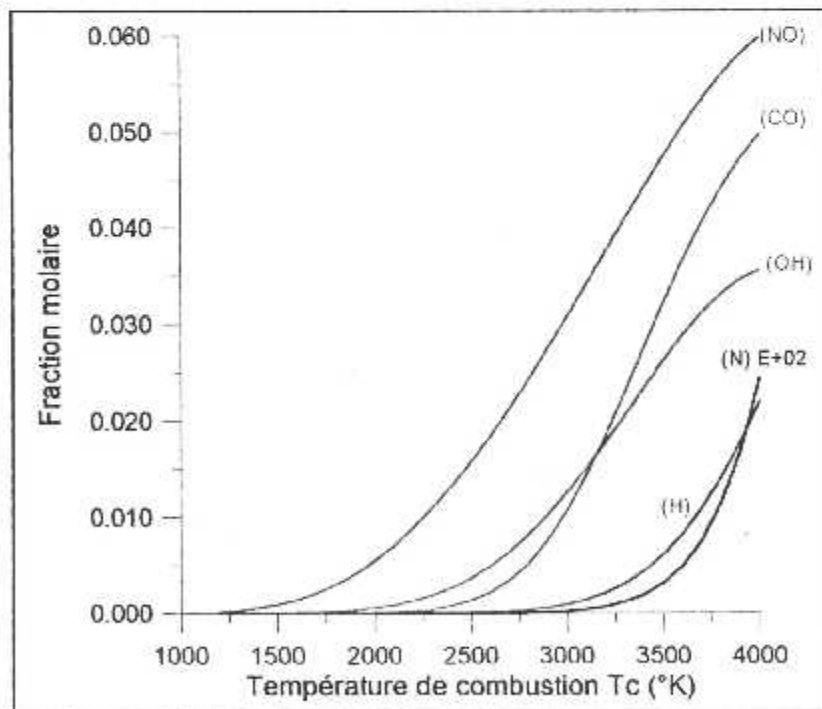
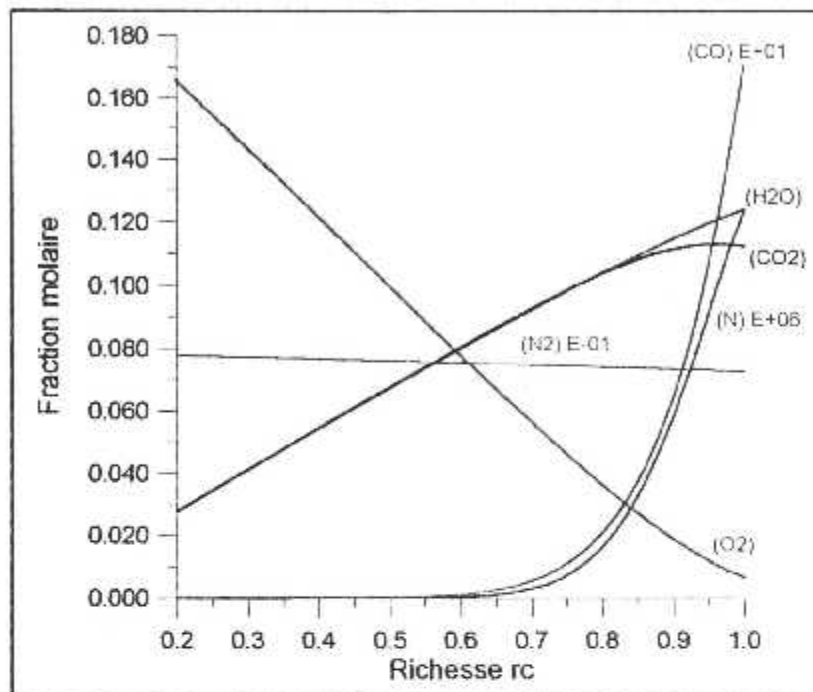
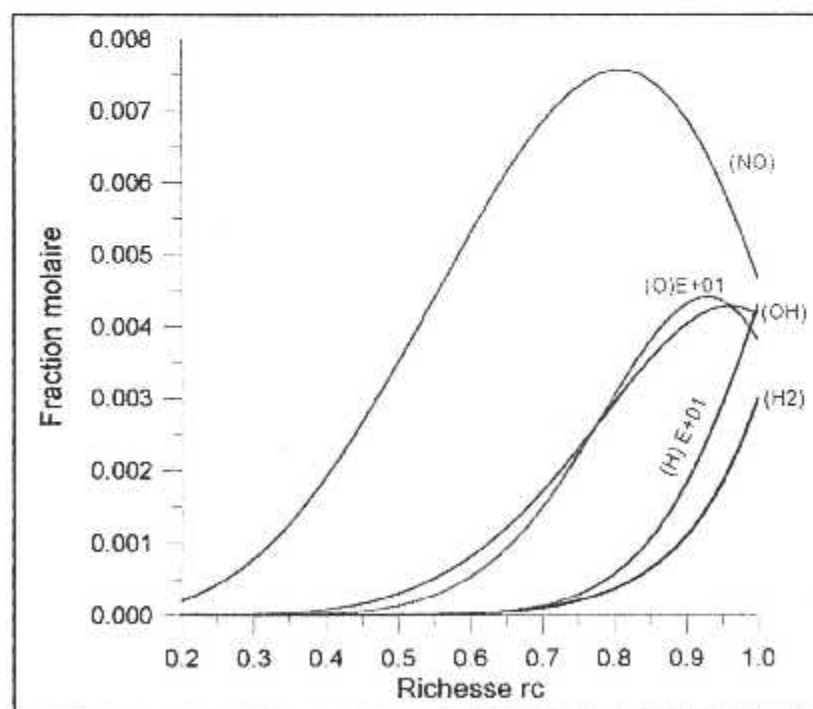


Fig.8 - Evolution de la composition molaire en fonction de la température de combustion Gasoil C_{14.4} H_{24.9} (richesse $r_c = 0.5$, $T_a = 850$ °K, $p = 40$ bars)

V.3.2 Influence de richesse sur la composition molaire des produits de combustion :



**Fig.9 - Evolution de la composition molaire en fonction de la richesse
Kérosène $C_{10.3}H_{20.6}$ ($T_a = 700$ °K, $p = 20$ bars)**



**Fig.10 - Evolution de la composition molaire en fonction de la richesse
Kérosène $C_{10.3}H_{20.6}$ ($T_a = 700$ °K, $p = 20$ bars)**

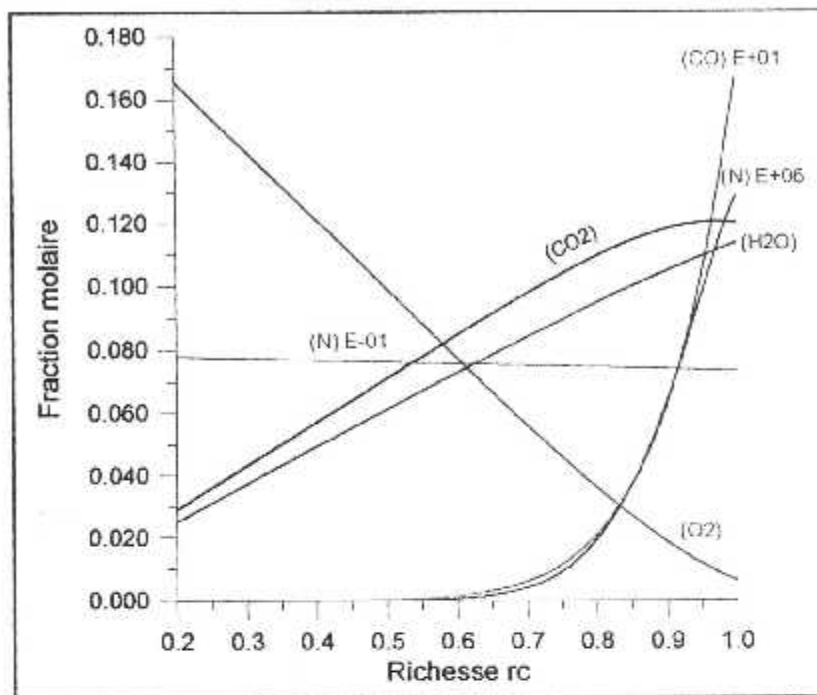


Fig.11 - Evolution de la composition molaire en fonction de la richesse
Gasoil C_{14.4} H_{24.9} (Ta = 850 °K, p = 40 bars)

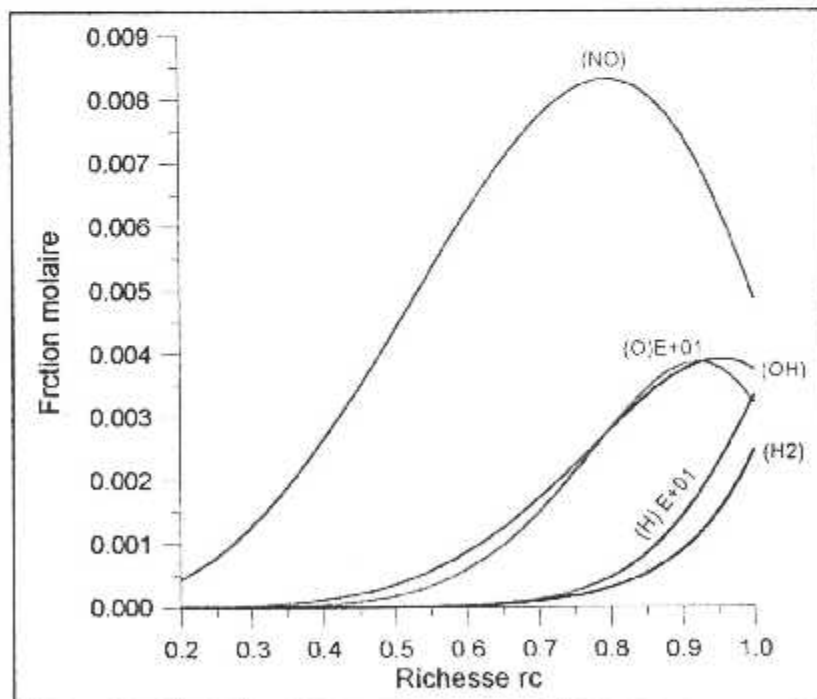


Fig.12 - Evolution de la composition molaire en fonction de la richesse
Gasoil C_{14.4} H_{24.9} (Ta = 850 °K, p = 40 bars)

V.3.3 Influence de la température d'entrée d'air sur la composition des produits de combustion :

A. Kérosène :

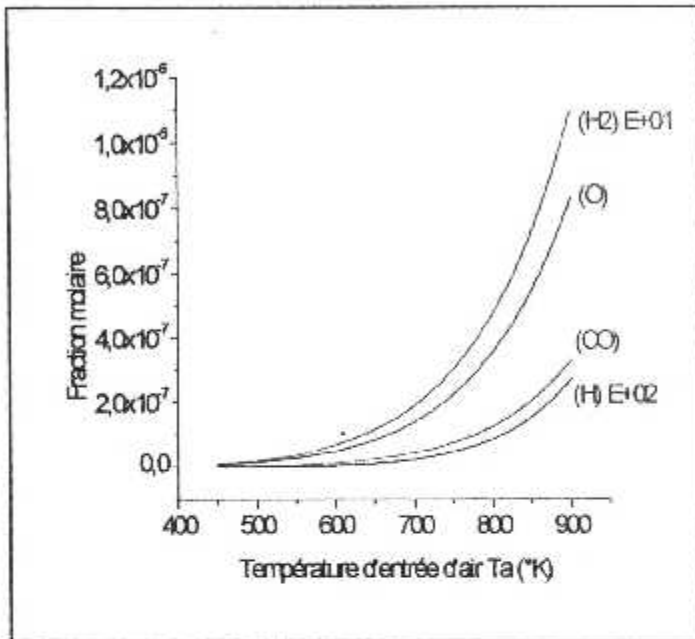


Fig.13 - composition de (O, H, H₂, CO) en fonction de la température d'air ($rc = 0.3$)
Kérosène C_{10.3} H_{20.6}

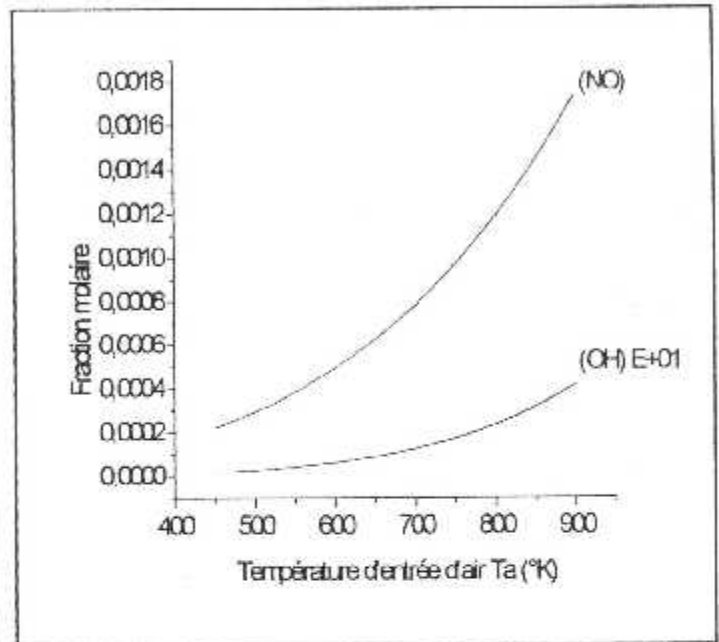


Fig.14 - composition de (NO,OH) en fonction de la température d'air ($rc = 0.3$)
Kérosène C_{10.3} H_{20.6}

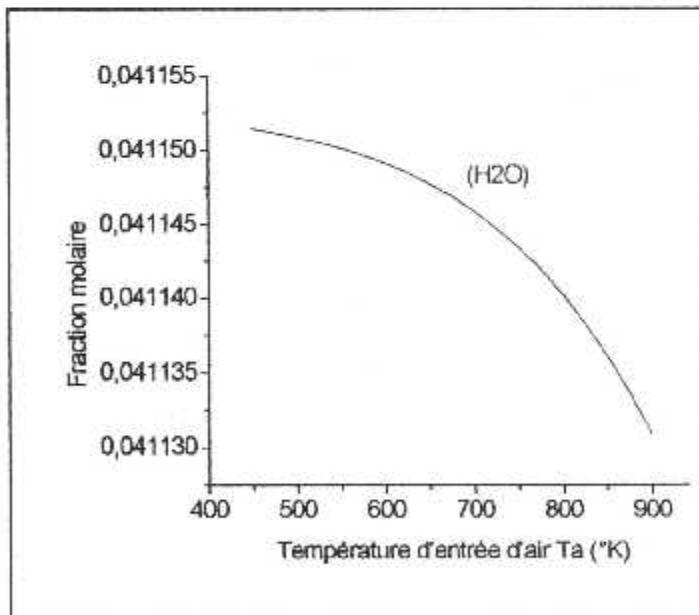


Fig.15 - composition de (H₂O) en fonction de la température d'air ($rc = 0.3$)
Kérosène C_{10.3} H_{20.6}

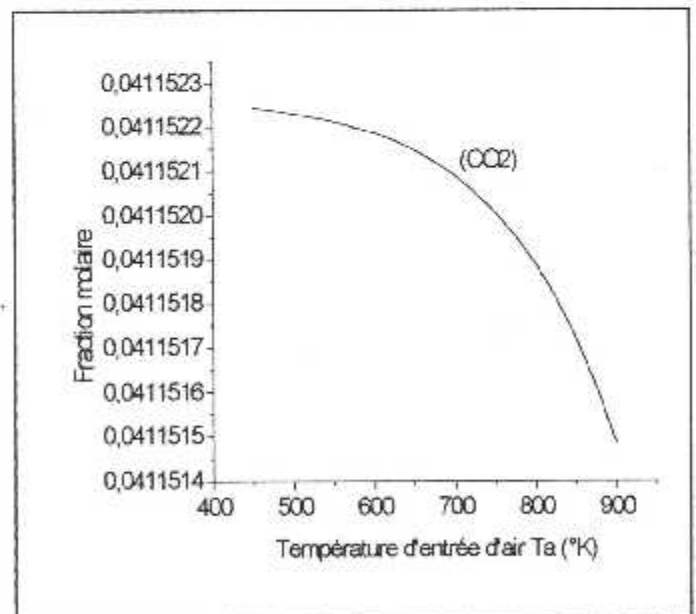


Fig.16 - composition de (CO₂) en fonction de la température d'air ($rc = 0.3$)
Kérosène C_{10.3} H_{20.6}

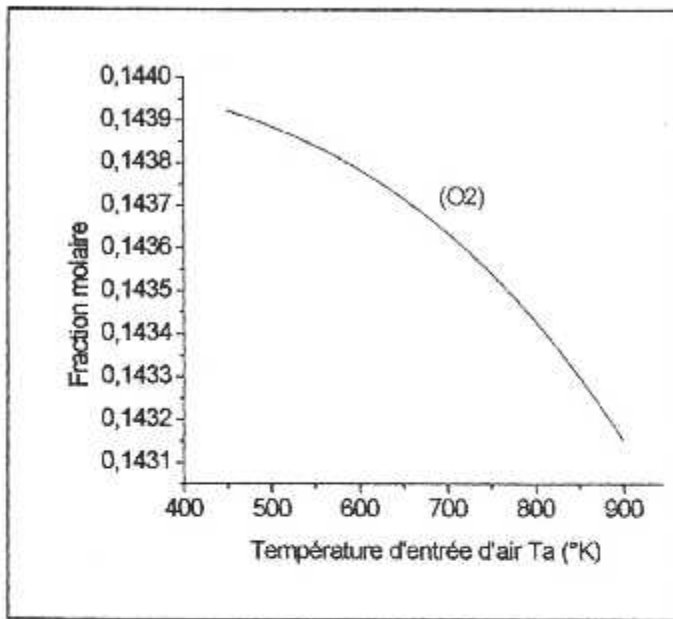


Fig.17 - composition de (O₂) en fonction de la température d'air (rc = 0.3)
Kérosène C_{10.3} H_{20.6}

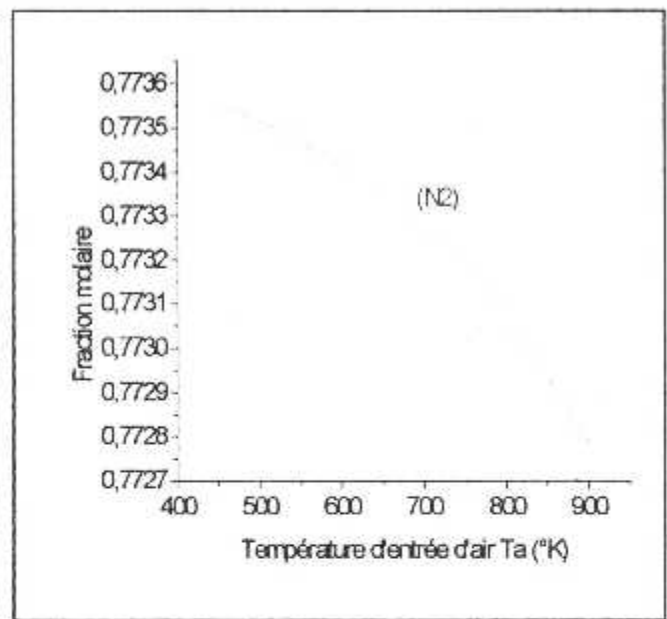


Fig.18 - composition de (N₂) en fonction de la température d'air (rc = 0.3)
Kérosène C_{10.3} H_{20.6}

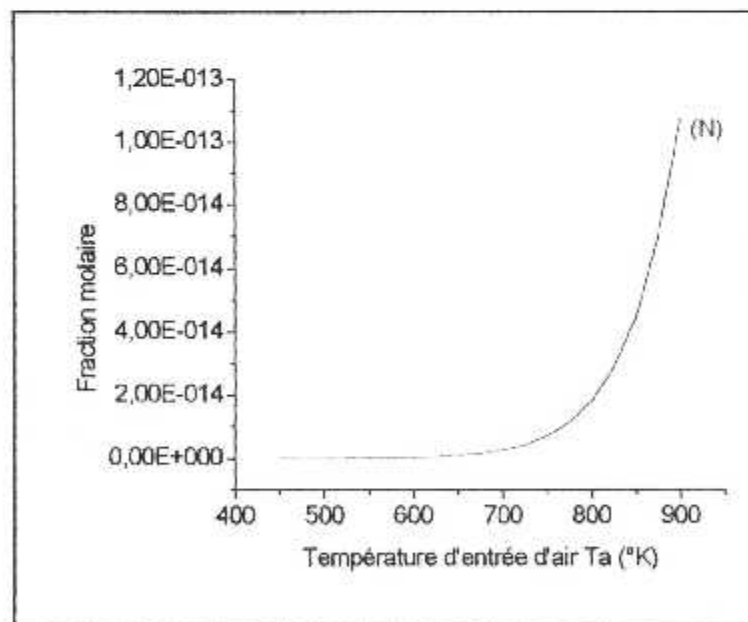
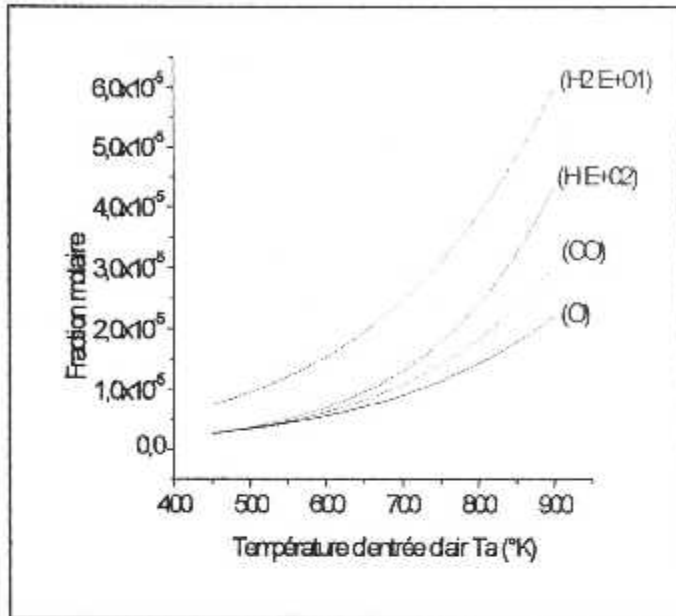
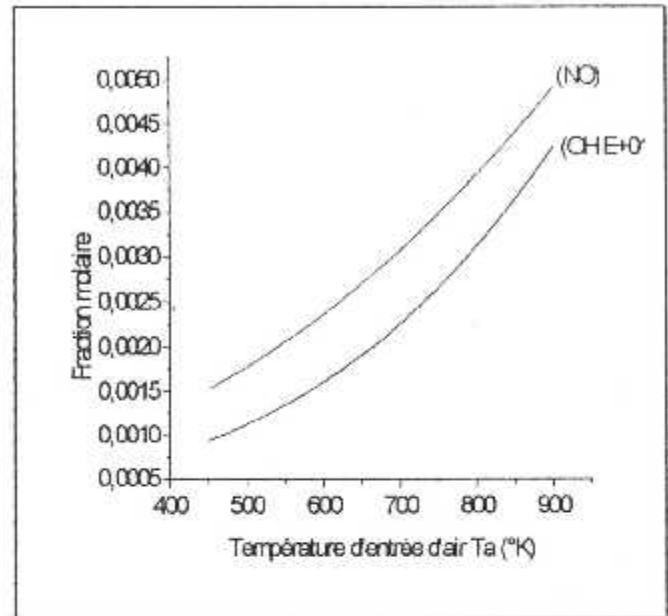


Fig.19 - composition de (N) en fonction de la température d'air (rc = 0.3)
Kérosène C_{10.3} H_{20.6}

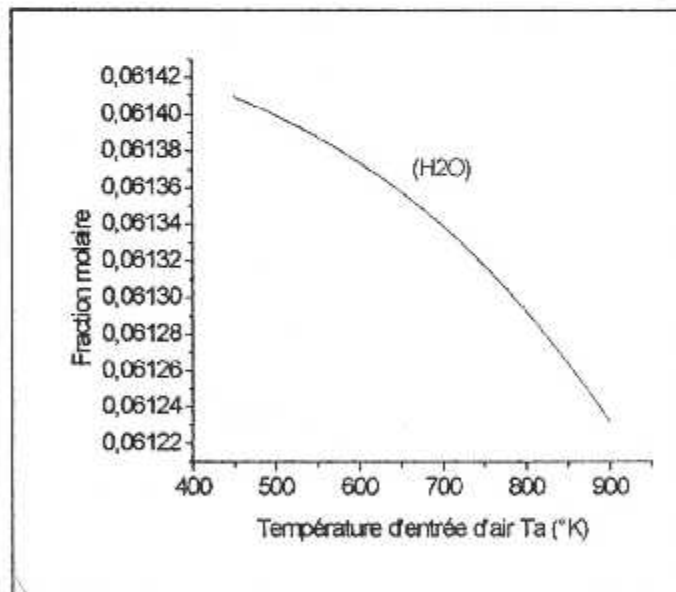
B. Gasoil :



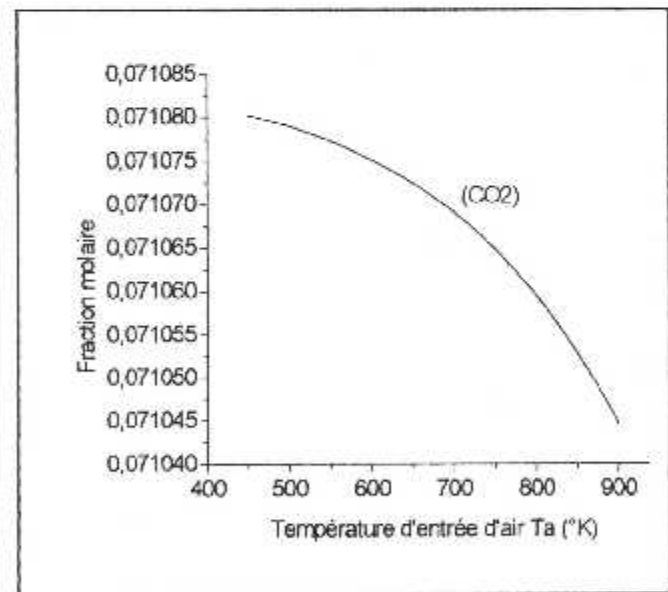
**Fig.20 - composition de (O, H, H₂, CO) en fonction de la température d'air (rc = 0.5)
Gasoil C_{14.4} H_{24.9}**



**Fig.21 - composition de (NO, OII) en fonction de la température d'air (rc = 0.5)
Gasoil C_{14.4} H_{24.9}**



**Fig.22 - composition de (H₂O) en fonction de la température d'air (rc = 0.5)
Gasoil C_{14.4} H_{24.9}**



**Fig.23 - composition de (CO₂) en fonction de la température d'air (rc = 0.5)
Gasoil C_{14.4} H_{24.9}**

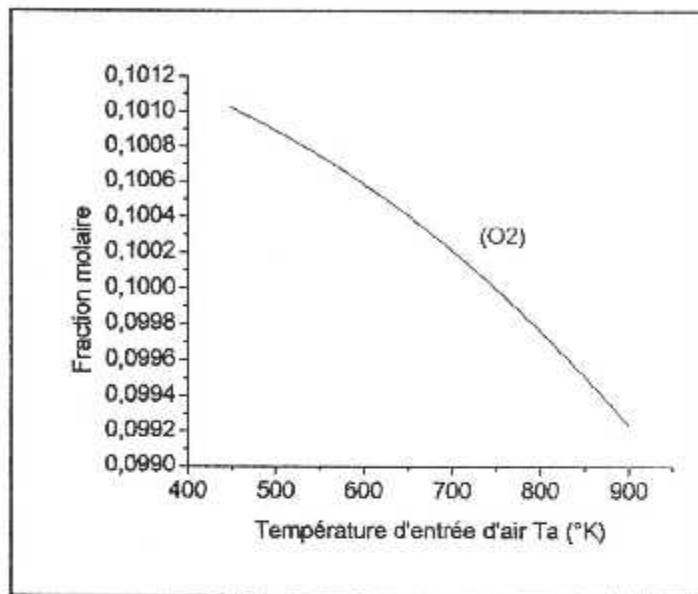


Fig.24 - composition de (O₂) en fonction de la température d'air (rc = 0.5)
Gasoil C_{14,4} H_{24,9}

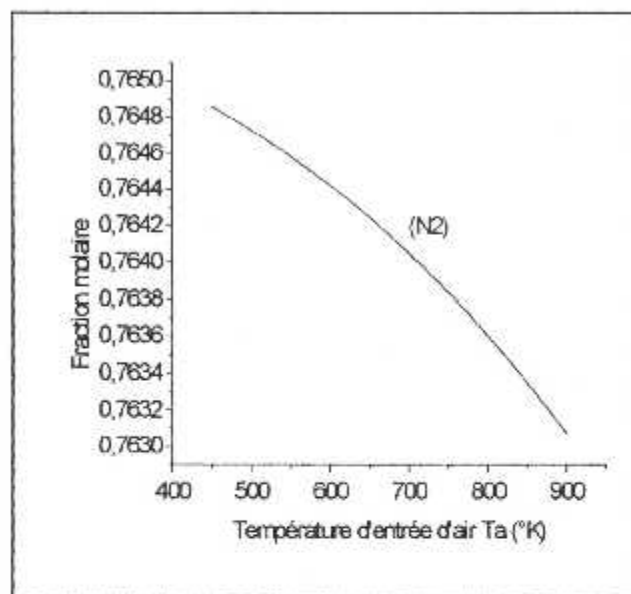


Fig.25 - composition de (N₂) en fonction de la température d'air (rc = 0.5)
Gasoil C_{14,4} H_{24,9}

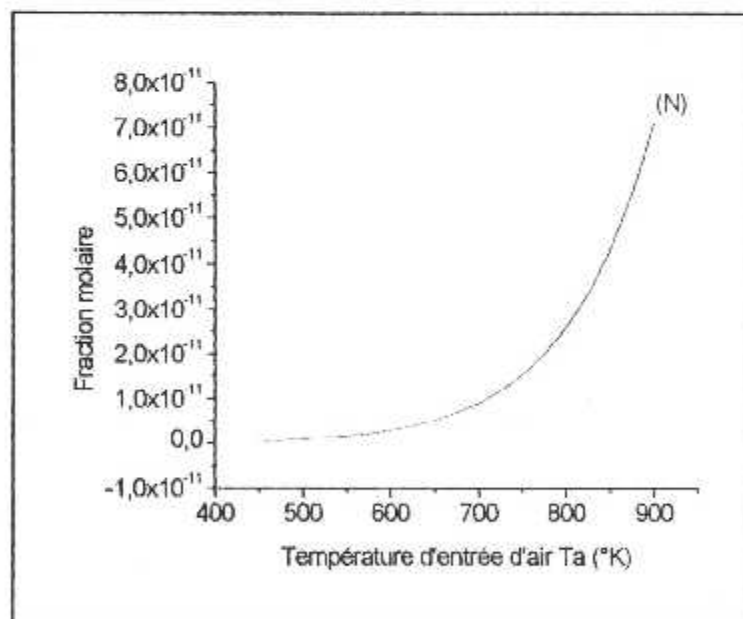


Fig.26 - composition de (N) en fonction de la température d'air (rc = 0.5)
Gasoil C_{14,4} H_{24,9}

V.4 EXECUTION DU PROGRAMME :

V.4.1 Kérosène $C_{10,3}H_{20,6}$:

Exemple 1 :

A. Les données :

- La température d'entrée d'air : $T_a = 700$ °K.
- La température d'entrée du carburant : $T_e = 420$ °K.
- La richesse : $rc = 0.2$
- La pression : $p = 20$ bars.

B. Les résultats :

- La température de fin de combustion : $T_c = 1208.740$ °K.
- Le nombre de mole totale : $N_t = 74.572$ moles.
- Les fractions molaires sont :

$$x_{CO_2} = 0.2762 \text{ E-01}$$

$$x_{CO} = 0.3215 \text{ E-09}$$

$$x_{H_2O} = 0.2762 \text{ E-01}$$

$$x_{H_2} = 0.2310 \text{ E-09}$$

$$x_{O_2} = 0.1656$$

$$x_O = 0.2735 \text{ E-08}$$

$$x_{N_2} = 0.7789$$

$$x_H = 0.7845 \text{ E-12}$$

$$x_{NO} = 0.2034 \text{ E-03}$$

$$x_N = 0.1407 \text{ E-17}$$

$$x_{OH} = 0.8187 \text{ E-06}$$

- On peut représenter les fractions molaires sur un diagramme de secteur :

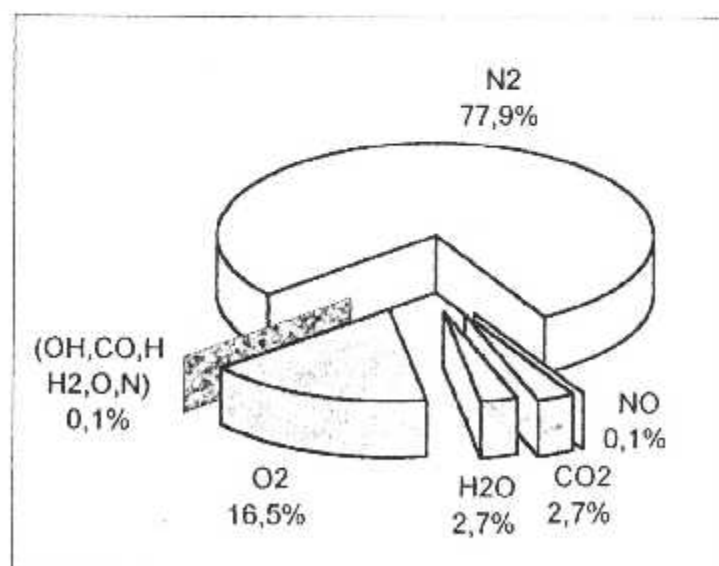


Fig.5.1 - Le pourcentage des produits de combustion Kérosène ($C_{10,3}H_{20,6}$)

Exemple 2 :**A. Les données :**

- La température d'entrée d'air : $T_a = 700 \text{ °K}$.
- La température d'entrée du carburant : $T_e = 420 \text{ °K}$.
- La richesse : $rc = 0.4$
- La pression : $p = 20 \text{ bars}$.

B. Les résultats :

- La température de fin de combustion : $T_c = 1648.321 \text{ °K}$.
- Le nombre de mole totale : $N_t = 75.603 \text{ moles}$.
- Les fractions molaires sont :

$$x_{CO_2} = 0.5449 \text{ E-01}$$

$$x_{CO} = 0.1277 \text{ E-05}$$

$$x_{H_2O} = 0.5445 \text{ E-01}$$

$$x_{H_2} = 0.4031 \text{ E-06}$$

$$x_{O_2} = 0.1216$$

$$x_O = 0.1977 \text{ E-05}$$

$$x_{N_2} = 0.7674$$

$$x_H = 0.1262 \text{ E-07}$$

$$x_{NO} = 0.1910 \text{ E-02}$$

$$x_N = 0.4302 \text{ E-12}$$

$$x_{OH} = 0.7935 \text{ E-04}$$

- On peut représenter les fractions molaires sur un diagramme de secteur :

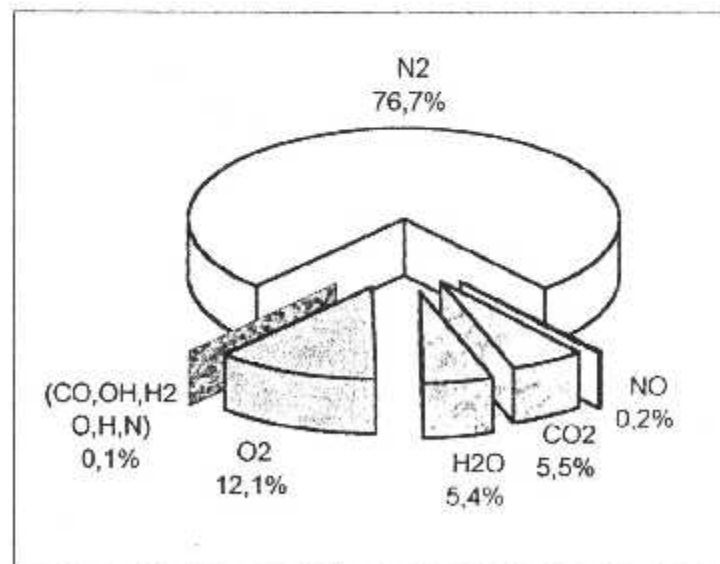


Fig.5.2 - Le pourcentage des produits de combustion Kérosène (C_{10,3} H_{20,6})

Exemple 3 :**A. Les données :**

- La température d'entrée d'air : $T_a = 500 \text{ °K}$.
- La température d'entrée du carburant : $T_c = 400 \text{ °K}$.
- La richesse : $rc = 0.25$
- La pression : $p = 6 \text{ bars}$.

B. Les résultats :

- La température de fin de combustion : $T_c = 1148.3618 \text{ °K}$.
- Le nombre de mole totale : $N_t = 74.829 \text{ moles}$.
- Les fractions molaires sont :

$$x_{CO_2} = 0.3441 \text{ E-01}$$

$$x_{CO} = 0.1708 \text{ E-09}$$

$$x_{H_2O} = 0.3441 \text{ E-01}$$

$$x_{H_2} = 0.1316 \text{ E-09}$$

$$x_{O_2} = 0.1547$$

$$x_O = 0.1266 \text{ E-08}$$

$$x_{N_2} = 0.7762$$

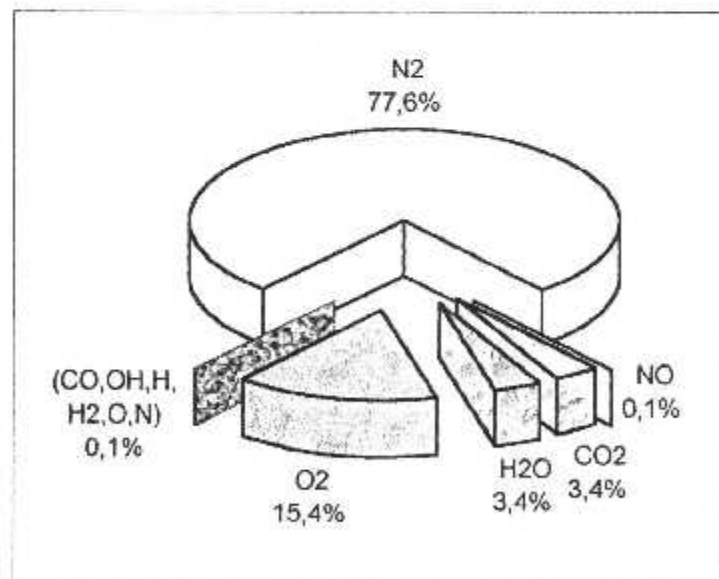
$$x_H = 0.3174 \text{ E-12}$$

$$x_{NO} = 0.1223 \text{ E-03}$$

$$x_N = 0.2105 \text{ E-18}$$

$$x_{OH} = 0.4728 \text{ E-06}$$

- On peut représenter les fractions molaires sur un diagramme de secteur :



**Fig.5.3 - Le pourcentage des produits de combustion
Kérosène ($C_{10.3} H_{20.6}$)**

Exemple 4 :**A. Les données :**

- La température d'entrée d'air : $T_a = 800 \text{ °K}$.
- La température d'entrée du carburant : $T_e = 450 \text{ °K}$.
- La richesse : $rc = 0.25$
- La pression : $p = 30 \text{ bars}$.

B. Les résultats :

- La température de fin de combustion : $T_c = 1420.169 \text{ °K}$.
- Le nombre de mole totale : $N_t = 74.829 \text{ moles}$.
- Les fractions molaires sont :

$$x_{CO_2} = 0.3441 \text{ E-01}$$

$$x_{CO} = 0.2120 \text{ E-07}$$

$$x_{H_2O} = 0.3440 \text{ E-01}$$

$$x_{H_2} = 0.9505 \text{ E-08}$$

$$x_{O_2} = 0.1544$$

$$x_O = 0.8958 \text{ E-07}$$

$$x_{N_2} = 0.7759$$

$$x_H = 0.1098 \text{ E-09}$$

$$x_{NO} = 0.7492 \text{ E-03}$$

$$x_N = 0.1282 \text{ E-14}$$

$$x_{OH} = 0.8863 \text{ E-05}$$

- On peut représenter les fractions molaires sur un diagramme de secteur :

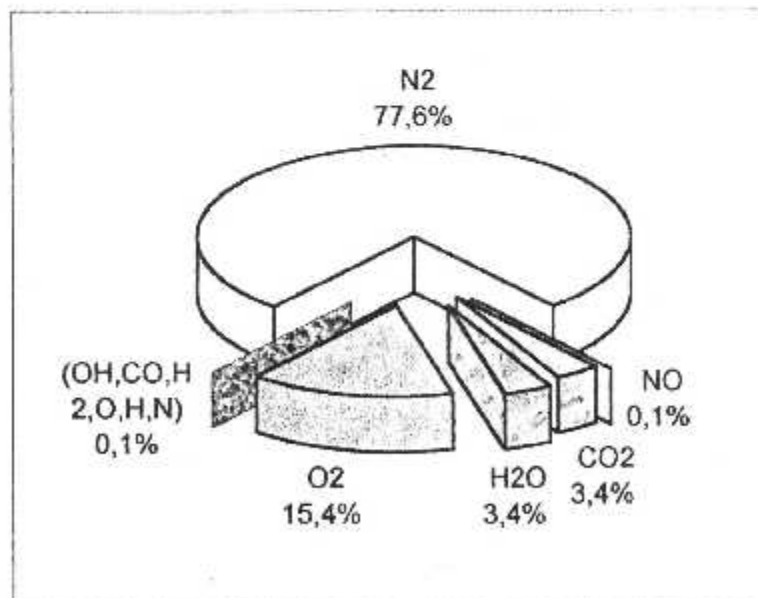


Fig.5.4 - Le pourcentage des produits de combustion Kérosène ($C_{10.3}H_{20.6}$)

V.4.2 Gasoil $C_{14.4}H_{24.9}$:

Exemple 1 :

A. Les données :

- La température d'entrée d'air : $T_a = 800 \text{ °K}$.
- La température d'entrée du carburant : $T_e = 350 \text{ °K}$.
- La richesse : $rc = 0.4$
- La pression : $p = 30 \text{ bars}$.

B. Les résultats :

- La température de fin de combustion : $T_c = 1693.424 \text{ °K}$.
- Le nombre de mole totale : $N_t = 100.667 \text{ moles}$.
- Les fractions molaires sont :

$$x_{CO_2} = 0.5721 \text{ E-01}$$

$$x_{CO} = 0.1827 \text{ E-05}$$

$$x_{H_2O} = 0.4942 \text{ E-01}$$

$$x_{H_2} = 0.4713 \text{ E-06}$$

$$x_{O_2} = 0.1217$$

$$x_O = 0.2568 \text{ E-05}$$

$$x_{N_2} = 0.7692$$

$$x_H = 0.1675 \text{ E-07}$$

$$x_{NO} = 0.2281 \text{ E-02}$$

$$x_N = 0.8619 \text{ E-12}$$

$$x_{OH} = 0.9227 \text{ E-04}$$

- On peut représenter les fractions molaires sur un diagramme de secteur :

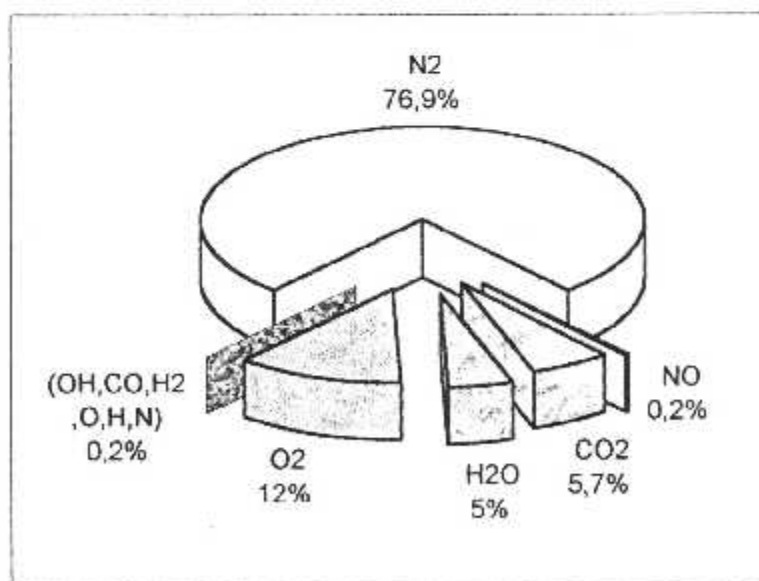


Fig.5.5 - Le pourcentage des produits de combustion
Gasoil ($C_{14.4}H_{24.9}$)

Exemple 2 :**A. Les données :**

- La température d'entrée d'air : $T_a = 800^\circ\text{K}$.
- La température d'entrée du carburant : $T_e = 350^\circ\text{K}$.
- La richesse : $rc = 0.6$
- La pression : $p = 30$ bars.

B. Les résultats :

- La température de fin de combustion : $T_c = 2060.744^\circ\text{K}$.
- Le nombre de mole totale : $N_t = 101.939$ moles.
- Les fractions molaires sont :

$$x_{CO_2} = 0.8464 \text{ E-01}$$

$$x_{CO} = 0.1150 \text{ E-03}$$

$$x_{H_2O} = 0.7286 \text{ E-01}$$

$$x_{H_2} = 0.2093 \text{ E-04}$$

$$x_{O_2} = 0.7792 \text{ E-01}$$

$$x_O = 0.5186 \text{ E-04}$$

$$x_{N_2} = 0.7578$$

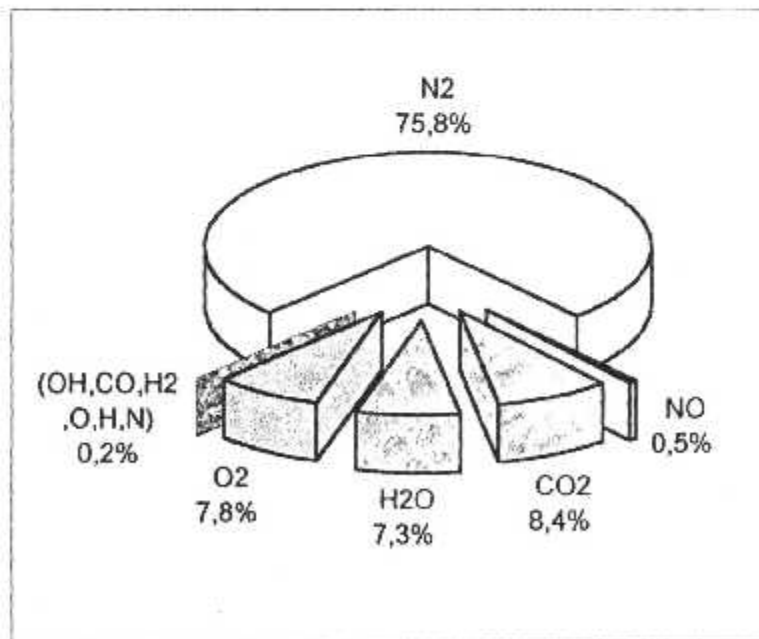
$$x_H = 0.1961 \text{ E-05}$$

$$x_{NO} = 0.5697 \text{ E-02}$$

$$x_N = 0.3620 \text{ E-09}$$

$$x_{OH} = 0.7844 \text{ E-03}$$

- On peut représenter les fractions molaires sur un diagramme de secteur :



**Fig.5.6 - Le pourcentage des produits de combustion
Gasoil (C_{14,4} H_{24,9})**

Exemple 3 :**A. Les données :**

- La température d'entrée d'air : $T_a = 600 \text{ °K}$.
- La température d'entrée du carburant : $T_e = 350 \text{ °K}$.
- La richesse : $rc = 0.5$
- La pression : $p = 10 \text{ bars}$.

B. Les résultats :

- La température de fin de combustion : $T_c = 1729.548 \text{ °K}$.
- Le nombre de mole totale : $N_t = 101.292 \text{ moles}$.
- Les fractions molaires sont :

$$x_{CO_2} = 0.7107 \text{ E-01}$$

$$x_{CO} = 0.6255 \text{ E-05}$$

$$x_{H_2O} = 0.6137 \text{ E-01}$$

$$x_{H_2} = 0.1546 \text{ E-05}$$

$$x_{O_2} = 0.1005$$

$$x_O = 0.5636 \text{ E-05}$$

$$x_{N_2} = 0.7644$$

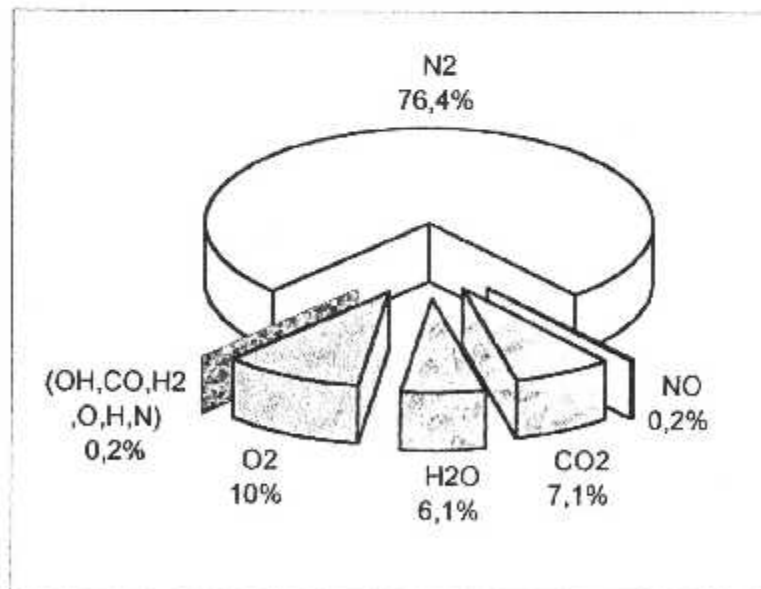
$$x_H = 0.7018 \text{ E-07}$$

$$x_{NO} = 0.2364 \text{ E-02}$$

$$x_N = 0.2885 \text{ E-11}$$

$$x_{OH} = 0.1604 \text{ E-03}$$

- On peut représenter les fractions molaires sur un diagramme de secteur :



**Fig.5.7 - Le pourcentage des produits de combustion
Gasoil (C_{14.4} H_{24.9})**

Exemple 4 :**A. Les données :**

- La température d'entrée d'air : $T_a = 900 \text{ °K}$.
- La température d'entrée du carburant : $T_e = 350 \text{ °K}$.
- La richesse : $rc = 0.5$
- La pression : $p = 50 \text{ bars}$.

B. Les résultats :

- La température de fin de combustion : $T_c = 1960.557 \text{ °K}$.
- Le nombre de mole totale : $N_t = 101.301 \text{ moles}$.
- Les fractions molaires sont :

$$x_{CO_2} = 0.7104 \text{ E-01}$$

$$x_{CO} = 0.3039 \text{ E-04}$$

$$x_{H_2O} = 0.6123 \text{ E-01}$$

$$x_{H_2} = 0.5988 \text{ E-05}$$

$$x_{O_2} = 0.9923 \text{ E-01}$$

$$x_O = 0.2224 \text{ E-04}$$

$$x_{N_2} = 0.7630$$

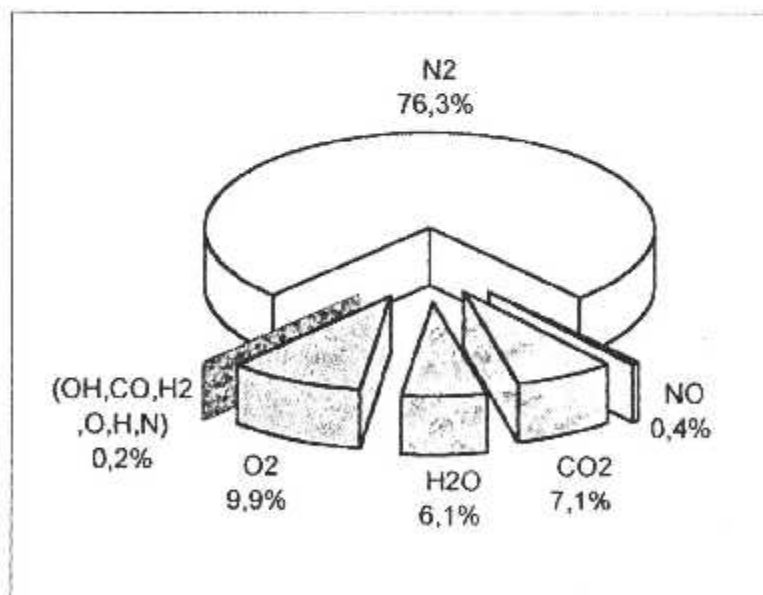
$$x_H = 0.4339 \text{ E-06}$$

$$x_{NO} = 0.4925 \text{ E-02}$$

$$x_N = 0.7102 \text{ E-10}$$

$$x_{OH} = 0.4244 \text{ E-03}$$

- On peut représenter les fractions molaires sur un diagramme de secteur :



**Fig.5.8 - Le pourcentage des produits de combustion
Gasoil ($C_{14.1} H_{24.9}$)**

CONCENTRATION

CONCLUSION

Dans l'exposé que nous venons de faire et qui est basé essentiellement sur l'élaboration d'un programme qui calcule la température de fin de combustion et la composition molaire des produits de combustion, lesquels constituent des paramètres importants dans la détermination des performances théoriques d'un moteur.

Pour la résolution du système d'équations non linéaires, on a choisi la méthode de Newton à cause de sa puissance et sa précision. Et pour la détermination de la température de combustion on a appliqué une méthode simple qui s'appelle la méthode de Dichotomie.

Pour mettre en application ce programme de calcul, nous avons choisi deux combustibles différents très largement utilisés dans notre vie quotidienne le gasoil et le kérosène.

Le premier alimente les moteurs alternatifs à piston (moteurs Diesel ou moteur à compression), le second alimente les moteurs rotatifs tels que les turboréacteurs dans le cas des avions.

Ce choix de moteurs est basé sur le fait qu'ils présentent des cycles thermodynamiques similaires

Les résultats obtenus par la méthode adoptée semblent acceptables car ils sont d'une précision comparable à celles des valeurs fournies par la documentation. On a vu l'influence des différents paramètres (richesse et température d'entrée d'air) sur la température de combustion et la composition molaire des produits de combustion.

Les combustibles utilisés pour l'alimentation de ces deux types de moteur sont performants et dégagent une grande énergie, mais on remarque que le gasoil par rapport au kérosène présente un inconvénient majeur à savoir la pollution de l'atmosphère car il comporte des produits de combustion lourds tels que le dioxyde de carbone, le monoxyde de carbone et le monoxyde d'azote. Pour concilier l'avantage de la performance et limiter les inconvénients de la pollution, il faut arriver à un compromis.

ANNEXES

ANNEXE 1 - METHODE DE NEWTON

n_{CO_2}	n_{H_2O}	n_{O_2}	n_{H_2}	n_{NO}	n_{OH}	n_{CO}	n_{H_2}	n_O	n_H	n_N	N_T
1	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0
0	2	0	0	0	1	0	2	0	1	0	0
2	1	2	0	1	1	1	0	1	0	0	0
0	0	0	2	1	0	0	0	0	0	1	0
0	0	$\frac{-\sqrt{kp(7) \cdot n_{N_2}^{(j)}}}{2 \cdot \sqrt{n_{O_2}^{(j)}}}$	$\frac{-\sqrt{kp(7) \cdot n_{O_2}^{(j)}}}{2 \cdot \sqrt{n_{N_2}^{(j)}}}$	1	0	0	0	0	0	0	0
0	$-\sqrt{kp(2) \cdot N_T^{(j)}}$	0	0	0	$\sqrt{n_{H_2}^{(j)} \cdot P}$	0	$\frac{n_{OH}^{(j)} \cdot \sqrt{P}}{2 \cdot \sqrt{n_{H_2}^{(j)}}}$	0	0	0	$-\frac{n_{H_2O}^{(j)} \cdot \sqrt{kp(2)}}{2 \cdot \sqrt{N_T^{(j)}}}$
$-\sqrt{kp(1) \cdot N_T^{(j)}}$	0	$\frac{n_{CO}^{(j)} \cdot \sqrt{P}}{2 \cdot \sqrt{n_{O_2}^{(j)}}}$	0	0	0	$\sqrt{n_{O_2}^{(j)} \cdot P}$	0	0	0	0	$-\frac{n_{CO_2}^{(j)} \cdot \sqrt{kp(1)}}{2 \cdot \sqrt{N_T^{(j)}}}$
0	$-\sqrt{kp(3) \cdot N_T^{(j)}}$	$\frac{n_{H_2}^{(j)} \cdot \sqrt{P}}{2 \cdot \sqrt{n_{O_2}^{(j)}}}$	0	0	0	0	$\sqrt{n_{O_2}^{(j)} \cdot P}$	0	0	0	$-\frac{n_{H_2O}^{(j)} \cdot \sqrt{kp(3)}}{2 \cdot \sqrt{N_T^{(j)}}}$
0	0	$-\frac{\sqrt{kp(5) \cdot N_T^{(j)}}}{2 \cdot \sqrt{n_{O_2}^{(j)}}}$	0	0	0	0	0	\sqrt{P}	0	0	$-\frac{\sqrt{kp(5) \cdot n_{O_2}^{(j)}}}{2 \cdot \sqrt{N_T^{(j)}}}$
0	0	0	0	0	0	0	$-\frac{\sqrt{kp(4) \cdot N_T^{(j)}}}{2 \cdot \sqrt{n_{H_2}^{(j)}}}$	0	\sqrt{P}	0	$-\frac{\sqrt{kp(4) \cdot n_{H_2}^{(j)}}}{2 \cdot \sqrt{N_T^{(j)}}}$
0	0	0	$-\frac{\sqrt{kp(6) \cdot N_T^{(j)}}}{2 \cdot \sqrt{n_{N_2}^{(j)}}}$	0	0	0	0	0	0	\sqrt{P}	$-\frac{\sqrt{kp(6) \cdot n_{N_2}^{(j)}}}{2 \cdot \sqrt{N_T^{(j)}}}$
1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	-1

$B(X^{(j)}) =$

ANNEXE 2 : COEFFICIENTS DE GORDON & Mc BRIDE

Pour chaque espèce, les fonctions thermodynamiques telles que chaleurs spécifiques (C_p), enthalpies standards (H) et entropies molaires (S) sont fonctions de la température et sont données en utilisant les coefficients des polynômes de Gordon & Mc Bride :

$$C_p/R = a_1 + a_2 T + a_3 T^2 + a_4 T^3 + a_5 T^4 \quad (\text{cal/mole.}^\circ\text{K}) \quad (1)$$

$$H/RT = a_1 + (a_2/2) T + (a_3/3) T^2 + (a_4/4) T^3 + (a_5/5) T^4 + a_6/T \quad (\text{cal/mole}) \quad (2)$$

$$S/R = a_1 \ln(T) + a_2 T + (a_3/2) T^2 + (a_4/3) T^3 + (a_5/4) T^4 + a_7 \quad (\text{cal/mole.}^\circ\text{K}) \quad (3)$$

Les coefficients a_i ($i=1,7$) sont tabulés pour différents éléments chimiques et ne sont valable que pour des températures comprises entre 1000 et 6000 °K.

	CO ₂	H ₂ O	O ₂	N ₂
ΔH_f (298 °K)	-94.054	-57.795	+0.000	+0.000
S_0 (298 °K)	+51.072	+45.106	+49.005	+45.770
a_1	+4.4608041E+00	+2.7167633E+00	+3.6219535E+00	+2.8963194E+00
a_2	+3.0981719E-03	+2.9451374E-03	+7.3618264E-04	+1.5154866E-03
a_3	-1.2392571E-06	-8.0224374E-07	-1.9652228E-07	-5.7235277E-07
a_4	+2.2741325E-10	+1.0226668E-10	+3.6201558E-11	+9.9807393E-11
a_5	-1.5525954E-14	-4.8472145E-15	-2.8945627E-15	-6.5223355E-15
a_6	-4.8961442E+04	-2.9905826E+04	-1.2019825E+03	-9.0586184E+02
a_7	-9.8635982E-01	+6.6305671E+00	+3.6150960E+00	+6.1615148E+00

	NO	CO	OH	H ₂
ΔH_f (298 °K)	+21.580	-26.417	+9.318	+0.000
S_0 (298 °K)	+50.347	+47.214	+43.881	+31.207
a_1	+3.1890000E+00	+2.9840696E+00	+2.9106427E+00	+3.1001901E+00
a_2	+1.3382280E-03	+1.4891390E-03	+9.5931650E-04	+5.1119464E-04
a_3	-5.2899318E-07	-5.7899684E-07	-1.9441702E-07	+5.2644210E-08
a_4	+9.5919332E-11	+1.0364577E-10	+1.3756646E-11	-3.4909973E-11
a_5	-6.4847932E-15	-6.9353550E-15	+1.4114542E-16	+3.6945345E-15
a_6	+9.8283290E+03	-1.4245228E+04	+3.9353815E+03	-8.7738042E+02
a_7	+6.7458126E+00	+6.3479156E+00	+5.4423445E+00	-1.9629421E+00

	O	H	N
ΔH_f (298 °K)	+59.554	+52.103	+112.975
S_0 (298 °K)	+38.468	+27.392	+36.613
a_1	+2.5420596E+00	+2.5000000E+00	+2.4502682E+00
a_2	-2.7550619E-05	+0.0000000E+00	+1.0661458E-04
a_3	-3.1028033E-09	+0.0000000E+00	-7.4653373E-08
a_4	+4.5510674E-12	+0.0000000E+00	+1.8796524E-11
a_5	-4.3680515E-16	+0.0000000E+00	-1.0259839E-15
a_6	+2.9230803E+04	+2.5471627E+04	+5.6116040E+04
a_7	+4.9203080E+00	-4.6011763E-01	+4.4487581E+00

Pour étudier l'influence du préchauffage, il est nécessaire d'avoir les coefficients a_i ($i = 1,7$) des espèces chimiques pour des températures comprises entre 300 et 1000 °K.

	O ₂	N ₂
a ₁	+0.3625598E+01	+0.3674826E+01
a ₂	- 0.1878218E-02	- 0.1208150E-02
a ₃	+0.7055454E-05	+0.2324010E-05
a ₄	- 0.6763513E-08	- 0.6321755E-09
a ₅	+0.2155599E-11	- 0.2257725E-12
a ₆	-0.1047522E+04	-0.1061158E+04
a ₇	+0.4305277E+01	+0.2358042E+01

Remarques :

- L'enthalpie de formation ΔH_f est en (Kcal / mole).
- L'entropie standards S_0 est en (cal /mole.°K).
- Le polynôme (2) de Gordon & Mc Bride donne l'enthalpie standard :

$$H = (\Delta H_f)_{298}^0 + \int_{298}^T C_p dT$$

- Le polynôme (3) de Gordon & Mc Bride donne L'entropie molaire :

$$S = \int_0^T C_p \frac{dT}{T}$$

- Pour le calcule de l'enthalpic sensible du combustible, on a utilisé la formule suivante :

$$H = \frac{((0.403 \times T) + (0.000405 \times T^2))}{\sqrt{((0.9952 \times d_4^{20}) + 0.00806)}} \times (12n + m) \quad (\text{cal / mole})$$

Avec : d_4^{20} (Kérosène) $C_{10,3}H_{20,6} = 0.80$

d_4^{20} (gasoil) $C_{14,4}H_{24,9} = 0.85$

Enthalpie de formation pour les deux combustibles :

- Kérosène ($C_{10,3}H_{20,6}$) : $(\Delta H_f)_{298^\circ} = - 100421 \quad \text{cal/mole}$
- Gasoil ($C_{14,4}H_{24,9}$) : $(\Delta H_f)_{298^\circ} = - 87044 \quad \text{cal/mole}$

**ANNEXE 3 : TABLES DES FONCTIONS THERMODYNAMIQUES
CONSTANTES D'EQUILIBRE**

TABLE 1 : Carbone dioxyde (CO₂)

$$(\Delta H_f^\circ)_{298} = -94054 \text{ cal / mole}$$

$$S^\circ = 51072 \text{ cal / mole / }^\circ\text{K}$$

T (°K)	Cp (cal / mole / °K)	H-(ΔH_f°) ₂₉₈ (cal / mole)	S (cal / mole / °K)
1000	12.9795	7987.031	64.342
1100	13.2133	9296.883	65.590
1200	13.4232	10628.900	66.749
1300	13.6110	11980.790	67.831
1400	13.7785	13350.420	68.846
1500	13.9275	14735.880	69.802
1600	14.0596	16135.370	70.705
1700	14.1763	17547.280	71.561
1800	14.2792	18970.160	72.374
1900	14.3696	20402.700	73.148
2000	14.4489	21843.710	73.888
2100	14.5183	23292.150	74.594
2200	14.5792	24747.090	75.271
2300	14.6324	26207.730	75.920
2400	14.6793	27673.370	76.544
2500	14.7206	29143.400	77.144
2600	14.7572	30617.320	77.722
2700	14.7901	32094.720	78.280
2800	14.8200	33575.250	78.818
2900	14.8475	35058.640	79.339
3000	14.8732	36544.700	79.843
3100	14.8977	38033.250	80.331
3200	14.9215	39524.220	80.804
3300	14.9448	41017.530	81.264
3400	14.9680	42513.170	81.710
3500	14.9913	44011.130	82.144
3600	15.0150	45511.450	82.567
3700	15.0390	47014.140	82.979
3800	15.0634	48519.250	83.380
3900	15.0881	50026.820	83.772
4000	15.1129	51536.880	84.154

TABLE 2 : Eau (H₂O)

$$(\Delta H_f^\circ)_{298} = - 57795 \text{ cal / mole}$$

$$S^\circ = 45106 \text{ cal / mole / }^\circ\text{K}$$

T (°K)	Cp (cal / mole / °K)	H-(ΔH_f°) ₂₉₈ (cal /mole)	S (cal / mole / °K)
1000	9.8507	6208.914	55.590
1100	10.1639	7209.813	56.544
1200	10.4573	8241.035	57.441
1300	10.7318	9300.645	58.289
1400	10.9883	10386.800	59.094
1500	11.2277	11497.730	59.860
1600	11.4509	12631.790	60.592
1700	11.6588	13787.400	61.292
1800	11.8522	14963.070	61.964
1900	12.0318	16157.380	62.610
2000	12.1986	17369.000	63.231
2100	12.3533	18596.700	63.830
2200	12.4966	19839.290	64.408
2300	12.6293	21095.670	64.967
2400	12.7520	22364.810	65.507
2500	12.8654	23645.750	66.030
2600	12.9702	24937.600	66.537
2700	13.0669	26239.520	67.028
2800	13.1563	27550.740	67.505
2900	13.2389	28870.560	67.968
3000	13.3153	30198.320	68.418
3100	13.3859	31533.430	68.856
3200	13.4514	32875.340	69.282
3300	13.5121	34223.540	69.697
3400	13.5686	35577.610	70.101
3500	13.6213	36937.140	70.495
3600	13.6707	38301.770	70.879
3700	13.7170	39671.170	71.255
3800	13.7608	41045.080	71.621
3900	13.8023	42423.250	71.979
4000	13.8420	43805.480	72.329

TABLE 3 : Diatomique oxygène (O₂)

$$(\Delta H_f^\circ)_{298} = 0 \text{ cal / mole}$$

$$S^\circ = 49005 \text{ cal / mole / }^\circ\text{K}$$

T (°K)	C _p (cal / mole / °K)	H-(ΔH _f [°]) ₂₉₈ (cal /mole)	S (cal / mole / °K)
1000	8.3361	5427.068	58.193
1100	8.4215	6264.983	58.991
1200	8.5031	7111.244	59.728
1300	8.5810	7965.474	60.411
1400	8.6555	8827.323	61.050
1500	8.7269	9696.468	61.650
1600	8.7954	10572.610	62.215
1700	8.8613	11455.460	62.750
1800	8.9247	12344.780	63.259
1900	8.9858	13240.320	63.743
2000	9.0448	14141.860	64.205
2100	9.1018	15049.200	64.648
2200	9.1571	15962.160	65.072
2300	9.2107	16880.560	65.481
2400	9.2628	17804.250	65.874
2500	9.3134	18733.070	66.253
2600	9.3627	19666.890	66.619
2700	9.4108	20605.570	66.973
2800	9.4577	21549.010	67.317
2900	9.5034	22497.070	67.649
3000	9.5480	23449.650	67.972
3100	9.5916	24406.630	68.286
3200	9.6341	25367.930	68.591
3300	9.6755	26333.410	68.888
3400	9.7158	27302.990	69.178
3500	9.7551	28276.540	69.460
3600	9.7931	29253.960	69.735
3700	9.8300	30235.130	70.004
3800	9.8655	31219.910	70.267
3900	9.8997	32208.190	70.523
4000	9.9324	33199.800	70.774

TABLE 4 : Azote (N₂)

$$(\Delta H_f^\circ)_{298} = 0 \text{ cal / mole}$$

$$S^\circ = 45770 \text{ cal / mole / }^\circ\text{K}$$

T (°K)	C _p (cal / mole / °K)	H-(ΔH _f [°]) ₂₉₈ (cal / mole)	S (cal / mole / °K)
1000	7.8151	5129.064	54.508
1100	7.9370	5916.771	55.258
1200	8.0474	6716.088	55.954
1300	8.1471	7525.902	56.602
1400	8.2369	8345.184	57.209
1500	8.3176	9172.979	57.780
1600	8.3898	10008.420	58.319
1700	8.4544	10850.680	58.830
1800	8.5119	11699.050	59.315
1900	8.5631	12552.850	59.776
2000	8.6085	13411.470	60.217
2100	8.6487	14274.370	60.638
2200	8.6843	15141.060	61.041
2300	8.7159	16011.100	61.428
2400	8.7438	16884.120	61.799
2500	8.7686	17759.760	62.157
2600	8.7906	18637.740	62.501
2700	8.8103	19517.800	62.833
2800	8.8281	20399.740	63.154
2900	8.8443	21283.370	63.464
3000	8.8591	22168.550	63.764
3100	8.8729	23055.150	64.055
3200	8.8858	23943.090	64.337
3300	8.8982	24832.300	64.610
3400	8.9102	25722.720	64.876
3500	8.9219	26614.320	65.135
3600	8.9334	27507.090	65.386
3700	8.9449	28401.000	65.631
3800	8.9563	29296.060	65.870
3900	8.9678	30192.270	66.103
4000	8.9793	31089.620	66.330

TABLE 5 : Nitrique d'oxyde (NO)

$$(\Delta H_f^\circ)_{298} = 215800 \text{ cal / mole}$$

$$S^\circ = 50347 \text{ cal / mole / }^\circ\text{K}$$

T (°K)	C _p (cal / mole / °K)	H-(ΔH _f [°]) ₂₉₈ (cal / mole)	S (cal / mole / °K)
1000	8.1230	5312.234	59.375
1100	8.2253	6129.736	60.154
1200	8.3172	6956.943	60.873
1300	8.3997	7792.865	61.543
1400	8.4733	8636.586	62.168
1500	8.5390	9487.266	62.755
1600	8.5972	10344.130	63.308
1700	8.6488	11206.490	63.830
1800	8.6944	12073.700	64.326
1900	8.7344	12945.180	64.797
2000	8.7696	13820.420	65.246
2100	8.8005	14698.960	65.675
2200	8.8275	15580.390	66.085
2300	8.8512	16464.360	66.478
2400	8.8720	17350.540	66.855
2500	8.8903	18238.670	67.218
2600	8.9065	19128.520	67.567
2700	8.9209	20019.900	67.903
2800	8.9339	20912.650	68.228
2900	8.9458	21806.650	68.541
3000	8.9569	22701.790	68.845
3100	8.9673	23598.000	69.139
3200	8.9772	24495.230	69.424
3300	8.9869	25393.440	69.700
3400	8.9965	26292.610	69.968
3500	9.0060	27192.730	70.229
3600	9.0157	28093.820	70.483
3700	9.0254	28995.870	70.730
3800	9.0352	29898.890	70.971
3900	9.0451	30802.910	71.206
4000	9.0551	31707.930	71.435

TABLE 6 : Hydroxyle (OH)

$$(\Delta H_f^\circ)_{298} = 9318 \text{ cal / mole}$$

$$S^\circ = 43881 \text{ cal / mole / }^\circ\text{K}$$

T (°K)	Cp (cal / mole / °K)	H-(ΔH_f°) ₂₉₈ (cal / mole)	S (cal / mole / °K)
1000	7.3316	5117.632	52.492
1100	7.4503	5856.777	53.196
1200	7.5631	6607.496	53.849
1300	7.6702	7369.207	54.459
1400	7.7717	8141.350	55.031
1500	7.8679	8923.377	55.571
1600	7.9589	9714.762	56.081
1700	8.0449	10514.990	56.566
1800	8.1260	11323.580	57.029
1900	8.2025	12140.040	57.470
2000	8.2745	12963.930	57.893
2100	8.3422	13794.800	58.298
2200	8.4057	14632.230	58.688
2300	8.4653	15475.810	59.063
2400	8.5211	16325.160	59.424
2500	8.5733	17179.910	59.773
2600	8.6221	18039.710	60.110
2700	8.6677	18904.230	60.436
2800	8.7102	19773.140	60.752
2900	8.7498	20646.160	61.059
3000	8.7868	21523.010	61.356
3100	8.8212	22403.430	61.645
3200	8.8533	23287.180	61.925
3300	8.8833	24174.030	62.198
3400	8.9114	25063.780	62.464
3500	8.9377	25956.250	62.722
3600	8.9624	26851.260	62.975
3700	8.9857	27748.680	63.220
3800	9.0078	28648.360	63.460
3900	9.0290	29550.210	63.695
4000	9.0493	30454.120	63.924

TABLE 7 : Monoxyde de carbone (CO)

$$(\Delta H_f^\circ)_{298} = -26417 \text{ cal / mole}$$

$$S^\circ = 47214 \text{ cal / mole / }^\circ\text{K}$$

T (°K)	Cp (cal / mole / °K)	H-(ΔH_f°) ₂₉₈ (cal / mole)	S (cal / mole / °K)
1000	7.9307	5183.750	56.026
1100	8.0468	5982.725	56.787
1200	8.1515	6792.729	57.492
1300	8.2455	7612.662	58.148
1400	8.3299	8441.512	58.763
1500	8.4053	9278.342	59.340
1600	8.4725	10122.290	59.885
1700	8.5322	10972.590	60.400
1800	8.5851	11828.500	60.889
1900	8.6319	12689.400	61.355
2000	8.6732	13554.700	61.799
2100	8.7096	14423.880	62.223
2200	8.7416	15296.480	62.629
2300	8.7698	16172.080	63.018
2400	8.7947	17050.330	63.392
2500	8.8166	17930.920	63.751
2600	8.8362	18813.580	64.097
2700	8.8536	19698.080	64.431
2800	8.8694	20584.240	64.753
2900	8.8837	21471.910	65.065
3000	8.8970	22360.960	65.366
3100	8.9095	23251.290	65.658
3200	8.9213	24142.830	65.941
3300	8.9328	25035.540	66.216
3400	8.9440	25929.380	66.483
3500	8.9551	26824.340	66.742
3600	8.9662	27720.400	66.995
3700	8.9773	28617.580	67.240
3800	8.9885	29515.870	67.480
3900	8.9997	30415.280	67.714
4000	9.0110	31315.820	67.942

TABLE 8 : Hydrogène (H₂)

$$(\Delta H_f^\circ)_{298} = 0 \text{ cal / mole}$$

$$S^\circ = -31207 \text{ cal / mole / }^\circ\text{K}$$

T (°K)	Cp (cal / mole / °K)	H-(ΔH _f [°]) ₂₉₈ (cal / mole)	S (cal / mole / °K)
1000	7.2191	4944.062	39.702
1100	7.3231	5671.182	40.395
1200	7.4257	6408.633	41.037
1300	7.5266	7156.261	41.635
1400	7.6257	7913.895	42.197
1500	7.7228	8681.341	42.726
1600	7.8178	9458.392	43.228
1700	7.9104	10244.820	43.704
1800	8.0006	11040.390	44.159
1900	8.0883	11844.860	44.594
2000	8.1733	12657.960	45.011
2100	8.2556	13479.430	45.412
2200	8.3352	14308.990	45.798
2300	8.4119	15146.370	46.170
2400	8.4858	15991.280	46.530
2500	8.5569	16843.440	46.878
2600	8.6252	17702.570	47.214
2700	8.6908	18568.400	47.541
2800	8.7536	19440.640	47.858
2900	8.8137	20319.030	48.167
3000	8.8713	21203.300	48.466
3100	8.9265	22093.210	48.758
3200	8.9792	22988.510	49.042
3300	9.0298	23888.980	49.320
3400	9.0783	24794.410	49.590
3500	9.1250	25704.590	49.854
3600	9.1700	26619.350	50.111
3700	9.2135	27538.530	50.363
3800	9.2557	28462.000	50.609
3900	9.2970	29389.640	50.850
4000	9.3375	30321.370	51.086

TABLE 9 : Monoatomique d'oxygène (O)

$$(\Delta H_f^\circ)_{298} = - 59554 \text{ cal / mole}$$

$$S^\circ = 38468 \text{ cal / mole / }^\circ\text{K}$$

T (°K)	Cp (cal / mole / °K)	H-(ΔH_f°) ₂₉₈ (cal / mole)	S (cal / mole / °K)
1000	4.9988	3557.371	44.617
1100	4.9946	4057.043	45.094
1200	4.9908	4556.313	45.528
1300	4.9874	5055.215	45.927
1400	4.9843	5553.797	46.297
1500	4.9817	6052.094	46.641
1600	4.9795	6550.148	46.962
1700	4.9778	7048.016	47.264
1800	4.9767	7545.734	47.549
1900	4.9760	8043.359	47.818
2000	4.9759	8540.953	48.073
2100	4.9763	9038.555	48.316
2200	4.9772	9536.227	48.547
2300	4.9788	10034.020	48.768
2400	4.9809	10531.990	48.980
2500	4.9836	11030.210	49.184
2600	4.9868	11528.730	49.379
2700	4.9907	12027.590	49.567
2800	4.9951	12526.880	49.749
2900	5.0001	13026.630	49.924
3000	5.0057	13526.910	50.094
3100	5.0118	14027.790	50.258
3200	5.0186	14529.300	50.417
3300	5.0258	15031.520	50.572
3400	5.0336	15534.480	50.722
3500	5.0419	16038.260	50.868
3600	5.0507	16542.880	51.010
3700	5.0600	17048.410	51.149
3800	5.0697	17554.900	51.284
3900	5.0799	18062.380	51.416
4000	5.0905	18570.890	51.545

TABLE 10 : Monoatomique d'hydrogène (H)

$$(\Delta H_f^\circ)_{298} = 52103 \text{ cal / mole}$$

$$S^\circ = 27392 \text{ cal / mole / }^\circ\text{K}$$

T (°K)	Cp (cal / mole / °K)	H-(ΔH_f°) ₂₉₈ (cal/mole)	S (cal / mole / °K)
1000	4.9680	3481.938	33.403
1100	4.9680	3978.734	33.877
1200	4.9680	4475.531	34.309
1300	4.9680	4972.332	34.707
1400	4.9680	5469.129	35.075
1500	4.9680	5965.926	35.418
1600	4.9680	6462.723	35.738
1700	4.9680	6959.520	36.039
1800	4.9680	7456.316	36.323
1900	4.9680	7953.113	36.592
2000	4.9680	8449.914	36.847
2100	4.9680	8946.711	37.089
2200	4.9680	9443.508	37.320
2300	4.9680	9940.305	37.541
2400	4.9680	10437.100	37.753
2500	4.9680	10933.900	37.955
2600	4.9680	11430.700	38.150
2700	4.9680	11927.500	38.338
2800	4.9680	12424.290	38.518
2900	4.9680	12921.090	38.693
3000	4.9680	13417.890	38.861
3100	4.9680	13914.690	39.024
3200	4.9680	14411.480	39.182
3300	4.9680	14908.280	39.335
3400	4.9680	15405.080	39.483
3500	4.9680	15901.880	39.627
3600	4.9680	16398.670	39.767
3700	4.9680	16895.470	39.903
3800	4.9680	17392.270	40.035
3900	4.9680	17889.060	40.165
4000	4.9680	18385.860	40.290

TABLE 11 : Monoatomique d'azote (N)

$$(\Delta H_f^\circ)_{298} = 112975 \text{ cal / mole}$$

$$S^\circ = 36613 \text{ cal / mole / }^\circ\text{K}$$

T (°K)	Cp (cal / mole / °K)	H-(ΔH_f°) ₂₉₈ (cal / mole)	S (cal / mole / °K)
1000	4.9680	3472.789	42.625
1100	4.9694	3969.672	43.099
1200	4.9701	4466.648	43.531
1300	4.9701	4963.664	43.929
1400	4.9697	5460.656	44.297
1500	4.9689	5957.586	44.640
1600	4.9680	6454.430	44.961
1700	4.9671	6951.180	45.262
1800	4.9663	7447.844	45.546
1900	4.9658	7944.445	45.814
2000	4.9657	8441.016	46.069
2100	4.9661	8937.602	46.311
2200	4.9672	9434.258	46.542
2300	4.9691	9931.063	46.763
2400	4.9718	10428.100	46.975
2500	4.9756	10925.470	47.178
2600	4.9805	11423.260	47.373
2700	4.9866	11921.600	47.561
2800	4.9939	12420.620	47.742
2900	5.0027	12920.440	47.918
3000	5.0130	13421.200	48.088
3100	5.0247	13923.080	48.252
3200	5.0382	14426.210	48.412
3300	5.0533	14930.770	48.567
3400	5.0702	15436.930	48.718
3500	5.0889	15944.870	48.866
3600	5.1095	16454.770	49.009
3700	5.1320	16966.840	49.149
3800	5.1565	17481.240	49.287
3900	5.1830	17998.200	49.421
4000	5.2116	18517.920	49.553

TABLE 11 : Monoatomique d'azote (N)

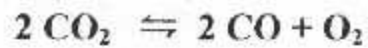
$$(\Delta H_f^\circ)_{298} = 112975 \text{ cal / mole}$$

$$S^\circ = 36613 \text{ cal / mole / }^\circ\text{K}$$

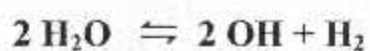
T (°K)	Cp (cal / mole / °K)	H-(ΔH_f°) ₂₉₈ (cal / mole)	S (cal / mole / °K)
1000	4.9680	3472.789	42.625
1100	4.9694	3969.672	43.099
1200	4.9701	4466.648	43.531
1300	4.9701	4963.664	43.929
1400	4.9697	5460.656	44.297
1500	4.9689	5957.586	44.640
1600	4.9680	6454.430	44.961
1700	4.9671	6951.180	45.262
1800	4.9663	7447.844	45.546
1900	4.9658	7944.445	45.814
2000	4.9657	8441.016	46.069
2100	4.9661	8937.602	46.311
2200	4.9672	9434.258	46.542
2300	4.9691	9931.063	46.763
2400	4.9718	10428.100	46.975
2500	4.9756	10925.470	47.178
2600	4.9805	11423.260	47.373
2700	4.9866	11921.600	47.561
2800	4.9939	12420.620	47.742
2900	5.0027	12920.440	47.918
3000	5.0130	13421.200	48.088
3100	5.0247	13923.080	48.252
3200	5.0382	14426.210	48.412
3300	5.0533	14930.770	48.567
3400	5.0702	15436.930	48.718
3500	5.0889	15944.870	48.866
3600	5.1095	16454.770	49.009
3700	5.1320	16966.840	49.149
3800	5.1565	17481.240	49.287
3900	5.1830	17998.200	49.421
4000	5.2116	18517.920	49.553

ANNEXE 4 :

CONSTANTES D'EQUILIBRE



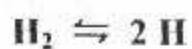
T (°K)	Kp
1000	3.619091E-21
1100	1.741419E-18
1200	2.971609E-16
1300	2.284692E-14
1400	9.390242E-13
1500	2.338896E-11
1600	3.878759E-10
1700	4.602268E-09
1800	4.131942E-08
1900	2.933782E-07
2000	1.706648E-06
2100	8.369933E-06
2200	3.542679E-05
2300	1.319359E-04
2400	4.393562E-04
2500	1.326054E-03
2600	3.669092E-03
2700	9.398280E-03
2800	2.247219E-02
2900	5.052146E-02
3000	1.074579E-01
3100	2.174159E-01
3200	4.204285E-01
3300	7.802743E-01
3400	1.394912
3500	2.409888
3600	4.035115
3700	6.564987
3800	10.402480
3900	16.085760
4000	24.320260



T (°K)	Kp
1000	2.423378E-23
1100	1.282578E-20
1200	2.404110E-18
1300	2.025146E-16
1400	9.090380E-15
1500	2.464164E-13
1600	4.431356E-12
1700	5.681319E-11
1800	5.492192E-10
1900	4.184882E-09
2000	2.604185E-08
2100	1.362122E-07
2200	6.131211E-07
2300	2.421777E-06
2400	8.531773E-06
2500	2.717706E-05
2600	7.918595E-05
2700	2.131425E-04
2800	5.344969E-04
2900	1.257916E-03
3000	2.795962E-03
3100	5.901902E-03
3200	1.188847E-02
3300	2.295003E-02
3400	4.261775E-02
3500	7.638296E-02
3600	1.325208E-01
3700	2.231487E-01
3800	3.655579E-01
3900	5.838312E-01
4000	9.107880E-01



T (°K)	Kp
1000	7.558493E-21
1100	1.719416E-18
1200	1.599768E-16
1300	7.469465E-15
1400	2.026182E-13
1500	3.556016E-12
1600	4.378043E-11
1700	4.023084E-10
1800	2.895900E-09
1900	1.696512E-08
2000	8.340386E-08
2100	3.527488E-07
2200	1.309903E-06
2300	4.343403E-06
2400	1.304199E-05
2500	3.588609E-05
2600	9.139562E-05
2700	2.173006E-04
2800	4.858706E-04
2900	1.028153E-03
3000	2.070402E-03
3100	3.986541E-03
3200	7.370559E-03
3300	1.313320E-02
3400	2.262670E-02
3500	3.780159E-02
3600	6.139710E-02
3700	9.716885E-02
3800	1.501563E-01
3900	2.269821E-01
4000	3.361963E-01



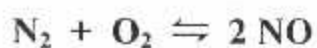
T (°K)	Kp
1000	5.106775E-18
1100	6.625403E-16
1200	3.858665E-14
1300	1.212291E-12
1400	2.343139E-11
1500	3.068320E-10
1600	2.926753E-09
1700	2.149519E-08
1800	1.269195E-07
1900	6.234116E-07
2000	2.617933E-06
2100	9.609746E-06
2200	3.139928E-05
2300	9.270538E-05
2400	2.504446E-04
2500	6.256328E-04
2600	1.458160E-03
2700	3.195059E-03
2800	6.624866E-03
2900	1.307240E-02
3000	2.466806E-02
3100	4.470673E-02
3200	7.810781E-02
3300	1.319859E-01
3400	2.163392E-01
3500	3.448558E-01
3600	5.358363E-01
3700	8.132120E-01
3800	1.207687
3900	1.757906
4000	2.511750



T (°K)	Kp
1000	2.424630E-20
1100	6.111787E-18
1200	6.166544E-16
1300	3.074004E-14
1400	8.800716E-13
1500	1.616075E-11
1600	2.067947E-10
1700	1.964756E-09
1800	1.456202E-08
1900	8.754293E-08
2000	4.404283E-07
2100	1.901864E-06
2200	7.196687E-06
2300	2.427578E-05
2400	7.404703E-05
2500	2.067034E-04
2600	5.334758E-04
2700	1.284007E-03
2800	2.903641E-03
2900	6.208977E-03
3000	1.262460E-02
3100	2.452672E-02
3200	4.572252E-02
3300	8.209419E-02
3400	1.424338E-01
3500	2.395009E-01
3600	3.913069E-01
3700	6.226681E-01
3800	9.669878E-01
3900	1.468324
4000	2.183690



T (°K)	Kp
1000	8.688050E-44
1100	2.939058E-39
1200	1.754855E-35
1300	2.766937E-32
1400	1.531412E-29
1500	3.666194E-27
1600	4.440448E-25
1700	3.067606E-23
1800	1.326940E-21
1900	3.869003E-20
2000	8.066036E-19
2100	1.261204E-17
2200	1.538022E-16
2300	1.510878E-15
2400	1.228264E-14
2500	8.452452E-14
2600	5.019259E-13
2700	2.614259E-12
2800	1.211165E-11
2900	5.051857E-11
3000	1.917065E-10
3100	6.679272E-10
3200	2.153785E-09
3300	6.473022E-09
3400	1.824451E-08
3500	4.849202E-08
3600	1.221351E-07
3700	2.927756E-07
3800	6.705790E-07
3900	1.472686E-06
4000	3.110881E-06



T (°K)	Kp
1000	7.491487E-09
1100	5.413947E-08
1200	2.814842E-07
1300	1.135974E-06
1400	3.756715E-06
1500	1.059367E-05
1600	2.624438E-05
1700	5.843606E-05
1800	1.190372E-04
1900	2.249735E-04
2000	3.989226E-04
2100	6.697242E-04
2200	1.072446E-03
2300	1.648144E-03
2400	2.443293E-03
2500	3.508956E-03
2600	4.899941E-03
2700	6.673445E-03
2800	8.888424E-03
2900	1.160378E-02
3000	1.487785E-02
3100	1.876724E-02
3200	2.332605E-02
3300	2.860519E-02
3400	3.465099E-02
3500	4.150579E-02
3600	4.920816E-02
3700	5.779026E-02
3800	6.727937E-02
3900	7.769880E-02
4000	8.906631E-02



BIBLIOGRAPHIE

- [1] A.VAN TIGGELEN
OXYDATIONS ET COMBUSTIONS TOME I
Institut Français du pétrole.
- [2] AKABA AISSA ET OUANNAR KARIM
ETUDE DE LA COMBUSTION APPLIQUEE AUX MOTEURS
ALTERNATIFS ET MOTEURS FUSEE
Mémoire d'ingénieur, université de Blida, 1996.
- [3] G.A SARADANACHVILI ET A.I LVOVA
EXERCICES ET PROBLEMES EN TECHNOLOGIE DE RAFFINAGE
DES HYDROCARBURES.
- [4] GERARD DE SOETE ET ALAIN FEUGIER
ASPECTS PHYSIQUE ET CHIMIQUE DE COMBUSTION
Institut Français du pétrole.
- [5] HENNI MANSOUR ZOUBIR
COURS DE THERMODYNAMIQUE – ENERGTIQUE
Université de Blida.
- [6] OURAGH YUCEF
AIDE MEMOIRE DE MATHEMATIQUE POUR L'INGENIEUR
(2^{ème} PARTIE)
Maître assistant I.N.G.M – Boumerdès
- [7] PIERRE WUTHIER
LE PETROLE RAFFINGE ET GENIE CHIMIQUE TOME I
Institut Français du pétrole

RESUME

Le calcul de la température de combustion et la composition molaire des produits de combustion ont une grande importance pour la détermination des performances Théoriques d'un moteur .

L'objectif de cette étude est d'élaborer un programme permettant de calculer la température de combustion et la composition molaire des produits de combustion lors d'une combustion complète d'un hydrocarbure C_nH_m avec l'air en utilisant la méthode de Newton.

Et comme application, nous avons choisi comme combustible, le gasoil alimentant les moteurs alternatifs à piston (moteur Diesel) et le kérosène alimentant les moteurs rotatifs (turboréacteurs et turbopropulseurs dans le cas des avions).

Nous avons essayé pour cela, de montrer l'influence des différents paramètres à savoir la richesse et la température d'entrée d'air sur la température et la composition des produits de combustion.

Le présent mémoire donne une description détaillée sur la méthode utilisée et les résultats obtenus.