

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE

MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

UNIVERSITE SAAD DEHLEB BLIDA

Faculté des Sciences de l'Ingénieur

Département : Aéronautique



**Mémoire pour l'obtention
du diplôme d'ingénieur d'état en Aéronautique
Option : Propulsion**

THEME

**Modélisation d'une flamme plane prémélangée
Laminaire et instationnaire**

PRESENTE PAR :

**M^r : GHALEM MOHAMED
M^r : KASMI AHMED**

ENCADRE PAR :

M^r : CHEGRANI. A

ANNEE UNIVERSITAIRE 2006 /2007

Résumé

Notre travail consiste à la modélisation d'une flamme plane prémélangée laminaire et instationnaire. On a pu améliorer un programme qui étudie la variation de la température ainsi que l'évolution des fractions massiques au sein du front de flamme. Comme la combustion est un problème multidisciplinaire, on a revu toutes les propriétés thermodynamiques, chimiques et des transferts thermiques, pour bien cerner l'évolution des variables qui caractérisent la flamme de prémélange. Sous les hypothèses simplificatrices la détermination des équations qui régissent la flamme de prémélange nous a permis d'étudier l'évolution de la température de gaz frais vers les gaz brûlés le long de l'axe de déplacement de la flamme. On a tracé les courbes de la vitesse et l'épaisseur du front de flamme pour différentes richesses et aussi l'effet du temps sur la consommation des réactifs et l'apparition des produits.

Abstract:

Our study consists to model the unsteady premixed laminar flame; we have improved a computer program which calculates the temperature variation and the evolution of the mass fraction in the flame front. As the combustion is a multidisciplinary problem, we reviewed all the thermodynamic and chemical properties as well as the heat transfer properties to well predict the evolution of the variables that characterize the premixed flame. Under some simplifying hypotheses, we have determined the equations that give this premixed flame and we have studied the transition of the cold gases to the burned, the axis of the motion of the flame we have plotted the curves of the velocity and the thickness of the flame front for different fuel air ratio and also the effect of time on the consumption of the reactives and the apparition of the products.



Remerciements



Nous remercions Allah tout puissant de nous avoir donné la volonté et le courage de mener à bien ce travail.

Nous tenons particulièrement à remercier notre encadreur, Mr. CHEGRANI.A pour ses critiques qui nous ont beaucoup aidé à réaliser ce travail et ont mieux éclairé nos perspectives malgré ces occupations. Nous lui sommes reconnaissants tout particulièrement pour la confiance qu'il nous a témoigné.

Merci à tous les membres de nos chambres avec qui nous avons le plaisir de travailler durant cette année.

Nous tenons aussi à adresser nos sincères salutation à notre professeur Mr. RENANE, qui nous témoigné un profond respect.

Et enfin un grand salut à tous nos collègues de la dix-huitième promotion d'ingénieur en aeronautique 2006-2007 et à tous ceux qui nous ont aidé, de près ou de loin, durant la réalisation de ce mémoire.



Dédicaces

Je souhaite dédier ce modeste travail synonyme de concrétisation de tous mes efforts fournis ces dernières années :

A mon père pour son sincère amour, sa générosité, son sacrifice, et à qui je le dois beaucoup sans limites.

A la chandelle de ma vie, ma très chère mère. Qu'elle trouve ici l'expression de mes sentiments les plus profonds pour le confort moral qu'elle m'a assuré tout au long de mes études.

A mon aimable frère et a mes chères sœurs

*A mon binôme et ami **AHMED** ainsi qu'à toute sa famille.*

*A mes fidèles amis : **Sid Ahmed, Kadour, Lahouri, Belkadi, Belkalouche, M. Hamadouche** à qui je souhaite beaucoup de réussite et de prospérité.*

A tous mes camarades de la promotion d'ingénieurs en aéronautique.

2006-2007

Aux gens qui m'aiment et m'estiment...

Encore à tous un grand merci...

GHALEM MOHAMED

Dédicace

Grâce à « Dieu » tout puissant, et en signe
de reconnaissance à tous les sacrifices consentis pour ma réussite
on a eu la volonté pour mener à bien ce modeste travail que je dédie :

A Celui qui a semé en moi le sens du devoir et de la responsabilité, qui me
pousse toujours à donner le meilleur de moi-même ; à mon père pour son
sacrifice et inquiétude afin que rien n'entrave le déroulement de mes études.

A la précieuse source de tendresse, à la voie qui console, à celle qui a veillé
sans cesse sur moi avec ses prières ; à ma mère pour sa patience et son soutien.

Ceux qui se sont réjouis de l'évolution heureuse de mes études, me témoignant
ainsi leur profonde sollicitude, à mes chers frères et soeurs bien aimés. Tous
ceux qui portent le nom **KASMI**.

L'ange qui brille sur la famille **YOUCEF** ; à ma petite sœur **HADJIRA**.

A Ceux qui ont exprimé le sens du courage, de l'amitié et de la solidarité ; à
vous mes amis de la deuxième promotion d'ingénieurs pilotes.

En signe d'amitié sincère, à mon binôme **MOHAMED** pour son intimité et
simplicité et à toute la famille **GHALEM**.

A bien aimés : **Bouzidi**, Nadjari, Bouabdellah, Lanaoui Lahouari

A tous mes amis de tous les temps dont je ne peux citer les noms.

Aux gens qui m'aiment et m'estiment.

K ASMI AHMED

Sommaire

Introduction Générale

Chapitre I : Aspect thermodynamique de la combustion

I.1-Définition	1
I.1.1-la combustion	1
I.1.2-La flamme	2
I.2-Le premier principe de la thermodynamique	2
I.2.1- Energie interne	2
I.2.2- Expression de la variation d'énergie interne	2
I.2.3- Enthalpie	3
I.3- Le deuxième principe	4
I.4-Les réactions chimiques	4
I.4.1-Réaction de combustion	4
I.4.2-Réaction à pression constant	5
I.4.3-Données théorique de la combustion des hydrocarbures	5
I.4.3.1-Définition de la richesse	5
I.4.3.2-Combustion avec défaut d'air	6
I.4.3.3- Combustion avec excès d'air	6
I.5-Calcul de la température adiabatique de combustion	7
I.5.1-Carburant et comburant ayant une même température T_0	7
I.5.2-Combustion à pression constant	8

Chapitre II : Aspect cinétiques de la combustion

II.1-Introduction	10
II.2-Influence de concentration	10
II.3-Taux de production	10
II.4-Taux de réaction	11
II.5-Lois cinétiques	12
II.5.1-La définition du Energie d'activation	13
II.6-Evolution de référence	13
II.6.1-Taux de combustion	13
II.7-Schémas cinétique de combustion des hydrocarbures	16
II.7.1-Schéma globaux	16
II.7.2-Une approche semi-globale	17

II.7.3-Schémas réduits	18
Chapitre III : Les phénomènes de transport	
III.1-Expressions des coefficients de transport	19
III.2-Phénomènes de transports moléculaires et expressions des flux	20
III.2.1-Approximation linéaire	20
III.2.2-Flux de quantité de mouvement et tenseur des frottements	21
III.3-Flux de masse et de chaleur	22
III.4-Approximation binaire pour les espèces	24
III.5-Flux d'énergie	25
Chapitre IV : Les équations de bilan pour un mélange de gaz réactifs	
IV.1-Définitions relatives au bilan de masse	26
IV.2-Equation de conservation de masse (continuité)	27
IV.3- Equation de conservation des espèces	28
IV.4-Equation de conservation d'énergie	29
IV.5-Equation de quantité de mouvement	30
Chapitre V : La flamme de prémélange	
V.1-Généralités	31
V.1.1-Introduction	31
V.1.2-Définitions	31
V.1.2.1-Front de la flamme	31
V.1.2.2-Déflagration	31
V.2-Interprétation physique d'une flamme de prémélange	31
V.3-Onde de combustion planes	32
V.3.1-Définition du phénomène physique	32
V.3.2-La solution d'Hugoniot	33
V.3.3-Branche des déflagrations	35
V.4-Théories de flamme de prémélange laminaire	36
V.4.1-Théorie thermique	36
V.4.1.1-Théorie de Mallard et Le Chatelier	37
V.4.1.2-Théorie de Zeldovitch, Franck-Kameneskii et Semenov	39
V.4.1.2.1-Hypothèses simplificatrices	39
V.4.1.2.2 -Equations de bilan	40
V.4.1.2.3-Déterminations de la vitesse de flamme	40
V.4.1.3-Théorie de Zeldevitch amélioré	43

V.4.2 -Théorie diffusionnelle	44
V.5 -Approche récentes	46
V.6-Autres approches	47
Chapitre VI : Modélisation de la flamme de prémélange	
VI.1-Objectif de la modélisation	48
VI.2-Hypothèses adoptées	49
VI.3-Solution théorique de la flamme de prémélange	49
VI.3.1-Les équations de bilan	49
VI.3.2-Les équations de bilan simplifiées	50
VI.3.2.1-Equations des espèces	50
VI.3.2.2-Equation de l'énergie	51
VI.3.2.3-Equation de quantité de mouvement	51
VI.4-Les équations de bilan en fonction des grandeurs réduites	52
VI.4.1-Les grandeurs réduites	52
VI.4.2-Les équations de flamme en grandeurs réduites :	55
VI.4.2.1-Conservation d'énergie	55
VI.4.2.2-Conservation des espèces	55
VI.4.2.3-Conservation de quantité de mouvement	56
VI.5.- Propriété de la flamme de prémélange	56
VI.6- Calcul des fractions massiques initiales et finales de combustion	57
VI.7-Détermination de la vitesse de propagation de la flamme et son épaisseur	61
VI.8- schéma de résolution	
VI.9- Organigramme	63
Chapitre VII : Résultats et interprétations	67
Conclusion Générale	
Références Bibliographiques	
Annexe A	
Annexe B	
Annexe C	

Nomenclature

Symbole	signification
A^a	Coefficient préexponentiel
C_p	Capacité calorifique à pression constant
D_T	Diffusivité thermique.
D_{ij}, D_{AB}	Diffusivité massique de l'espèce A (ou i) vers B (ou j).
E_t	Energie totale
E_c, E_p	Energie cinétique, Energie potentielle
E_a	Energie d'activation.
F	les forces extérieur applique par unité de masse
G	Enthalpie libre.
H	Enthalpie standard.
H_A, H_B	Enthalpie standard de gaz dans l'état A, B respectivement
H_R	Enthalpie standard de mélange réactif.
h	Enthalpie massique
H_p	Enthalpie standard des produits de combustion.
K	Constante de vitesse.
K_p	Constante d'équilibre d'une réaction chimique.
m_{vc}	Masse de gaz dan le volume de contrôle.
\dot{m}	Débit massique.
$\dot{m}_{i, diffu}$	Flux de diffusion de l'espèce i.
n	Nombre de mole
O	Oxydant
P	Pression statique.
Q	Quantité de chaleur.
\dot{Q}	Flux de chaleur.
W_i	Taux de production
C_v	Capacité calorifique massique à volume constant
R	Constante des gaz parfaits.
rc	Richesse.
W_{F_0}	Taux molaire de combustion
S	Entropie.
Sl	Vitesse de la flamme.
t	Temps.
Q_{p_0}	le pouvoir calorifique massique à pression constante
n_i	Nombre de mole par unité de masse
Y_F	fraction massique du combustible
Y_O	fraction massique de l'oxygène.
i	ordre global de la réaction
j	ordre partiel de la réaction
T	Température.
T_a	Température d'activation
$''$	Température réduite
T_o	Température de référence.

T_1, T_2	Température des gaz frais et brûlés respectivement.
T_i	la température d'auto inflammation
U	Energie interne
V	Vitesse du mélange
x_j	les coordonnes spatiales
$[_k$	Vitesse des espèces
V_k	Vitesse de diffusion de l'espèce k
W	Travail.
Y_k	Fraction massique de l'espèce k
\tilde{S}	Taux de réaction.
w_K	la masse molaire de l'espèce k
E_A, E_B	Energie interne de gaz dans l'état A, B respectivement
W_{vc}	Travail effectué par le gaz dans le volume de contrôle.
Y_A, Y_B	Fraction massique de l'espèce A, B respectivement.
Z, Z_u	Nombres de collisions
Z_F	Scalaire passif
ΔE	Variation de l'énergie interne.
ΔG	Variation de l'enthalpie libre.
ΔH	Variation de l'enthalpie.
ΔS	Variation de l'entropie.
\sim	μ viscosité dynamique
\dots	Masse volumique
Σ	Surface du front de flamme
$\}$	Conductivité thermique
u	Epaisseur de la flamme
ϵ	viscosité cinématique
ϵ_{ik}	la matrice des coefficients stoechiométriques
\ddagger	Tenseur de force
w	Le rapport d'équivalence de la réaction chimique
\mathcal{E}	coefficient d'air
\ddagger_{rs}	le frottement visqueux
$J_{Q,r}$	le flux de chaleur
$J_{i,r}$	la diffusion des espèces
u_{rs}	le tenseur de kronecher
L_{rs}^{xu}	coefficients d'Onsager
J_x	Flux total
χ	Coefficient de compressibilité

Introduction générale :

La modélisation de combustion occupe une place croissante dans des domaines extrêmement variés, offrant des potentialités de développement très importantes (aéronautique, mécanique, médecine, urbanisme...)

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

Ceci, bien sûr, n'est pas du uniquement aux théoriciens des flammes. Depuis cinquante ans, l'analyse expérimentale des flammes a aussi fait des progrès très importants. Alors qu'au début, seules des mesures détaillées du champ de vitesse, de la température, des concentrations au sein des flammes ont été progressivement mises en œuvre et sont aujourd'hui largement utilisées. Les méthodes d'analyses qualitatives et quantitatives des flammes se sont développées grâce aux performances toujours croissantes des lasers et aux moyens modernes d'acquisition et de traitement des images. Ainsi l'analyse fine des champs thermo-chimiques dans les flammes, même en régime instationnaire, est maintenant possible dans de nombreux cas. Il est clair que le développement et la validation d'une théorie concernant un phénomène dépend essentiellement de la connaissance expérimentale que l'on peut en avoir et, à ce titre, les méthodes expérimentales mises au point ont joué un grand rôle dans l'établissement des théories et modèles de flammes actuels. Par ailleurs, les méthodes de calcul numérique des équations aux dérivées partielles, comportant à la fois de fortes non-linéarités et des termes ayant des temps caractéristiques très différents ont fait beaucoup de progrès après les années 1950. Bien sûr, c'est la connaissance de la physique impliquée qui est à la base de toute théorie, mais la disposition d'outils mathématiques et numériques fiables et efficaces peut découpler les possibilités de compréhension finale des objectifs physiques tels que les flammes, qui mettent en jeu de nombreux couplages de phénomènes plus élémentaires.

L'étude a été faite sur la partie théorique pour rendre compte de modélisation et le développement du programme.

Après avoir rappelé au premier chapitre l'aspect thermodynamique, on a entamé par la suite l'aspect cinétique de la combustion à cause des réactions chimiques au sien du mélange.

Concernant le troisième chapitre, on a énuméré les phénomènes de transports qui sont d'une importance capitale dans les échanges de masse et de chaleur au niveau de la flamme.

Afin de poser un modèle spécifique pour notre étude, dans le chapitre quatre on a élaboré les équations de bilan pour un mélange des gaz réactif avec un certains nombres d'hypothèses simplificatrices.

Le cinquième chapitre a permet de revoir toute les propriétés essentielle de la flamme prémélangé.

Dans le sixième chapitre sous les hypothèses simplifier, on obtient les équations de base pour notre étude ce qui nous a permet de proposé le modèle spécifique à la flamme plane prémélange laminaire et instationnaire.

Le dernier chapitre présente les résultats obtenus par le programme sous forme des courbes avec une interprétation.

Enfin, notre travail s'achève avec une conclusion générale.



Chapitre

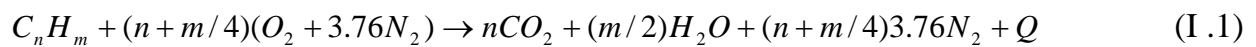
I

Aspect thermodynamique de la combustion

I.1 Définitions :**I.1.1 La combustion : [10]**

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 l'eau. La combustion d'un hydrocarbure avec une quantité stoechiométrique 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.

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

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

-solide (bois, papiers, chiffons, charbons,...)

-liquide (pétroles).

-gazeux (hydrogène, butane, propane,...)

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

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

I.1.2 La flamme : [11]

Phénomène lumineux produit par la combustion de mélange gazeux. Les flammes sont formées en général d'un mélange d'oxygène (ou d'air) et d'un autre gaz ; comme l'hydrogène, le monoxyde de carbone ou de l'hydrocarbure.

I.2 Le premier principe de la thermodynamique : [12]

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

Un système est décrit macroscopiquement au moyen de grandeurs physiques telles que T, P, n, V, \dots , toutes ces variables sont des grandeurs d'état.

La variation d'une grandeur d'état au cours d'une transformation est indépendante du processus. Elle ne dépend que des états initial et final. Toute combinaison des grandeurs d'état sont une grandeur d'état.

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

$$(W+Q)_{\text{cycle}}=0 \quad (\text{I.2})$$

I.2.1 Energie interne :

L'énergie totale d'un système isolé se conserve au cours de ses transformations.

$$E_T = 0 \quad (\text{I.3})$$

L'énergie totale d'un système est :

$$E_T = E_C + E_P + U$$

E_C : représente l'énergie cinétique macroscopique,

E_P : représente l'énergie potentielle associée aux forces extérieures (pesanteur)

U : représente l'énergie interne liée à la nature propre du système.

L'énergie interne regroupe deux formes énergétiques trouvant leur origine au sein du système (interne) :

- l'énergie cinétique microscopique (due à l'agitation thermique des particules)
- l'énergie potentielle issue de toutes les forces internes au système

I.2.2 Expression de la variation d'énergie interne :

La variation d'énergie interne peut résulter de travail, de transferts de chaleur et matière entre le système et le milieu extérieur. Lorsqu'un système échange les transferts thermique et de travail avec le milieu extérieur, son énergie interne varie telle que :

$$U = W + Q \quad (\text{I.4})$$

$$U_F - U_I = W_1 + Q_1 = W_2 + Q_2 \quad (\text{I.5})$$

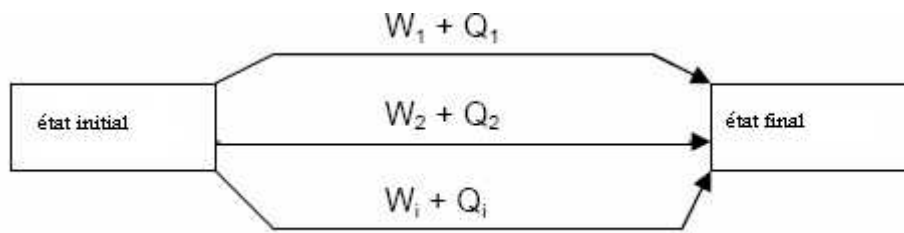


Fig.I.1 : la transformation d'énergie interne

L'énergie interne peut être définie en chaque point d'une transformation qu'il existe un ensemble de variables permettant de décrire l'état du système. Pour une transformation élémentaire :

$$dU = W + Q \quad (I.6)$$

Un système isolé, l'énergie cinétique et potentielle sont constantes et par conséquent l'énergie interne d'un système isolé est constante au cours de ses transformations d'où :

$$U = 0 \quad (I.7)$$

Pour un système adiabatique alors :

$$U = W, \text{ car } Q = 0.$$

I.2.3 Enthalpie :

L'enthalpie est définie par :

$$H = U + PV \quad (I.8)$$

A l'énergie interne s'ajoute à l'énergie d'expansion ou de compression du système

L'enthalpie est toujours supérieure à énergie interne. Si l'énergie interne joue un rôle particulier dans les transformations isochores, enthalpie intervient dans les transformations isobares très utile en chimie.

L'énergie interne et l'enthalpie d'une quantité donnée de gaz parfait ne dépendent que de sa température :

$$\begin{cases} U = U(T) \\ H = H(T) \end{cases} \quad (I.9)$$

Elles sont indépendantes de sa pression (donc du volume occupé). Une petite variation de température modifie l'énergie interne et l'enthalpie en l'absence de transformation de matière.

-à volume constant :

$$dU = C_V dT$$

où C_v est la capacité calorifique à volume constant.

-à pression constante :

$$dH = C_p dT$$

où C_p est la capacité calorifique à pression constante.

I.3. Le deuxième principe : [8]

La température est la tension de l'énergie calorifique, son extensité est appelée entropie. On peut donc écrire que la quantité de chaleur échangée par un système à la température T :

$$uQ = TdS \tag{I.10}$$

Si l'on met en relation avec un autre système \dagger_1 à une température T_1 , inférieure à T , en supposant isoler l'ensemble du système, la quantité de chaleur reçue par le système \dagger_1 est :

$$uQ = T_1 dS_1.$$

$$\text{Donc: } +TdS + T_1 dS_1 = 0 \tag{I.11}$$

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

$$\text{Donc } dS' = dS + dS_1 > 0 \tag{I.12}$$

Ainsi la variation d'entropie de l'ensemble isolée est positive. La chaleur est donc la forme d'énergie dont l'extensité peut être créée, ce qui entraîne la possibilité du récepteur monotherme. L'ensemble \dagger et \dagger_1 étant thermiquement isolé, l'effet thermique se réduit à la quantité de chaleur échangée entre ces deux systèmes. De plus le système échange l'énergie non calorifique. On a alors :

$$\Delta E_{\dagger} = Q + W \quad (\text{Premier principe}) \tag{I.13}$$

$$\text{Et } \Delta S' = \Delta S_{\dagger} + \Delta S_{\dagger_1} \geq 0 \quad (\text{deuxième principe}) \tag{I.14}$$

$$\text{Avec } \Delta S_{\dagger_1} = -\frac{Q}{T_1}$$

I.4 Les réactions chimiques : [4]

I.4.1 Les réactions de combustion :

Les réactions de combustion, comme toutes les réactions chimiques, se font sans variation de masse de chacun des éléments. Les équations chimiques qui décrivent ces réactions doivent satisfaire cette contrainte, à titre d'exemple, les réactions de combustion du carbone et du méthane sont respectivement



On distingue dans une telle réaction, les réactifs, qui subissent la réaction, que l'on sépare en combustible, qui est l'agent réducteur, et comburant qui est le corps contenant l'agent oxydant le plus fréquemment l'air. Les produits de la combustion comprennent du dioxyde de carbone et de l'eau, qui selon les conditions de pression et de température pourra être sous forme liquide ou vapeur.

Pour un hydrocarbure composé uniquement de carbone et d'hydrogène, de formule C_xH_y , la réaction de combustion s'écrit :



La réaction est dite complète si les gaz brûlés ne comprennent, outre les éléments inertes, que des produits complètement oxydés.

En réalité, plusieurs produits intermédiaires sont formés au cours d'une combustion réelle comme on s'intéresse ici uniquement aux états d'équilibre initial et final, on ne les considérera pas. Ils s'avèrent néanmoins importants en pratique, en particulier pour les problèmes de pollution.

Dans la plupart des cas le comburant utilisé est l'air, plutôt que l'oxygène pur. La composition de l'air est approximativement, en fractions molaires, 21% O_2 , 78% N_2 et 1% d'argon. Ces deux dernières substances sont supposées inertes, et pour simplifier, on considère que l'air est composé de 21% d'oxygène et de 79% « d'azote atmosphérique » auquel on attribue une masse molaire fictive pour tenir compte de la présence d'argon.

I.4.2 Réaction à pression constant :

La pression constante :

$$P = P_{\text{ext}} = \text{cste} \quad (I.18)$$

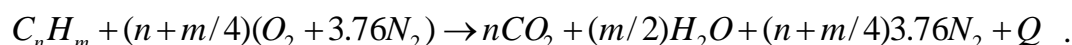
$$\Delta H = Q_p \quad (I.19)$$

C'est le cas le plus fréquent en turboréacteur. Lorsqu'un système évolue à pression constante, la chaleur reçue par le système est égale à la variation d'enthalpie.

I.4.3 Données théoriques de la combustion des hydrocarbures :

I.4.3.1 Définition de la richesse :

L'équation stoechiométrique complète de l'hydrocarbure est :



Le rapport stoechiométrique (), ou (dosage stoechiométrique) :

$$= (\text{masse carburant} / \text{masse du comburant})_{\text{stoech}}$$

Un mélange stoechiométrique contient suffisamment d'oxygène pour oxyder tout le carbone et anhydride carbonique, hydrogène.

La composition de milieu réactionnel s'exprime par un paramètre appelé richesse, qui est définie par la relation :

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

Soit :

$$rc = [mc/m \text{ air}]_{\text{réel}}$$

Le mélange est riche ou pauvre selon que le carburant se trouve en excès ou en défaut. On distingue les trois types de mélange suivant :

- le mélange stoechiométrique (rc=1)
- le mélange pauvre (avec excès d'air, rc<1).
- le mélange riche (avec excès de carburant, rc>1).

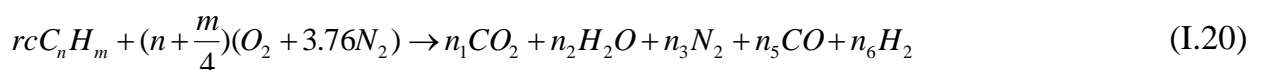
Certains auteurs emploient parfois le coefficient d'excès d'air qui est l'inverse de la richesse. Il est noté que cette richesse indique seulement la composition de la charge et nous ne renseigne en rien sur les masses respectives d'air et de carburant qui entre localement en réaction.

I.4.3.2 Combustion avec défaut d'air :

C'est une combustion dans laquelle la quantité de carburant mise en jeu est supérieure à la quantité dans les conditions stoechiométriques.

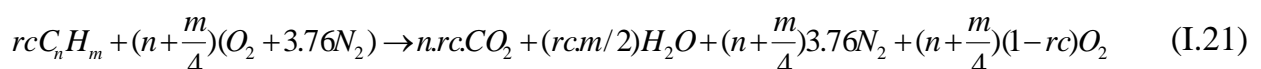
Dans ce cas, on parle de richesse ou de défaut d'air d'une manière générale, dans

ce cas l'équation est donné par :



I.4.3.3 Combustion avec excès d'air :

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



I.5 Calcul de la température adiabatique de combustion : [8]

I.5.1 Carburant et comburant ayant une même température $T_0=298.15k$

Combustible +comburant produit de combustion + h_R

La chaleur engendrée par la combustion est :

$$h_R = -Q \quad (I.22)$$

Réaction a volume constant :

$$(H_R)_v = -Q_v \quad (I.23)$$

Réaction a pression constante :

$$(H_R)_p = -Q_p \quad (I.24)$$

Avec : $H_R > 0$

La convection des thermodynamiciens comptent négativement la chaleur de combustion.

-Hypothèses :

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

A : mélange carburant - comburant.

B : ensemble des produit de combustion.

D'après le 1^{er} principe :

$$W_{AB} + Q_{AB} = E = E_B - E_A \quad (I.25)$$

Avec :

$$E_A = \sum n_{a_i} \cdot E_{a_i} \quad (I.26)$$

- n_{a_i} : nombre de moles du i^{eme} constituant.

- E_{a_i} : énergie interne molaire du i^{eme} constituant.

-Le même raisonnement pour les produits : $E_B = \sum n_{b_i} \cdot E_{b_i}$

I.5.2 Combustion à pression constant :

Le premier principe de la thermodynamique pour un système ouvert :

$$W_{T_{AB}} + Q_{AB} = H_A^B \quad (I.27)$$

Avec :

$$W_T = \int_A^B V dp = 0 \text{ car } p = \text{Cte} \quad (I.28)$$

La combustion est adiabatique (pas d'échange de chaleur avec l'extérieur) :

$$Q_{AB} = 0 \Rightarrow H_B = H_A \quad (I.29)$$

Soit :

T_A : température avant combustion.

T_B : température en fin de combustion.

$$\Rightarrow H_A(T_A) = H_B(T_B) \quad (I.30)$$

H_A et H_B : sont des enthalpie standard.

$$H_B - H_A = ((H_f)_b^{298.15} - (H_f)_A^{298.15}) + \int_{T_0}^{T_B} (Cp dT)_B - \int_{T_0}^{T_A} (Cp dT)_A \quad (I.31)$$

$$[H_B]_{T_0}^{T_b} = Q_P + [H_A]_{T_0}^{T_a} \quad (I.32)$$

$$[H'_B]_{T_0}^{T_B} = \frac{n_{ai}}{n_B} [\Delta H_{AI}]_{T_0}^{T_0} + \sum \frac{n_{ai}}{n_b} \cdot Q_{p_i} \quad (I.33)$$

Avec :

H' : enthalpie molaire

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

Soient :

Enthalpie des produit : H_P

Enthalpie des réactifs : H_R

$$\text{D'après l'équation (I.27)} \quad (I.34)$$

$$[\Delta H_P]_{T_0}^{T_2} = [\Delta H_A]_{T_0}^{T_2} + (Q_p)_{298.15} = (Q_p)_{298.15} \quad (I.35)$$

La température initial est $T_0 = 298.15$ ($^{\circ}K$)

$$Q_p = (\Delta H_p)_{T_2} - (\Delta H_p)_{T_0} = \int_{T_0}^{T_2} \sum n_i C_{p_{pc}} dt = \int_{T_0}^{T_2} \sum n_i C_{p_{pc}} dt - \int_{T_0}^{T_0} \sum n_i C_{p_{pc}} dt \quad (I.36)$$

Avec:

- $\int_0^{T_0} n_i C_{p_{pc}} dt$: enthalpie sensible ou thermique d'échauffement.

- $Q_p = \int_{T_0}^{T_2} n_i C_{p_{pc}} dt$ énergie nécessaire pour chauffer les produit de combustion de T_0 et T_2 .

$$(\Delta H_p)_{T_2} = (\Delta H_p)_{T_0} + (Q_p)_{298.15}$$

-(ΔH_p)_{T₂}: enthalpie sensible des produit de combustion à T_2

-(ΔH_p)_{T₀}: enthalpie sensible des produit de combustion à T_0

-(Q_p)_{298.15}: enthalpie de réaction à 298.15⁰ k

-(ΔH_p)_{T₀}: étant calculée.



Chapitre

II

Aspects cinétiques de la combustion

II.1 Introduction :

Les réactions chimiques dans les flammes sont globalement irréversibles et très exothermique. On peut cependant considérer que l'énergie répartis entre les différentes degrés de liberté de la molécule comme dans un mélange en équilibre. En effet, en raison de la faible valeur du terme d'Arrhenius, la proportion de molécules venant de subir un choc efficace est faible. On définit alors l'état thermodynamique et les fractions des variables d'état comme on le ferait pour les réactions lentes quasi réversibles.

Les taux de réaction élémentaire ne dépend que des variables d'état. Ils sont indépendants les uns des autres, des gradients des variables d'état et leurs variation en fonction du temps.

Un processus chimique de combustion est souvent écrit sous la forme d'une réaction globale. Une réaction ne traduit que l'évolution globale et donne approximativement les produits indiqués à partir des réactifs indiqués, mais le déroulement des événements ne suit pas du tout l'écriture de cette réaction. Celle-ci n'est rien de plus qu'une réaction de bilan qui donne l'état initial et l'état final des événements, mais de façon approchée seulement.

II.2 Influence de concentration : [12]

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

Ordre partiel, ordre global d'une réaction :

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

$$V = k[\text{carburant}]^i [\text{oxydant}]^j \quad (\text{II.1})$$

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

k : constante de vitesse.

i : ordre partiel par rapport au carburant.

j : ordre partiel par rapport à l'oxydant.

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

II.3 Taux de production : [5]

On appelle taux volumique de production molaire de A_i le nombre de mole de A_i formé par réaction chimique au sein du système par unité de temps et de volume :

$$w_i = \frac{dn_i}{\hat{.}dt} \quad (\text{II.2})$$

w_i : est positif si le produit A_i apparaît, négatif s'il est consommé.

Le système des n réactions réelles s'écrit :



$\epsilon_{ik} > 0$ correspond à une production de A_i

La matrice $\|\epsilon_{ik}\|$: est la matrice des coefficients stoechiométriques du système.

Si dn_i est la somme des n variation élémentaire de A_i relative à chacune des réactions

$$dn_i = \sum_{k=1}^n d_k n_i \quad (\text{II.4})$$

On peut alors écrire :

$$w_i = \sum_{k=1}^n w_{ik} = \sum_{k=1}^n \frac{d_k n_i}{\hat{.}dt} \quad (\text{II.5})$$

On peut aussi définir un taux massique de production de A_i , W_i , qui la masse de A_i produite par unité de temps et de volume :

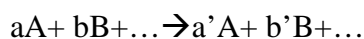
$$W_i = M_i w_i \quad (\text{II.6})$$

et aussi :

$$W_j = \frac{dm_i}{\hat{.}dt} = \frac{\sum_K d_K}{\hat{.}dt} = \sum_{K=1}^n W_K \quad (\text{II.7})$$

II.4 Taux de réaction : [1]

Soit la réaction élémentaire écrite symboliquement :



qui se déroule dans un milieu fermé, sans échange de masse avec l'extérieur.

On peut définir le taux de réaction en nombre de moles par unité de masse et unité de temps par :

$$\xi = -\frac{1}{a} \frac{dn_A}{dt} = -\frac{1}{b} \frac{dn_B}{dt} = +\frac{1}{a'} \frac{dn_{A'}}{dt} \quad (\text{II.8})$$

qui ne dépend pas de l'espèce considérée : A, B, A',

Lorsque la réaction ne se fait pas en milieu fermé, elle n'est pas la seule cause pour que les nombres de mole des différentes espèces varient, mais il est clair qu'il y a encore la même proportionnalité pour les contributions de cette réaction aux variations de toutes les espèces impliquées.

II.5 Lois cinétiques [1]

On constate expérimentalement que les taux des réactions élémentaires varient comme le produit des concentrations des espèces, élevée chacune à une puissance qui correspond à leur coefficient stoechiométrique dans la réaction. Ceci n'est pas très surprenant, la probabilité de rencontre des espèces des qui vont réagir est en effet égal au produit de leur probabilité de présence à cet endroit et donc à celui de leur concentration.

Le taux de réaction, à une température donnée, égal à $k [A] [B]$, ou k est une constante appelée constante spécifique de réaction ou constante de vitesse, qui représente la probabilité que la rencontre soit effectivement réactive. Les crochets indiquent les concentrations, soit les nombres de moles par unité de volume.

C'est le taux en moles par unité de volume et de temps qui est habituellement considéré et il est clair que l'on peut en tirer les autres.

Il est clair que la constante dépend, en général, de la température, puisque le résultat de la rencontre des molécules est différent suivant l'agitation de celle-ci. Cette dépendance peut être étudiée expérimentalement et les lois trouvées sont diverses.

Les plus fréquentes sont, au moins dans un domaine limité, soit en T , avec n nombre nul, ou E désigne une grandeur appelée énergie d'activation, soit aussi en :

$$T \exp(-E/RT).$$

La constante de vitesse est exprimée par la loi exponentielle sous la forme :

$$K=A \exp(-E/RT)$$

Avec $T_a=E/RT$

Cette écriture est appelée la loi d'Arrhenius, où A est une constante, appelée « facteur préexponentiel » ou facteur de fréquence.

II.5.1 Définition de l'énergie d'activation :

Pour compléter le modèle de la théorie des collisions, il faut savoir que toutes les collisions entre molécules adéquates ne sont pas efficaces : seules les chocs efficaces, ou l'énergie cinétique des molécules qui se rencontrent est suffisante, permettent la réaction chimique. Dans le cas des choc élastiques, l'énergie cinétique des molécules qui se rencontrent n'est pas suffisante et les molécules se contentent de rebondir.

L'énergie cinétique minimale que doivent acquérir les molécules pour réagir est l'énergie d'activation

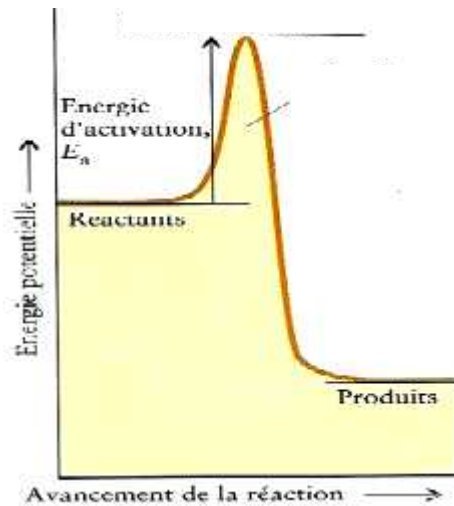


Fig.II.1 : l'énergie d'activation

II.6 Evolution de référence : [5]

L'évolution de référence est une évolution adiabatique, fermée, à pression constante. c'est dans ce cas que nous étudions la résolution du système cinétique.

pour telle évolution, nous avons : $P=Cte$

$$X_i = X_i(T_1, r_c, T) \quad (\text{II.9})$$

$$\frac{dX_i}{dt} = \frac{dX}{dt}(T_1, r_c, X_i, \sim, T) \quad (\text{II.10})$$

Dans la flamme réelle, on vérifie bien que l'évolution de X_i est indépendante des flux de chaleur et d'espèce, qui ne modifient en général que les valeurs de dX_i/dt

II.6.1 Taux de combustion :

Pour exprimer l'échauffement en fonction du taux de réaction, nous allons différentier l'équation de l'enthalpie par rapport au temps :

$$\sum_{i=1}^p H_i(T) \frac{dn_i}{dt} + \sum_{i=1}^p n_i C_{p_i}(T) \frac{dT}{dt} = 0 \quad (\text{II.11})$$

On pose : $\sum n_i C_{pi}(T) = n C_p(T)$ ou C_p est la capacité thermique molaire du mélange.

Par ailleurs :

$$\frac{dn_i}{dt} = V \sum_{k=1}^n \epsilon_{ik} \check{S}_k \quad (\text{II.12})$$

Ce qui donne :

$$n C_p(T) \frac{dT}{dt} = - \sum_{i=1}^p H(T) V \sum_{k=1}^n \epsilon_{ik} \check{S}_k \quad (\text{II.13})$$

En permutant les sommations :

$$\frac{n}{V} C_p(T) \frac{dT}{dt} = \sum_{K=1}^N \check{S}_K \sum_{i=1}^p [-\epsilon_{ik} H_i(T)] \quad (\text{II.14})$$

$\sum_{i=1}^p -\epsilon_{ik} H_i(T)$: est l'enthalpie de la réaction k à la température T

L'équation (II.14) donne

$$\frac{n}{V} C_p(T) \frac{dT}{dt} = \sum_{K=1}^N \check{S}_K \Delta H_k(T) \quad (\text{II.15})$$

La relation (II.15) est l'équation de la chaleur qui donne l'échauffement en fonction des N taux \check{S}_k des réactions.

L'enthalpie standard de combustion pour l'hydrocarbure est :

$$\Delta H_F(T_0)$$

Qui peut s'écrire :

$$\Delta H_F(T_0) = n H_{CO_2}(T_0) + \frac{m}{2} H_{H_2O}(T_0) - (n + \frac{m}{4}) H_{O_2}(T_0) - H_F(T_0) \quad (\text{II.16})$$

On définit un taux molaire de combustion W_{F_0} par :

$$W_{F_0} \Delta H_F(T_0) = \sum_{k=1}^n \check{S}_k \Delta H_F(T_0) \quad (\text{II.17})$$

L'équation de la chaleur devient :

$$\frac{n}{V} C_p (T) \frac{dT}{dt} = W_{F_0} \Delta H_F (T_0) \quad (\text{II.18})$$

W_{F_0} : est l'enthalpie sensible libéré par unité de temps et de volume, divisée par l'enthalpie standard de combustion d'une mole de combustible. On peut aussi définir un taux massique de combustion.

$$W_{F_0} = \frac{M_F W_{F_0}}{\dots} \quad (\text{II.19})$$

La solution de l'équation de l'évolution de référence va donner l'évolution de molaire de combustion W_{F_0} en fonction de température. si l'on définit une température réduite

$$\theta = \frac{T - T_1}{T_2 - T_1} \quad (\text{II.20})$$

Ou T_2 est la température de fin de combustion, on obtient pour $W_{F_0}(\theta)$ une courbe d'évolution pour $0 \leq \theta \leq 1$ (fig.II-2)

L'évolution de la différente espèce formée en fonction de la température réduite est donnée par la figure II-3.

- a- Corps intermédiaires non présentes à l'équilibre CH_3, C_2
- b- Corps intermédiaires stables à l'équilibre (CO).
- c- Radicaux intermédiaires stables à l'équilibre (OH, H).
- d- $\text{CO}_2, \text{H}_2\text{O}$
- e- C_nH_m et $f\text{-O}_2$

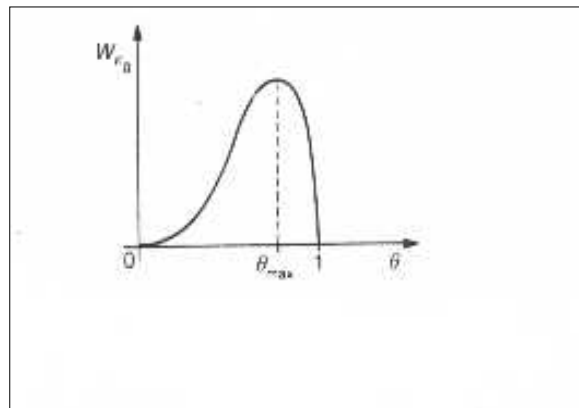


Fig.II.2 : Evolution du taux molaire de combustion en fonction de la température réduite

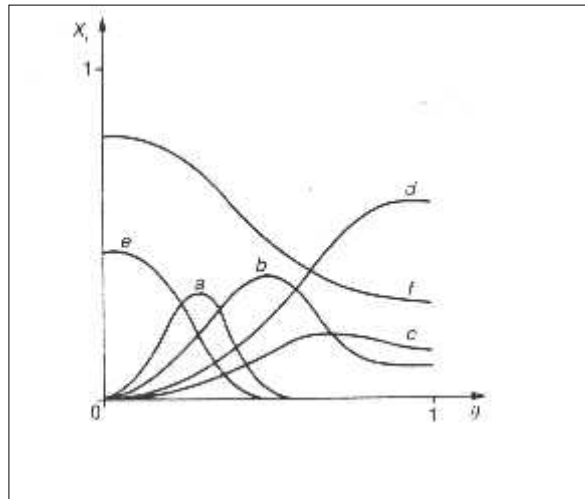


Fig.II.3 : Evolution de la fraction molaire des différentes espèces en fonction de la température réduite.

II.7 Schémas cinétique de combustion des hydrocarbures : [5]

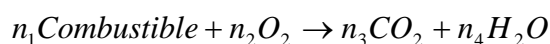
L'évolution des performances des calculateurs et les progrès obtenus dans la description des mécanismes élémentaires aujourd'hui permet de résoudre des systèmes complexes d'équation cinétique, correspondant à des schémas détaillés comportant

Plusieurs centaines d'espèces et réactions. Pour résoudre des systèmes cinétiques des codes de calcul performants sont aujourd'hui disponibles, tel que CHEMKIN.

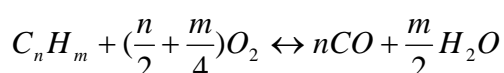
II.7.1 Schéma globaux :

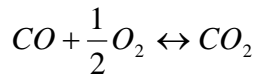
Ces schémas, d'une grande simplicité, mettent en jeu un nombre très limité d'espèces et de réactions. Ils sont applicables uniquement dans les conditions pour

Lesquelles ils ont été élaborés. Généralement basés sur des hypothèses trop simplificatrices parfois injustifiées, ils ne donnent pas des résultats précis. Parmi les schémas empiriques les plus simples font appel à une seule équation à quatre espèces :

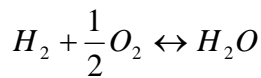


Cette réaction est assimilée à une réaction élémentaire ($a=n_1$, $b=n_2$), mais alors A et E sont fonction de la richesse, a et b sont différents de n_1 et n_2 , et A et E sont Constantes. Un modèle à une équation ne peut tenir compte de CO, qui devient non négligeable pour des richesses élevées. IL faut alors deux réactions du type :





Pour tenir compte de l'hydrogène, il est nécessaire d'utiliser un mécanisme à trois équations, on ajoutant :

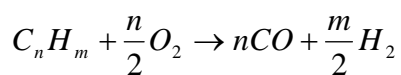


II.7.2 Une approche semi-globale :

Elle légèrement différente, cette approche consiste à distinguer deux étapes dans la réaction :

- une premier ou le combustible est oxydé en CO et H₂.
- une seconde ou sont fabriqués CO₂ et H₂.

Le modèle de la première réaction s'écrit :



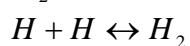
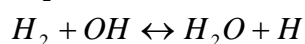
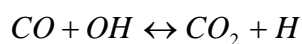
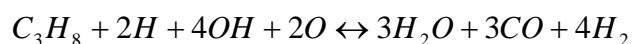
IL est suivi d'un schéma détaillé correspondant au mécanisme H₂—O₂—CO.
Enfin, certains mécanismes prennent en compte des hydrocarbures intermédiaires.

II.7.3 Schémas réduits :

Les chimistes ont développé une méthode de réduction systématique des schémas cinétiques basée sur l'hypothèse de quasi-stationnarité de certaines espèces intermédiaires. Ces schéma réduits, d'abord développés pour la combustion du méthane, on été également appliqués au propane. A partir d'un schéma cinétique détaillé de référence, une première simplification basée sur des analyses de sensibilité ou des calculs d'ordre de grandeur des vitesses de réaction conduit à un schéma semi-détaillé plus simple. A partir de ce schéma

des hypothèses de stationnarité pour toutes les espèces, sauf les espèces majoritaires et certains radicaux, permettent d'aboutir à un schéma cinétique comportant un nombre réduit d'espèces et de réaction.

Un schéma semi-détaillé à 29 espèces et 65 réactions permet d'aboutir à un schéma réduit ou toutes les espèces sont quasi stationnaires sauf C₃H₈, H, H₂O, O₂, CO₂, OH et O et où les équations sont :



Les vitesses de réaction correspondantes sont obtenues, par résolution du système linéaire des relations de quasi-stationnarité, comme combinaison linéaire des vitesses de réaction du schéma semi-détaillé. Ce schéma, valable dans le cas de mélange pauvres, devient insuffisant pour des pressions ou des richesses élevées. Dans ce cas, en effet, une espèce comme, par exemple, C_2H_2 atteint une fraction massique telle qu'elle ne peut plus être considérée comme quasi-stationnaire.



Chapitre

III

Les phénomènes de transport

III.1 Expressions des coefficients de transport : [5]

L'existence de gradients de température, de concentration ou de vitesse provoque des flux de matière, d'énergie ou de quantité de mouvement dont la description par des lois phénoménologiques est bien connue.

-La loi de Fick précise la diffusion de masse : le flux de masse par unité de temps et de surface est égal à :

$$G_{D_j} = -\dots D_{ij} \nabla y_j \quad (\text{III.1})$$

$$y_j = m_j / m$$

avec D_{ij} : diffusivité massique de l'espèce j par rapport à l'espèce i

m (resp. m_j) masse (resp. masse de l'espèce j).

-La loi de Fourier définit le flux thermique par unité de temps et de surface :

$$G_T = -\lambda \nabla T = -\dots C_p D_T \nabla T \quad (\text{III.2})$$

avec λ conductivité thermique, et D_T diffusivité thermique

-La loi de Newton donne le flux de quantité de mouvement par unité de temps et de surface :

$$G_u = -\mu \nabla u = -\epsilon \dots \nabla u \quad (\text{III.3})$$

avec μ viscosité dynamique, ϵ viscosité cinématique

Les coefficients définis sont tous de dimension $L^2 T^{-1}$. En les comparant entre eux pour déterminer les phénomènes dominants, on introduit :

-le nombre de Prandtl : $Pr = \mu / D_T$ qui compare le transport de quantité de mouvement au transport thermique

-le nombre de Schmidt : $Sc = \mu / D_{ij}$ qui compare le transport de quantité de mouvement au transport de masse par diffusion (diffusion moléculaire et viscosité)

- le nombre de Lewis : $Le = D_T / D_{ij} = Sc / Pr$ qui compare le transport de masse par diffusion au transport thermique et exprime l'importance relative de la conduction du chaleur par rapport à la diffusion d'une espèce i . Pour les mélanges dilués dans N_2 comme par exemple dans le cas de la combustion avec l'air, on trouve les valeurs suivantes : pour H_2 : $Le = 0,3$; pour CH_4 , $Le = 1,01$; pour C_3H_8 , $Le = 1,7$

Si, en particulier, $D_T = D_{ij} = \mu$, les trois nombres Pr , Sc et Le sont égaux à 1, les profils de vitesse, de concentration et de température sont les mêmes : c'est l'analogie de Reynolds.

Les transports de masse m_j , de quantité de mouvement mu , d'énergie me peuvent également être la conséquence du mouvement de fluide. C'est le transport convectif dont le flux massique est u (u étant la vitesse moyenne). Le flux convectif est alors :

$I = u(F/m)$, où $F = m_j, mu$ ou me , soit :

$$I_j = uy_j ; I_u = uu ; I_e = ue$$

avec : I_j, I_u : flux convectif respectivement de l'espèce j et de la quantité de mouvement
 ue : flux convectif d'énergie par unité de temps et de surface.

III.2 Phénomènes de transports moléculaires et expressions des flux [1]

III.2.1 Approximation linéaire :

L'approximation de base de la thermodynamique linéaire des processus irréversible consiste à dire que pour des situations peu éloignées de l'équilibre les flux j sont reliés aux forces généralisés par des relations linéaires. On se souvient bien sur qu'à l'équilibre les forces sont nulles. Cela implique le développement linéaire suivant :

$$w_k = \sum_i L_{ik} X_i \quad (\text{III.4})$$

Où les L_{ik} sont les coefficients phénoménologiques d'Onsager.

w_k sont les flux et les X_i sont les forces généralisées

Dans cette approximation linéaire, on obtient donc une production d'entropie de forme :

$$\dots w_s = \sum_i \sum_k L_{ik} X_i X_k \quad (\text{III.5})$$

et le fait que cette production soit toujours positive, ou nulle à l'équilibre, impose que la matrice L soit définit positive.

Il peut donc exister une série de couplages entre les différents flux et différentes forces comme la montre la figure III.1.

\dagger_{rs} : le frottement visqueux

$J_{Q,r}$: le flux de chaleur

$J_{i,r}$ la diffusion des espèces

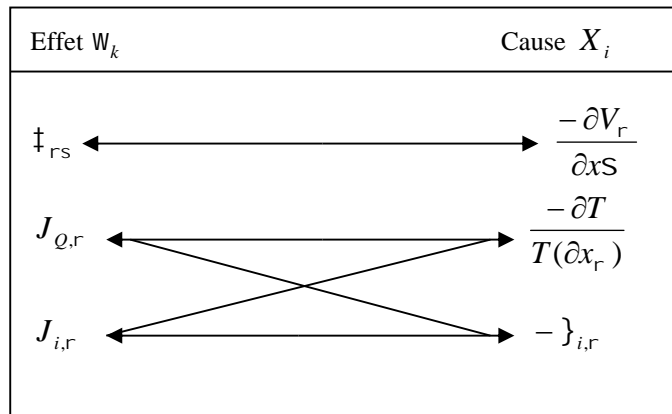


Figure III.1 : Les relations « Flux - Forces »

III.2.2 Flux de quantité de mouvement et tenseur des frottements :

Comme on l'a vu au paragraphe précédant, tenant compte de l'isotropie des forces de pression on écrit le flux J_v sous la forme suivant :

$$J_{\epsilon,rs} = p u_{rs} + \dagger_{rs} \tag{III.6}$$

Où u_{rs} est le tenseur de kronecher ($u_{12} = u_{21} = u_{31} = u_{13} = u_{23} = u_{32} = 0, u_{22} = u_{33} = 1$) et le tenseur des frottements ou le tenseur des contraintes visqueuses.

Utilisant maintenant le développement linéaire d'Onsager, le couplage entre

\dagger_{rs} et $(\partial v_r / \partial x_s)$ ce qui donne l'expression suivante :

$$\dagger_{rs} = - \sum_{rs} L_{rs}^{xu} \frac{\partial v_x}{\partial x_u} \tag{III.7}$$

Où les L_{rs}^{xu} sont des coefficients d'Onsager. Le théorème d'Onsager conduit à :

$$L_{rs}^{xu} = L_{sr}^{ux}$$

et \dagger_{rs} peut alors s'écrire :

$$\dagger_{rs} = - \frac{1}{2} \sum_{xu} L_{rs}^{xu} \left(\frac{\partial v_x}{\partial x_u} + \frac{\partial v_u}{\partial x_x} \right) \tag{III.8}$$

Si le milieu est isotrope le tenseur \dagger_{rs} doit prendre la forme simplifiée suivante :

$$\dagger_{rs} = - \left(\frac{\partial v_r}{\partial x_s} + \frac{\partial v_s}{\partial x_r} \right) + \mu \left(\frac{\partial v_x}{\partial x_x} \right) u_{rs} \tag{III.9}$$

Où les scalaires μ sont les coefficients de viscosité.

En générale, on décompose \dagger_{rs} en un tenseur de trace nulle, plus un tenseur unité.

La sommation \dagger_{rs} s'écrit :

$$\dagger_{rs} = (-2\tilde{\nu} + 3\gamma) \frac{\partial v_r}{\partial x_r} \quad (\text{III.10})$$

En introduisant k' tel que :

$$\gamma = \frac{2}{3}\tilde{\nu} - k'$$

\dagger_{rs} Prend la forme :

$$\dagger_{rs} = -\tilde{\nu} \left(\frac{\partial v_r}{\partial x_s} + \frac{\partial v_s}{\partial x_r} \right) + \left(\frac{2}{3}\tilde{\nu} - k' \right) \frac{\partial v_x}{\partial x_x} u_{rs} \quad (\text{III.11})$$

μ le coefficient de viscosité et k' le coefficient de viscosité en volume. C'est la loi de Newton, et fluides qui la suivent sont appelés « newtoniens ». La théorie cinétique des gaz, ou l'expérience, doit donner la valeur des coefficients μ et k' . Pour les gaz monoatomiques, la théorie cinétique donne $k' = 0$.

III.3 Flux de masse et de chaleur : [1]

Pour N espèces chimiques, le couplage entre flux et forces s'écrit :

$$J_{Q,r} = -\frac{L_{00}}{T} \frac{\partial T}{\partial x_r} - \sum_i L_{0j} \}_{jr} \quad (\text{III.12})$$

$$J_{i,r} = -\sum_j L_{ij} \}_{ir} - \frac{L_{0j}}{T} \frac{\partial T}{\partial x_r} \quad (\text{III.13})$$

Où l'indice 0 correspond à la température et les indices i aux N espèces chimique. Le théorème d'Onsager donne $L_{0i} = L_{i0}$. L'expression (III.14) pour les flux $J_{Q,r}$ et $J_{i,r}$ montre qu'ils sont des fonctions linéaires des trois gradients : $\partial T / \partial x_r$, $\partial Y_i / \partial x_r$, $\partial P / \partial x_r$.

$$\}_{i,r} = \sum_{i \neq j} \left(\frac{\partial \tilde{\nu}_j}{\partial Y_i} \right)_{T,p} \frac{\partial Y_j}{\partial x_r} + \frac{1}{\dots_i} \frac{\partial P}{\partial x_r} \quad (\text{III.14})$$

Ou $\}_{i,r}$ regroupe les termes dépendent des gradients de pression et des fractions massiques des espèces

$$J_{Q,r} = -\frac{L_{00}}{T} \frac{\partial T}{\partial x_r} - \sum_j L_{0j} \sum_k \left(\frac{\partial \tilde{\nu}_j}{\partial Y_k} \right)_{T,p} \cdot \frac{\partial Y_k}{\partial x_r} - \sum_j \frac{L_{0j}}{\dots_j} \frac{\partial P}{\partial x_r} \quad (\text{III.15})$$

$$J_{i,r} = -\sum_j L_{ij} \sum_{k \neq j} \left(\frac{\partial \tilde{\nu}_j}{\partial Y_k} \right)_{T,p} \cdot \frac{\partial Y_k}{\partial x_r} - \sum_j \frac{L_{ij}}{\dots_j} \frac{\partial p}{\partial x_r} - \frac{L_{0j}}{T} \frac{\partial T}{\partial x_r} \quad (\text{III.16})$$

Dans le cas d'un mélange de gaz parfaits, on trouve :

$$\left. \frac{\partial \tilde{v}_i}{\partial Y_j} \right)_{T,P,i \neq j} = -\frac{R_i T}{X_i} \quad (\text{III.17})$$

Où $X_i = n_i / n$ est la fraction molaire de l'espèce i , et :

$$\frac{R_i T}{P_i} = \frac{R_i T}{p X_i} \quad (\text{III.18})$$

avec : $R_i = R / M_i$; l'expression de $J_{i,r}$ devient alors :

$$J_{i,r} = \sum_{i \neq j} \left(-\frac{R_i T}{X_i} \right) \frac{\partial X_j}{\partial Y_j} \frac{\partial X_j}{\partial X_r} + \frac{R_i T}{X_i P} \frac{\partial P}{\partial x_r} \quad (\text{III.19})$$

Or la fraction molaire est :

$$X_i = \frac{\frac{Y_i}{M_j}}{\sum_k \frac{Y_k}{M_k}} = \frac{Y_i M}{M_j} \quad (\text{III.20})$$

M étant la masse molaire moyenne du mélange .cette dernière relation implique :

$$J_{i,r} = \frac{R_i T}{X_i} \sum_{i \neq j} \frac{M}{M_j} \frac{\partial Y_j}{\partial X_r} + \frac{1}{P} \frac{\partial P}{\partial x_r} \quad (\text{III.21})$$

Sachant que : $\sum_{i \neq j} X_i = 1 - X_i$, on trouve finalement :

$$J_{i,r} = \frac{R_i T}{X_i} \left(\frac{M}{M_i} \frac{\partial Y_i}{\partial x_r} + \frac{1}{p} \frac{\partial P}{\partial x_r} \right) \quad (\text{III.22})$$

Et le flux de masse $J_{i,r}$ s'écrit :

$$J_{i,r} = -\frac{L_{0i}}{T} \frac{\partial T}{\partial x_r} - \sum_{j=1}^N L_{ij} \frac{R_i T}{X_i} \left(\frac{M}{M_i} \frac{\partial Y_i}{\partial x_r} + \frac{1}{p} \frac{\partial p}{\partial x_r} \right) \quad (\text{III.23})$$

Sachant que les Y_i et les X_i ne sont pas tous indépendants $\sum_{i \neq j} X_i = 1$ l'expression précédente devient :

$$J_{i,r} = -\frac{L_{0i}}{T} \frac{\partial T}{\partial x_r} - \sum_{i \neq j} T \left(L_{ii} \frac{R_i}{X_i} - L_{ij} \frac{R_j}{X_j} \right) \frac{\partial X_i}{\partial x_r} - \sum_j L_{ij} \frac{R_j T}{X_i} \frac{1}{p} \frac{\partial p}{\partial x_r} \quad (\text{III.24})$$

On introduit alors les coefficients de diffusion D_{ij} , $D_{p,i}$ et $D_{T,i}$ définis par :

$$\dots D_{ij} = RT \frac{M}{M_j} \left(\frac{L_{ii}}{X_i M_i} - \frac{L_{ij}}{X_i M_j} \right) \quad (\text{III.25})$$

$$D_{p,i} = \sum_j L_{ij} R_j \frac{T}{X_j} \quad (\text{III.26})$$

$$D_{T,i} = L_{0i}$$

Remarquons que l'on obtient bien $D_{ij}=0$, ce qui correspond à la définition des coefficients de diffusion en théorie statistique.

$$J_{i,r} = \sum_j \dots D_{ij} \frac{\partial Y_i}{\partial x_r} - \frac{D_{T,i}}{T} \frac{\partial T}{\partial x_r} - D_{p,i} \frac{\partial \ln p}{\partial x_r} \quad (\text{III.27})$$

Dans cette relation le premier terme représente l'effet direct (diffusion de l'espèce i dans l'espèce j due aux gradients des fractions massiques de ces espèces). le deuxième terme représente l'effet du gradient de température sur la diffusion des espèces le troisième est l'effet du gradient de pression sur la diffusion des espèces.

III.4 Approximation binaire pour les espèces :[1]

L'approximation d'un mélange binaire est utilisée dans de nombreux problèmes de combustion. Elle suppose qu'une espèce chimique est largement majoritaire dans le mélange (N_2 par exemple dans un mélange combustible air + hydrocarbure).

Les coefficients de diffusion peuvent alors être considérés comme représentant la diffusion d'une espèce dans l'espèce dominante, soit :

$$D_{ij} = D_i \quad i \neq j$$

et la relation (III.27) se simplifie en :

$$J_{i,r} = - \dots D_i \frac{\partial Y_i}{\partial x_r} - \frac{D_{T,i}}{T} \frac{\partial T}{\partial x_r} - D_{p,i} \frac{\partial \ln p}{\partial x_r} \quad (\text{III.28})$$

Dans de nombreux cas pratiques (mélange air – hydrocarbure par exemple) et en général $D_{ij}/D_{T,i} > 10$, on obtient alors de Fick :

$$J_{i,r} = - \dots D_i \frac{\partial Y_i}{\partial x_r} \quad (\text{III.29})$$

On introduit aussi quelquefois une vitesse de diffusion de l'espèce i qui est définie par :

$$\dots_i V_{i,r} = J_{i,r}$$

III.5 Flux d'énergie : [1]

En ce qui concerne le flux d'énergie on introduit un coefficient de conduction de la chaleur défini par la relation suivante :

$$\lambda = \frac{L_{00}}{T} \quad (\text{III.30})$$

Ce qui conduit à un flux de chaleur sous la forme :

$$J_{Q,r} = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_r} - \sum_j D_{T,j} J_{j,r} \quad (\text{III.31})$$

Le premier terme exprime le flux de chaleur fonction linéaire du gradient de température c'est la loi de Fourier. Le deuxième groupe de terme représente en particulier l'effet des gradients de masses des espèces sur le flux de chaleur, c'est l'effet Dufour.

Les coefficients $D_{T,j}$ sont en général négligeables devant λ .

Utilisant l'expression suivant (III.28) ce qui donne la relation entre le flux de chaleur J_Q et le flux total d'énergie interne J_e , on obtient :

$$J_{Q,r} = J_{e,r} - \sum_i J_{i,r} h_i \quad (\text{III.32})$$

$$J_{e,r} = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_r} + \sum_j J_{j,r} h_j \quad (\text{III.33})$$

Dans le cas d'un constituant unique, les flux d'espèces J_i dus à la diffusion moléculaire sont nuls et on obtient la « loi de Fourier » :

$$J_{e,r} = J_{Q,r} = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_r} \quad (\text{III.34})$$

Les coefficients D_{ij} , μ , etc. doivent être déterminé par la théorie cinétique du mélange gazeux. On peut trouver dans des tables, ces coefficients et leur variation en fonction des conditions thermodynamiques.



Chapitre

IV

Les équations de bilan pour un mélange de gaz réactifs

Les équations qui gouvernent la combustion sont en fait celles de la mécanique des fluides aux quelles on ajoute les équations de conservation de chaque espèce et de l'énergie.

IV.1 Définitions relatives au bilan de masse : [9]

Dans un écoulement avec réactions chimiques il est nécessaire, en plus des variables état classiques : pression, température, vitesse ...de définir des variables caractérisant la composition du milieu. Chaque substance étant repérée par exemple par l'indice k.

La masse de l'espèce k s'écrit :

$$m_k = n_k \cdot M_k \quad (IV.1)$$

n_k : étant le nombre de moles de l'espèce K

M_k : sa masse molaire.

Il en résulte que la masse totale m du volume [est :

$$m = \sum_{k=1}^N m_k \quad (IV.2)$$

Si nous admettons que N espèces composant la masse m , de même le nombre de moles total n est égal à :

$$n = \sum_{k=1}^N n_k \quad (IV.3)$$

Cette dernière définition conduit à l'expression de la masse molaire du mélange :

$$M = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^N n_k \cdot M_k \quad (IV.4)$$

La quantité relative d'espèce K composant le système est donnée soit par la fraction molaire :

$$X_k = \frac{n_k}{n} \quad (IV.5)$$

soit par la fraction massique :

$$Y_k = \frac{m_k}{m} \quad (IV.6)$$

Les chimistes préfèrent rapporter la composition au volume considéré, ce qui aboutit du titre ou de la concentration molaire :

$$C_k = \frac{n_k}{\hat{V}} \quad (IV.7)$$

\hat{V} : volume de contrôle

La concentration globale C et la masse volumique ρ du mélange se déduisent des définitions de C_k et ρ_k :

$$C = \sum_{k=1}^N C_k \quad (IV.8)$$

$$\rho = \sum_{k=1}^N \rho_k \quad (IV.9)$$

Le passage de l'un à l'autre de ces paramètres caractérisant la composition du milieu s'effectue au moyen des relations :

$$Y_k = \frac{\rho_k}{\rho} = \frac{M_k}{M} \cdot \frac{C_k}{C} = \frac{M_k}{M} X_k \quad (IV.10)$$

IV.2 Equation de conservation de masse (continuité) : [7]

On considère la flamme plane unidimensionnelle d'une épaisseur ΔX (figure IV.1)

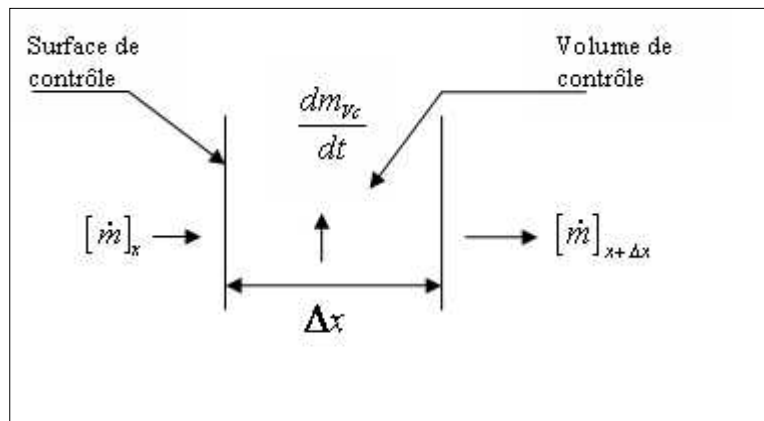


Fig.IV.1 : volume de contrôle unidimensionnel pour une flamme plane

$[\dot{m}]_x$: masse entrante dans le volume de contrôle.

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

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

Si on fait le bilan massique on trouve :

$$\frac{dm_{Vc}}{dt} = [\dot{m}]_x - [\dot{m}]_{x+\Delta x} \quad (\text{IV.11})$$

m_{Vc} : masse de volume de contrôle.

$$m_{Vc} = \dots \hat{}$$

$\hat{}$: volume de contrôle.

$$\hat{} = \sum dx$$

Σ : surface de volume de contrôle.

Le débit massique :

$$\dot{m} = \dots V_x \Sigma$$

V_x : vitesse de l'écoulement au point x.

L'équation (IV.11) peut être écrite comme suit :

$$\frac{d(\dots \sum \Delta x)}{dt} = [\dots V_x \Sigma]_x - [\dots V_x \Sigma]_{x+\Delta x} \quad (\text{IV.12})$$

En divisant l'équation par $\Sigma \Delta x$ et sachant que Δx tend vers zéro, on obtient :

$$\frac{\partial \dots}{\partial t} = - \frac{\partial (\dots V_x)}{\partial x} \quad (\text{IV.13})$$

La forme générale de cette équation s'écrit :

$$\frac{\partial \dots}{\partial t} + \nabla(\dots V) = 0 \quad (\text{IV.14})$$

IV.3 Equation de conservation des espèces : [9]

Le démarche consiste à écrire les équations de conservation de la mécanique des fluides pour chacun des espèces puis en déduire les équations du mélange. L'équation de la continuité de le K^{ieme} espèce a pour expression :

$$\frac{\partial \dots_k}{\partial t} + \nabla(\dots_k [\dots]_k) = \dots_k \quad (\text{IV.15})$$

avec :

$\dot{\dots}_k$: taux de consommation ou de production chimiques

La vitesse de l'espèce k donnée par la relation suivante :

$$V_k = [{}_k - V \tag{IV.16}$$

V_K : vitesse de diffusion de l'espèce

$[{}_k$: vitesse de l'espèce k

V : vitesse du mélange

On remplace l'expression (IV.16) dans l'équation (IV.15), on obtient :

$$\frac{\partial \dot{\dots}_k}{\partial t} + \nabla(\dots_k V) = -\nabla(\dots_k V_k) + \dot{\dots}_k \tag{IV.17}$$

On a les relations suivantes :

$$\dot{\dots}_k = \dots \cdot Y_k \tag{IV.18}$$

$$\dots_k V_k = -\dots D \nabla Y_k \tag{IV.19}$$

Pour simplifier l'équation des espèces, l'hypothèse de chimie simple consiste à supposer qu'une seule réaction chimique du type :



En remplaçant les équations (IV.18) et (IV.19) dans l'équation (IV.17), on obtient l'équation de conservation des espèces :

$$\dots \frac{\partial Y}{\partial t} + \dots \nabla(YV) = -M\check{S}(\dots, Y, T) + \nabla(\dots D \nabla Y) \tag{IV.20}$$

IV.4 Equation de conservation d'énergie : [9]

La forme générale de l'équation d'énergie donnée par :

$$\frac{\partial E}{\partial t} + \nabla(EV + pV) = \dots F \cdot V - \nabla q + \sum_{j=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_j} \sum_{j=1}^3 (\ddagger_{ij} \cdot V_j) \quad , \quad (1 \leq j \leq 3) \tag{IV.21}$$

avec :

x_j : les coordonnées spatiales $(1 \leq j \leq 3)$

V_j : les composantes de la vitesse du mélange $(1 \leq j \leq 3)$

$\ddagger = \ddagger_{ij}$: tenseur des contraintes visqueuses

F : les forces extérieures appliquées par unité de masse

q : flux surfacique de chaleur dans le mélange

E : énergie totale du mélange par unité de volume

Pour cela les termes visqueux sont négligeable et les force extérieur.

Donc l'équation (IV.21) devient :

$$\frac{\partial E}{\partial t} + \nabla(EV + pV) = \nabla(\rho \nabla T) + Q \nabla(\dots D \nabla Y) \quad (\text{IV.22})$$

La chaleur dégagée par la réaction chimique est:

$$Q = h_1^0 - h_2^0$$

L'énergie totale par unité de volume est:

$$E = \frac{1}{2} \dots V^2 + Q \dots Y + \dots h_2 + \dots Cp(T - T^0) - p$$

Il est classique en combustion de remplacer l'équation de l'énergie (IV.22) par l'équation de la flamme isobare :

$$\dots Cp \frac{\partial T}{\partial t} + \dots Cp.V.\nabla(T) = MQ\dot{S}(\dots Y, T) + \nabla(\rho \nabla T) \quad (\text{IV.23})$$

IV.5 Equation de quantité de mouvement : [2]

L'équation de la conservation de quantité du mouvement des flammes s'écrit:

$$\frac{\partial \dots [\dots]_i}{\partial t} + \nabla(\dots [\dots]_i V) = - \frac{\partial p}{\partial x_i} + \sum_{j=1}^3 \frac{\partial \ddagger_{ij}}{\partial x_j} \quad (\text{IV.24})$$

On suppose que chaque espèce se comporte comme un gaz parfait :

Avec P la pression totale telle que :

$$P = \sum_{k=1}^N P_k(x, t) = \sum_{k=1}^N \frac{\dots RT}{w_k} y_k \quad (\text{IV.25})$$

w_k étant la masse molaire de l'espèce k

\ddagger : le tenseur de Reynolds égal à :

$$\ddagger = \frac{4}{3} \sim \frac{\partial u}{\partial x}$$

L'équation de la conservation de quantité du mouvement des flammes isobares qui se propagent dans un tube ouvert est de la forme :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\dots [\dots]_i) + \nabla(\dots [\dots]_i V) = - \frac{\partial P}{\partial x_i} \quad (\text{IV.26})$$



Chapitre

V

Flamme de prémélange

V.1 Généralités :

V.1.1 Introduction :

Parmi les types de flammes le plus fréquemment rencontrés, l'un des plus communs est sans doute la flamme laminaire prémélangée. Ou la structure réactive se propageant par déflagration dans un milieu combustible où combustible et comburant sont préalablement mélangés. C'est, en particulier, celle qui existe dans le brûleur d'une cuisinière à gaz et, plus simplement, dans un bec Bunsen. Plus exactement, la flamme rencontrée dans ce cas n'est une flamme de prémélange pur que lorsque le réglage de l'installation est tel que l'on se trouve en présence d'un mélange pauvre.

V.1.2 Définitions : [6]

V.1.2.1 Front de la flamme :

C'est une zone d'épaisseur finie, sépare les gaz frais des gaz brûlés, définie à l'aide d'une valeur particulière du gradient d'une variable d'état (par exemple température ou concentration). Dans les conditions normales de pression, l'ordre de grandeur de cette épaisseur est quelques dixièmes de millimètre.

V.1.2.2 Déflagration :

Mode de propagation autonome subsonique dans un milieu combustible (idéalement prémélange) grâce à son couplage avec les mécanismes de transport de chaleur et de matière.

V.2 Interprétation physique d'une flamme de prémélange : [1]

Quels sont les phénomènes physiques responsables de la propagation de ce front de flamme ? En fait, les gaz prémélangés ne réagissent pas spontanément, et ne peuvent le faire assez vite que si leur température est au-dessus d'une certaine valeur, les gaz chauds derrière la flamme chauffent par conduction thermique moléculaire les gaz frais qui sont devant ces derniers, arrivés à un certain niveau de température, réagissent en dégageant de la chaleur qui sert à chauffer les gaz encore en aval. Cet échauffement par conduction se fait sur une épaisseur u_L . De ce fait, si l'on mesure les valeurs de la température et de la concentration des réactifs dans l'épaisseur u_L (faible) de la flamme. On trouve le profil donné par la figure.V.1.

Dans l'épaisseur u_L de la flamme, la température monte pendant que la concentration des réactifs décroît ; cependant les réactions chimiques ne se produisent que dans une zone « de réaction » d'épaisseur u_R , encore plus fine que u_L . Dans la zone précédente la zone de réaction, ce sont de simples processus de diffusion qui se produisent : diffusion de chaleur comme il est dit plus haut, mais aussi diffusion des gaz brûlés et de certaines espèces radicalaires très réactives qui se produites dans la zone de

réaction et contribuent, tout autant que la température, sinon plus dans certains cas, à la croissance du taux de réaction.

Il est possible de subdiviser la région où se produit la combustion en deux zones principales: [5]

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

Dans la zone de préchauffage, les phénomènes essentiels sont des transferts de chaleur et de matière. En revanche, les réactions chimiques y dépendent essentiellement du combustible utilisé; pour une molécule très stable. On ne constate ni décomposition ni pyrolyse. Pour les autres hydrocarbures saturés, les phénomènes de craquage thermique et de pyrolyse sont au contraire importants et produisent des hydrocarbures plus légers. Le résultat essentiel est que, quel que soit le combustible, les corps qui entrent dans la zone de réaction proprement dite sont très voisins. C'est ce qui explique que, pour tous ces corps, on trouve des caractéristiques de combustion très proches dans un bec Bunsen. L'essentiel des réactions chimiques qui ont lieu dans la zone de réaction peut être décrit à l'aide du modèle de la réaction simple.

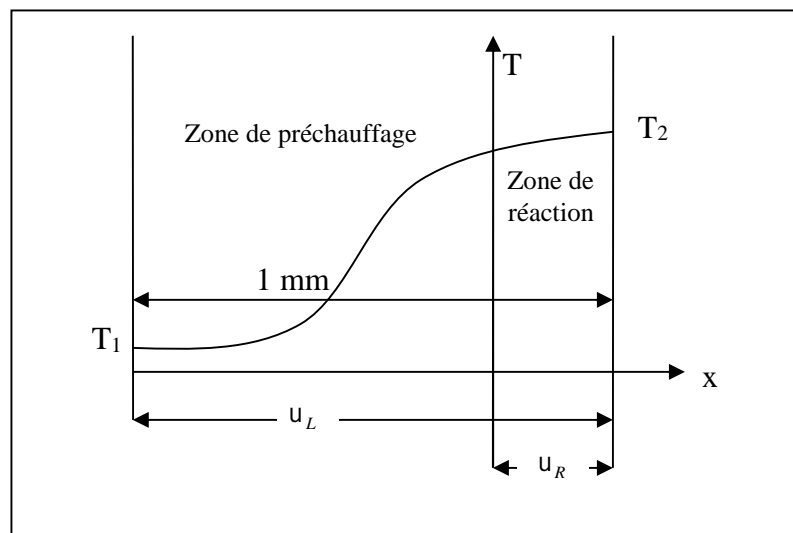


Fig.V.1: Evolution de la température de la flamme.

V.3 Onde de combustion planes : [1]

V.3.1 Définition du phénomène physique :

On s'est aperçu de façon expérimentale que les flammes de prémélange ont souvent des épaisseurs très petites devant les échelles de la mécanique et qu'elles se propagent dans les gaz frais. Ceci conduit à essayer les représenter comme des ondes de combustion.

D'une manière globale, on voit une onde de combustion dans un écoulement comme une discontinuité séparant un milieu amont de conditions uniformes (1), correspondant au mélange frais, d'un milieu aval aux conditions uniformes (2) correspondant aux gaz

brûlés en équilibre chimique. De fait, pour un état thermodynamique donné à l'amont : h_1, \dots, P_1, Y_K^1

Les caractéristiques à l'aval de l'onde, h_2, \dots, P_2, Y_K^2 , dépendent du débit $\dots u_1$ et différents cas sont possibles.

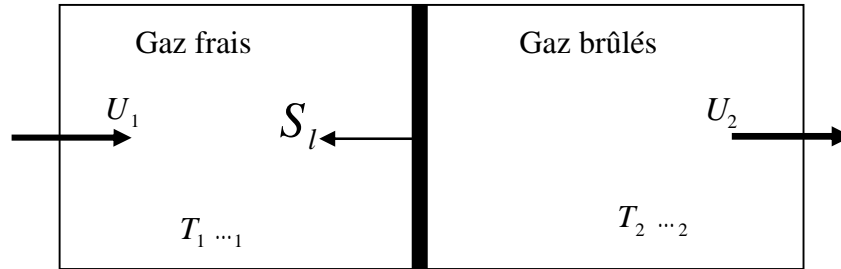


Fig.V.2: Représentation plane d'une onde de combustion

Si l'on place dans un repère lié à l'onde de combustion, supposé soit stationnaire, soit en mouvement uniforme, les équations reliant les caractéristiques des milieux amont et aval sont :

$$\dots u_1 = \dots u_2 = \dot{m} \quad (\text{V.1})$$

$$P_1 + \dots u_1^2 = P_2 + \dots u_2^2 \quad (\text{V.2})$$

$$h_1 + \frac{u_1^2}{2} = h_2 + \frac{u_2^2}{2} \quad (\text{V.3})$$

et les équations d'état :

$$P = \frac{\dots R_1 T}{\bar{M}} \quad (\text{V.4})$$

\bar{M} : masse molaire moyenne.

$$h = \bar{C}_p T + \sum Q_{pk}^1 Y_k \quad (\text{V.5})$$

Dans le cas où la cinétique dans l'onde de combustion comporte de nombreuses réactions, un calcul d'équilibre chimique est nécessaire pour déterminer les fractions massiques finales, comme fonction de P_2 et T_2 . Mais les équations (V.1) à (V.4) restent valables.

V.3.2 La solution d'Hugoniot :

L'équation (V.1) donne :

$$\dots u_2^2 - \dots u_1^2 = \dot{m} \left(\frac{1}{\dots_2} - \frac{1}{\dots_1} \right)$$

et avec (V.2) :

$$\frac{P_2 - P_1}{\frac{1}{\dots_2} - \frac{1}{\dots_1}} = -\dot{m}^2 \quad (\text{V.6})$$

Dans le plan (P,1/...), l'expression (V.6) est appelée droite de Rayleigh.
De plus, (V.3), (V.1) et (V.6) donnent :

$$h_2 - h_1 = \frac{1}{2}(P_2 - P_1) \left(\frac{1}{\dots_1} - \frac{1}{\dots_2} \right)$$

et : $h_2 - h_1 = \overline{Cp}(T_2 - T_1) - Y_K^1 \Delta Q = \frac{\chi}{\chi - 1} \left(\frac{P_2}{\dots_2} - \frac{P_1}{\dots_1} \right) - Y_K^1 \Delta Q$

avec:

$$\chi = \frac{\overline{Cp}}{\overline{Cv}} \quad \text{et} \quad \overline{Cp} - \overline{Cv} = R_1 / \overline{M}$$

$$\text{d'où : } \frac{\chi}{\chi - 1} \left(\frac{P_2}{\dots_1} - \frac{P_1}{\dots_1} \right) - \frac{1}{2}(P_2 - P_1) \left(\frac{1}{\dots_2} + \frac{1}{\dots_1} \right) = Y_K^1 \Delta Q \quad (\text{V.7})$$

C'est la courbe d'Hugoniot dans le plan (P,1/...).

On peut exprimer (V.6) et (V.7) sous forme adimensionnelle en posant :

$$\frac{P_2}{P_1} = P^*$$

$$\frac{\dots_2}{\dots_1} = \dots^* = \hat{\dots}^{*-1}$$

$$r = \frac{\dots_1 Y_K^1}{P_1} \Delta Q$$

Et on obtient les équations finales donnant P^* , $\hat{\dots}^*$ pour un débit m donné :

$$\frac{\chi}{\chi - 1} (P^* \hat{\dots}^* - 1) - \frac{1}{2} (\hat{\dots}^* + 1) (P^* - 1) = r \quad (\text{V.8})$$

$$\frac{(P^* - 1)}{(\hat{\dots}^* - 1)} = -\frac{\dot{m}^2}{P_1 \dots_1} \quad (\text{V.9})$$

La courbe d'Hugoniot correspondant à (V.8) est tracée figure (V.3) pour un état de départ $P^* = 1, \hat{\dots}^* = 1, m$, les solutions se trouvent donc à l'intersection de la courbe (V.8) et de droite (V.9), on remarque que :

-la pente de (V.9) étant toujours négative, cela exclut du domaine des solutions la zone hachurée sur la figure V.3.

-les courbes (V.8) sont asymptotes à :

$$P^* = -\frac{\chi - 1}{\chi + 1} \quad \hat{v}^* = \frac{\chi - 1}{\chi + 1}$$

Ce qui montre que les solutions sont telles que :

$$0 \leq P^* \leq \infty, \quad \frac{\chi - 1}{\chi + 1} \leq \hat{v}^* \leq 2r + \frac{\chi + 1}{\chi - 1}$$

Grâce à (V.1), on peut remarquer que \hat{v}^* représente aussi bien le rapport des volumes massiques que celui des vitesses (u_2/u_1).

Pour $r \neq 0$, chaque courbe d'Hugoniot est divisée en deux branches séparées sur lesquelles se trouvent tous les états finaux physiquement possibles :

-la branches haute est celle des détonations, telles que $P_2 > P_1$.

-la branches basse est celle des déflagrations, telles que $P_2 < P_1$

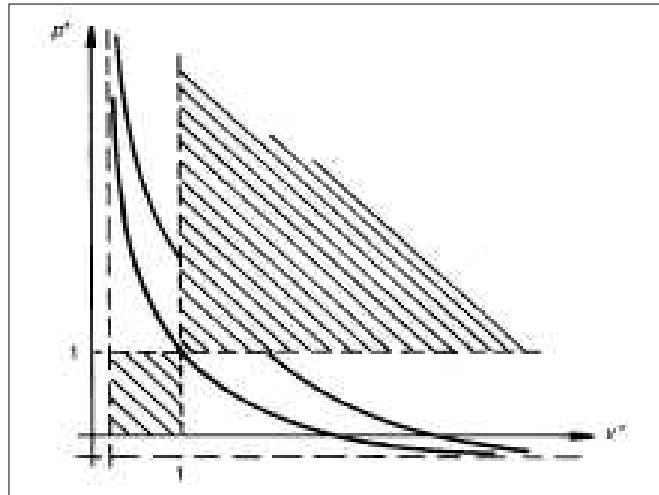


Fig.V.3 Courbe d'Hugoniot, dans le plan (P^* , \hat{v}^*)

V.3.3 Branche des déflagrations :

La branche des déflagrations figure (V.4) correspond aux solutions :

$$1 + r \frac{\chi - 1}{\chi} \leq \hat{v}^* \leq 2r + \frac{\chi + 1}{\chi - 1} \quad 0 \leq P^* \leq 1$$

Donc, à la traversée d'une onde de déflagration on observe une diminution de pression et une augmentation de la vitesse accompagnée d'une détente $\dots_2 < \dots_1$.

Le point CJ' correspond, à $M_2=1$. On a deux solutions possibles : A', qui représente une déflagration faible, et B', qui représente une déflagration forte. En fait pour des raisons de structure interne de l'onde de déflagration on montre que seule la demi-branche des déflagrations faibles correspond à des solutions physiques : sur l'autre branche on a en effet $S_2 < S_1$.

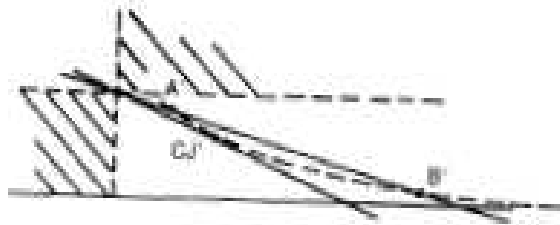


Fig.V.4 Branche de déflagrations

Le calcul des coordonnées du point CJ' permet de déterminer la pente de la droite de Rayleigh à ce point, c'est-à-dire la vitesse u_1' maximum d'une déflagration. On trouve :

$$M_1' = \frac{u_1'}{a_1} = \left(1 + \frac{r(x^2 - 1)}{2x}\right)^{\frac{1}{2}} - \left(\frac{r(x^2 - 1)}{2x}\right)^{1/2} < 1$$

Ce qui montre que toutes les déflagrations sont subsoniques. De fait, la plupart des déflagrations observées sont telles que $P^* \approx 1$. C'est le cas des flammes. Une flamme de prémélange est donc une déflagration faible.

V.4 Théories de flamme de prémélange laminaire : [5]

Durant les cent dernières années, beaucoup de physiciens et de chimistes ont développé des méthodes et théories pour déterminer la vitesse de flamme. Parmi les approches théoriques pour le calcul de la vitesse de la flamme laminaire sont :

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

V.4.1 Théorie thermique :

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

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

V.4.1.1 Théorie de Mallard et Le Chatelier

C'est la première théorie développée pour calculer cette vitesse de déplacement fut par Mallard et Le Chatelier en 1883. Ils proposent de diviser la flamme en deux zones. La première correspond à la zone de préchauffage, dans laquelle les gaz frais vont être chauffés par conduction. Quant à la deuxième, il s'agit de la réaction chimique. Les deux physiciens démontrent alors, en considérant comme équivalents le taux de chaleur transféré par conduction dans la flamme et la quantité de chaleur évacuée par les gaz brûlés, la propagation de la flamme est contrôlée par la propagation de la chaleur à travers le gaz. Mallard et Le Chatelier (1885) ont fait l'hypothèse que les deux zones de la flamme sont séparées par le point où se produit l'inflammation, la température d'inflammation étant malheureusement inconnue figure.V.5.

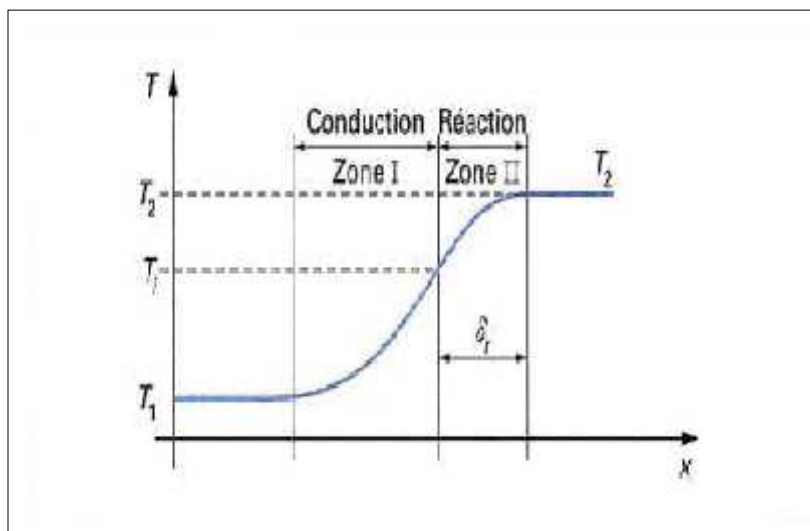


Fig.V.5 : propagation de la chaleur suivant la théorie de Mallard et Le Chatelier

T_i : température d'inflammation

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

$$\frac{dT}{dx} \approx \frac{T_2 - T_i}{u_r}$$

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

$$\dot{m}.C_p(T_i - T_1) = \lambda \frac{T_2 - T_i}{u_r}$$

avec λ } conductivité thermique
 \dot{m} débit-masse par unité de surface à travers l'onde de combustion

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

$$\dots \cdot S_l C_p (T_i - T_1) = \frac{T_2 - T_i}{u_r}$$

$$S_l = \frac{\lambda (T_2 - T_1)}{\dots C_p (T_i - T_1) u_r} \quad (V. 10)$$

Avec

λ : Conductivité thermique

S_l : propagation de la flamme

\dots : masse volumique du mélange frais

Sous cette forme, l'équation (V. 10) contient la température d'inflammation et l'épaisseur de réaction qui sont inconnues. Cette température d'inflammation n'est en aucune façon liée à la température d'inflammation spontanée. En effet, le temps d'induction est ici beaucoup plus court que dans le cas d'inflammation spontanée et les centres actifs de réaction ne sont pas produits à l'intérieur des gaz frais mais proviennent des gaz brûlés ou de la zone de réaction vive par diffusion de matière. L'onde se déplaçant à la vitesse S_l , on a :

$$u_r = S_l \dagger_c \quad (V.11)$$

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

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

$$\bar{S} = \frac{1}{T_2 - T_1} \int_{T_1}^{T_2} \check{S} dT \quad (V.12)$$

$$\dagger_c \propto \frac{1}{\bar{S}}$$

$$S_l \propto \frac{\lambda}{\dots C_p} \frac{T_2 - T_i}{T_i - T_1} \frac{\bar{S}}{S_l}$$

Et enfin :

$$S_l \propto \sqrt{\frac{\lambda}{\dots C_p} \bar{S}} \quad \text{ou} \quad S_l \propto (D_T \bar{S})^{1/2} \quad (V. 13)$$

D_T : diffusivité thermique.

T_i : représente la température d'auto inflammation

Cette méthode, en l'absence de connaissance de la température d'inflammation ne permet pas d'obtenir de valeur théorique acceptable pour la vitesse de propagation de la flamme. Cependant, ce raisonnement très simple conduit aux deux caractéristiques essentielles de la vitesse de propagation d'une onde laminaire, la diffusion (ici de chaleur) a pour conséquence la propagation de la flamme. Et comme Mallard et Le Chatelier n'ont pas spécifié la température spécifique à laquelle le taux de réaction doit être déterminé. Leur analyse suggère que la vitesse de flamme est proportionnelle à la racine carrée du produit de la diffusivité thermique et du taux de réaction. Ce résultat est l'une des plus

importantes relations dans la théorie des flammes laminaires et peut être considéré comme représentatif de la flamme laminaire dont l'épaisseur est très faible.

V.4.1.2 Théorie de Zeldovitch, Franck-Kameneskii et Semenov :

C'est une extension de modèle ancien de Mallard et Le Châtelier. Les équations de base comportent les diffusions de chaleur et de matière, cette dernière étant considérée en tant que vecteur d'énergie, mais non facteur d'activation des réactions chimiques. La température d'inflammation intervient encore, mais comme simple condition aux limites des deux parties du problème figure.V.6.

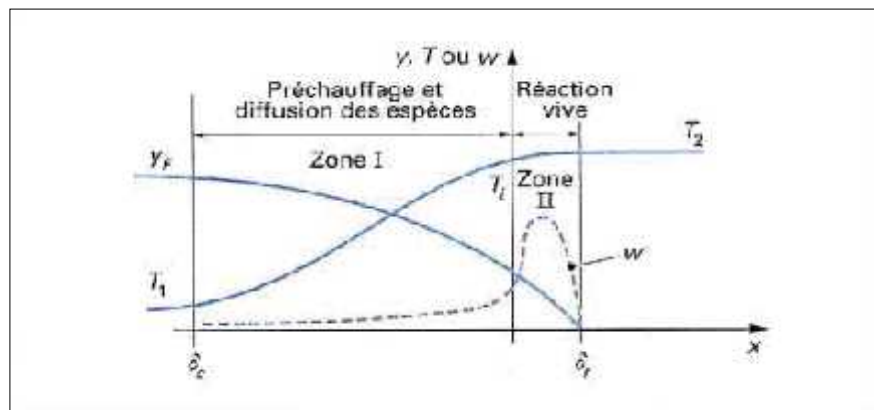


Fig.V.6: Structure du front de flamme

V.4.1.2.1 Hypothèses simplificatrices

1- Pression constante.

2- On considère un gaz au repos ou les caractéristiques thermiques (ρ, Cp, \dots, D_{ij}) sont constants quelles que soient la température et la composition du mélange on peut prendre des valeurs moyennes de ces caractéristiques (ρ, Cp, \dots, D_{ij}) entre les deux températures limites T_1 et T_2

3- Le nombre de Lewis $Le = 1$, soit

$$D_T = \frac{\lambda}{\rho C_p} = D_{ij}$$

- $L_e = \frac{D_T}{D_{ij}}$: qui compare le transport de masse par diffusion au transport thermique.

4- le nombre total de moles du mélange ne change pas avec la combustion

5- On considère, suivant le modèle de la réaction simple, une réaction d'ordre global n , d'enthalpie massique $\Delta h^0 = h_1^0 - h_2^0$ et dont le taux de réaction suit une loi d'Arrhenius :

$$\dot{S} = A(T) P^i Y_O^{i-j} Y_F^j \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) \quad (\text{V.14})$$

Avec

$A(T)$ facteur préexponentiel de la loi d'Arrhenius.

E_a énergie d'activation.

Y_F fraction massique du combustible.

Y_O fraction massique de l'oxygène.

i ordre globale de la réaction

j ordre partiel de la réaction..

V.4.1.2.2 Equations de bilan :

Bilan des espèces :

La composition est caractérisée par la fraction massique du combustible :

$$V \frac{\partial Y_F}{\partial x} - D_{ij} \frac{\partial^2 Y_F}{\partial x^2} = - \frac{\dot{S}}{\dots} (Y_O, Y_F, T, X) \quad (\text{V.15})$$

Convection Diffusion Réaction chimique

Bilan d'énergie :

$$V \frac{\partial T}{\partial x} - D_T \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = + \frac{\Delta h^0}{C_p} \frac{\dot{S}}{\dots} (Y_O, Y_F, T, X) \quad (\text{V.16})$$

Convection Diffusion Réaction chimique

V.4.1.2.3 Déterminations de la vitesse de flamme :

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

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

Avec à $t = 0$: $T = T_1$, $Y_{F_1} = Y_F$

En fin de combustion :

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

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

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

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

$$\frac{\partial T}{\partial t} - \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = + \frac{\Delta h^0 \dot{\xi}}{C_p} \quad (\text{V.17})$$

Avec :

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

En zone I, il n'y a pas de réaction chimique. Donc le terme de taux de réaction, est négligeable

L'équation devient :

$$\left. \frac{\partial T}{\partial t} - \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = 0 \right\} \quad (\text{V.18})$$

Comme alors : $\frac{\partial x}{\partial t} = v$

$$v \frac{\partial T}{\partial x} - \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = 0$$

Et, avec $v = \dot{m}$

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} - \frac{\dot{m} C_p}{v} \frac{\partial T}{\partial x} = 0 \quad (\text{V.19})$$

Avec comme conditions aux limites :

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

$$X = 0, \quad T = T_i$$

On obtient en intégrant :

$$\frac{\partial T}{\partial x} = \frac{\dot{m} C_p}{v} (T_i - T_1) \quad (\text{V.20})$$

$$\ln \frac{T - T_1}{T_i - T_1} = \frac{\dot{m} C_p}{v} x$$

$$\frac{T - T_1}{T_i - T_1} = \exp\left(\frac{\dot{m} C_p}{v} x\right) \quad (\text{V.21})$$

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

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

$$\left. \begin{aligned} \} \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} &= -\frac{\Delta h^0}{C_p} \xi \\ \} \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} &= -\Delta h^0 \xi \end{aligned} \right\} \quad (\text{V.22})$$

avec :

$$\text{Pour } x = 0, T = T_i$$

$$\text{Pour } x = u_r, T = T_2$$

u_r : Epaisseur de la zone de réaction vive.

Pour intégrer (V.22), multiplions-la par le gradient de température : $\frac{\partial T}{\partial x}$

$$\left. \begin{aligned} \} \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \frac{\partial T}{\partial x} &= -\Delta h^0 \xi \frac{\partial T}{\partial x} \\ \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x} \left[\left(\frac{\partial T}{\partial x} \right)^2 \right] &= -\frac{\Delta h^0}{\xi} \xi \frac{\partial T}{\partial x} \\ \left[\left(\frac{\partial T}{\partial x} \right)^2 \right]_0^{u_r} &= -\frac{2\Delta h^0}{\xi} \int_{T_i}^{T_2} \xi dT \\ \text{pour } x = u_r, \frac{\partial T}{\partial x} &= 0 \quad \text{d'où} \\ \left(\frac{\partial T}{\partial x} \right)_{x=0}^2 &= \frac{2\Delta h^0}{\xi} \int_{T_i}^{T_2} \xi dT \end{aligned} \right\} \quad (\text{V.23})$$

A la limite entre les deux zones de préchauffage (I) et de réaction vive (II) figure.V.6, la continuité du flux de chaleur s'écrit :

$$\left(\} \frac{\partial T}{\partial x} \right)_{x=0;1} = \left(\} \frac{\partial T}{\partial x} \right)_{x=0;2}$$

et, d'après (V.19) :

$$\left(\} \frac{\partial T}{\partial x} \right)_{x=0;1} = \dot{m} C_p (T_i - T_1)$$

D'où on tire

$$\frac{\dot{m}C_p}{\rho}(T_i - T_1) = \left(\frac{2\Delta h^0}{\rho} \int_{T_1}^{T_2} \bar{\xi} dT \right)^{1/2}$$

Comme $\dot{m} = \rho S_l$

$$S_l = \frac{\rho}{\rho} \frac{1}{C_p(T_i - T_1)} \left(\frac{2\Delta h^0}{\rho} \int_{T_1}^{T_2} \bar{\xi} dT \right)^{1/2} \quad (\text{V.24})$$

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

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

$$\int_{T_1}^{T_2} \bar{\xi} dT \approx \int_{T_1}^{T_2} \bar{\xi} dT$$

En conséquence, on peut écrire :

$$S_l = \left(\frac{C_p \Delta h^0 \bar{\xi}}{\rho^2 C_p^2 (T_2 - T_1)} \right)^{1/2} \quad (\text{V.25})$$

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

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

L'expression (V.25) montre que la vitesse de la flamme dépend de la température finale de combustion et l'augmentation de la température initiale n'a d'influence qu'à travers l'augmentation correspondante de la température de combustion. La différence essentielle avec la théorie de Mallard et Le Chatelier est que, le taux de réaction étant fonction de la température de flamme, il en est de même pour la vitesse de flamme.

V.4.1.3 Théorie de Zeldevitch amélioré :

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

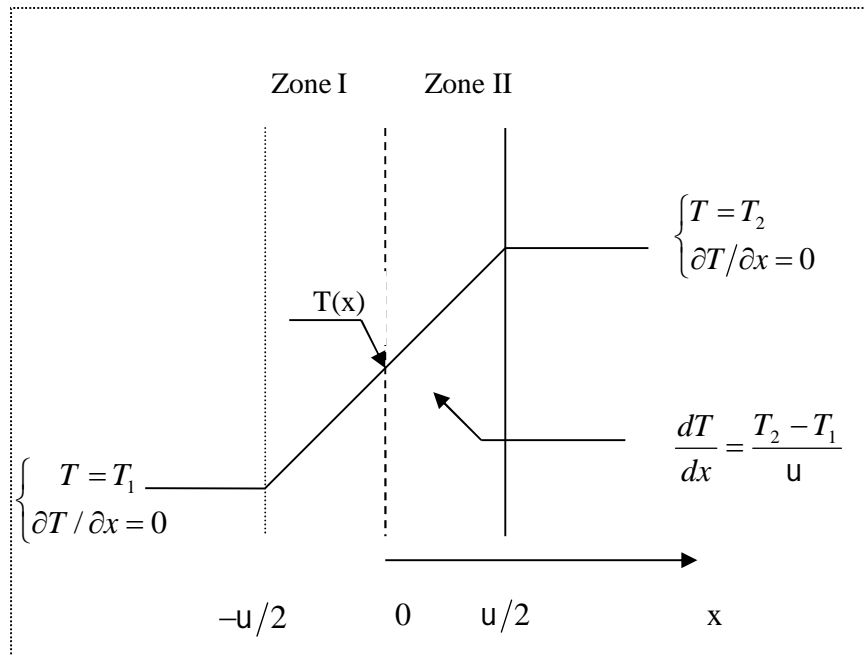


Fig.V.7 : Structure de front de flamme

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

V.4.2 Théorie diffusionnelle : [5]

Elle est en particulier due à Tanford et Pease (1947), qui ont supposée que, pour certaine réaction en flamme laminaire, la vitesse de la flamme est liée au taux de diffusion de radicaux actifs dans les gaz frais. Pour donner une description élémentaire de ce type de théorie, nous allons supposer que le seul facteur influençant la flamme laminaire est l'effet de diffusion vers les gaz frais des radicaux libres présents dans le front de flamme est caractérisé par une concentration moyenne X_R en radicaux libres et une température moyenne T_m homogène figure V.8.

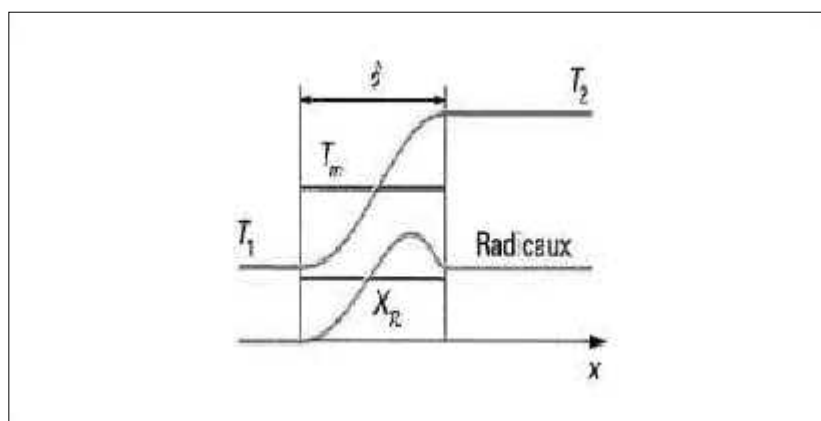


Fig.V.8 : Propagation de la flamme suivant la théorie diffusionnelle

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

$$Z_u (Q_{ram} - Q_{rup}) = 1$$

Z : étant le nombre de collision par seconde.

$$Z = \frac{c}{l} = \frac{\text{(Vitesse moyenne d'agitation des molécules)}}{\text{(Libre parcours moyen des molécules)}}$$

On doit avoir : $Z_u = Z \dagger_u$

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

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

Soit ici :

$$\dagger_u = \frac{u^2}{2D_{ij}}$$

On a donc :

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

On peut introduire les vitesses de ramification et de rupture :

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

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

D'où la relation de stationnaire :

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

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

$$\dagger_u = \frac{u^2}{2D_{ij}} = \frac{u}{S_l}$$

D'où :

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

L'équation stationnaire s'écrit alors :

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

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

V_{ram} : vitesse de ramification

V_{rup} : vitesse de rupture

X_R : concentration des radicaux libres

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

V.5 Approches récentes :[5]

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

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

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

$$\Delta T = \frac{W_2}{\left(\frac{dW_2}{dT} \right)} = \frac{RT_2^2}{Ea} \quad (\text{V.26})$$

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

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

$$\frac{\Delta T}{T_2 - T_1} = \frac{u_r}{u_c} = \frac{RT_2^2}{Ea(T_2 - T_1)} = S^{-1} \quad (\text{V.27})$$

s : le nombre de Zeldovitch définit l'importance relative des deux paramètres :

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

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

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

Si on définit une température réduite :

$$" = \frac{T - T_1}{T_2 - T_1} \quad (\text{V.28})$$

On peut écrire :

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

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

V.6 Autres approches :

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



Chapitre

VI

Modélisation de la flamme de prémélange

Le cas élémentaire d'une flamme laminaire unidimensionnelle qui se propage dans un milieu gazeux prémélangé (un combustible mélange avec l'air par exemple) est un problème de base dans la combustion, que ce soit pour la théorie ou bien la résolution par les méthodes numériques. De point de vue ce dernier, la flamme laminaire est un premier pas vers une configuration plus complexe. Il y a beaucoup de façons pour calculer la structure d'une flamme laminaire selon la complexité chimique et la description du transport. Cependant, quand la chimie et le transport sont simplifiés convenablement, les solutions analytiques ou semi - analytiques peuvent être développées et ceux-ci est une lumière essentielle sur le comportement des flammes, les défis numériques font face quand on essaient de les calculés dans les situations simples ou complexes.

VI.1 Objectif de la modélisation : [4]

Le premier objectif de la modélisation est de reproduire des résultats expérimentaux à partir d'un mécanisme chimique postulé au préalable. Suivant que les données cinétiques à modéliser, La comparaison entre les résultats issus de la modélisation et les mesures expérimentales permet de tester le mécanisme postulé dans des conditions expérimentales bien définies. Lorsque l'accord modélisation et expérience est satisfaisant, le mécanisme est alors validé.

La modélisation peut donc intervenir à différents niveaux :

Estimation d'une chaleur de réaction, calcul d'une vitesse de propagation de flamme, détermination des profils d'évolution des espèces présentes dans le milieu réactif, ... Dans le cas de l'étude des flammes prémélangées (Figure.VI.1), l'objectif est d'estimer l'évolution de la concentration des espèces moléculaires et réactives .

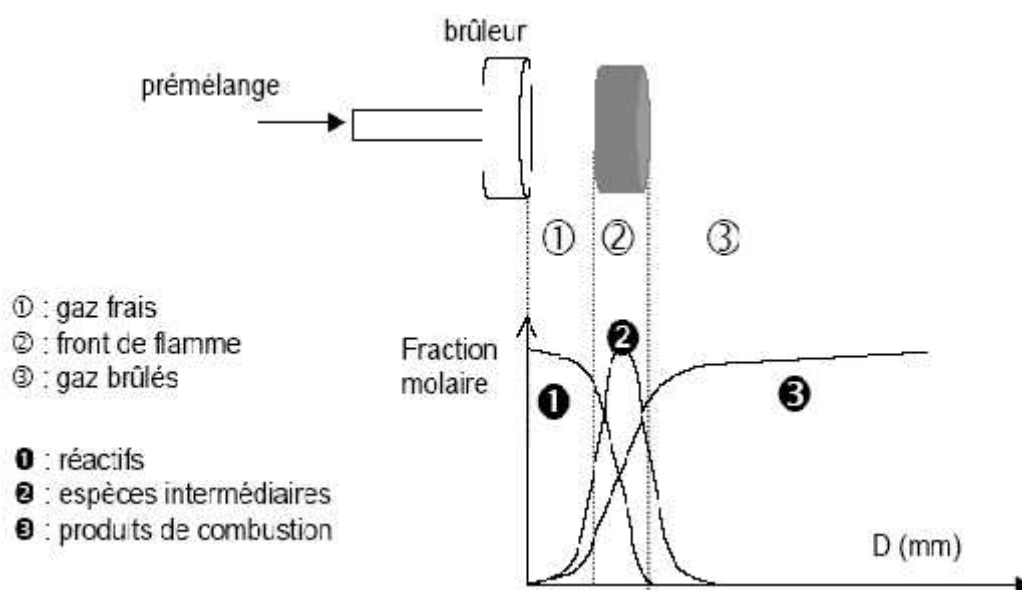


Fig.VI.1 Structure schématique d'une flamme plate de prémélange.

VI.2 Hypothèses adoptées :

- 1– Ecoulement monodimensionnel instationnaire.
- 2– les forces des viscosités et les radiations sont négligeables, ainsi que l'énergie cinétique et potentielle
- 3– Nombre de Lewis et le coefficient de diffusion thermique sont constant et égal à l'unité.
- 4– la diffusion thermique et massique est gérée par les lois de Fourier et Ficks respectivement.
- 5– le taux d'avancement de la réaction chimique suit l'analyse asymptotique de la flamme d'air stoechiométrique.
- 6– le nombre de Zeldovitch quantité variable voisine de 10
- 7– nombre de Prandtl fixe
- 8– la combustion est adiabatique avec dissociation limitée à la production d'hydrogène et monoxyde de carbone

VI.3 Solution théorique de la flamme de prémélange : [3]

VI.3.1 Les équations de bilan :

Pour étudier la propagation unidimensionnelle d'une flamme laminaire prémélangée dans un milieu gazeux monodimensionnel instationnaire, on utilise un modèle basé sur la théorie de Zeldovitch, Frank-kamenetskii avec des équations de conservation de masse, d'espèces et d'énergie sur un volume de contrôle infinitésimal illustré sur la figure ci-dessous :

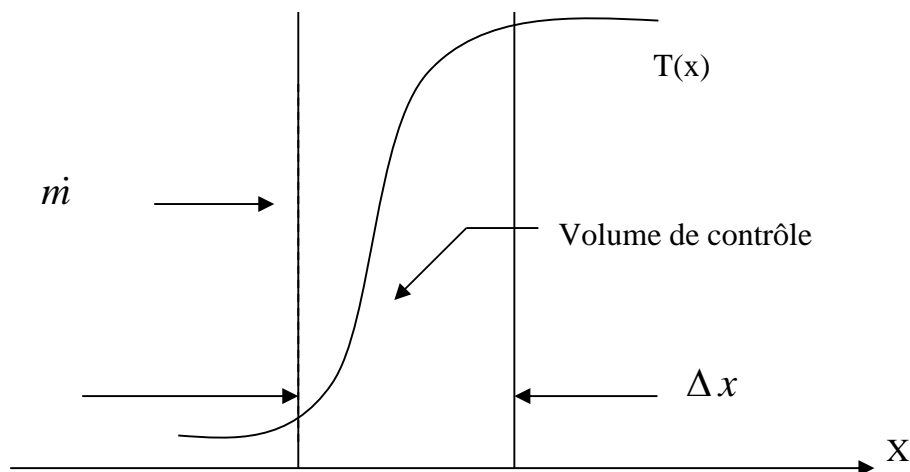


Fig.VI.2: volume de contrôle

Les simplifications exigées pour développer des solutions analytiques simples pour les flammes sont :

- Toutes les espèces ont le même poids moléculaire : $w = w_K$.
- La même chaleur spécifique massique à pression constante : $C_p = C_{p_K}$.
- Ils ont aussi le même coefficient de la diffusion moléculaire : $D = D_K$.
- Les nombres de Lewis sont égaux.

VI.3.2 Les équations de bilan simplifiés :

Les équations étudiées dans le chapitre IV ont une forme générale, pour cela elle seront simplifiées dans le régime instationnaire au cas monodimensionnelle avec l'apparition des nombres adimensionnels :

VI.3.2.1 Equations des espèces :

La diffusivité moléculaires s'écrit :

$$Le = \frac{D_T}{D}$$

D'où :

$$D = \frac{D_T}{Le} = \frac{\}}{...Cp} \frac{1}{Le} \tag{VI.1}$$

D'après l'équation (IV.19), l'équation des espèces est:

$$\dots \frac{\partial Y_k}{\partial t} + \dots \nabla(Y_k V) = \nabla(\dots D \nabla Y_k) - M\check{S}(\dots, Y, T)$$

Y_k : concentration des espèces.

Devisant cette équation par sa masse volumique on a :

$$\frac{\partial Y_k}{\partial t} + \nabla(Y_k V) = \nabla(D \nabla Y_k) - \frac{M\check{S}(\dots, Y, T)}{\dots} \tag{VI.2}$$

On remplace l'expression de la diffusivité moléculaire dans l'équation (VI.2) d'où :

$$\frac{\partial Y_k}{\partial t} + \nabla(Y_k V) = \nabla\left(\frac{\}}{...Cp} \frac{1}{Le} \nabla Y_k\right) - \frac{M\check{S}(\dots, Y, T)}{\dots}$$

Alors :

$$\frac{\partial Y_k}{\partial t} = -\nabla(Y_k V) + \frac{1}{...Le} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\}}{Cp} \frac{\partial Y_k}{\partial x} \right) - \frac{M\check{S}(\dots, Y, T)}{\dots}$$

En ajoutant le même terme dans les deux membres de l'équation :

$$\frac{\partial Y_k}{\partial t} - \frac{1}{Le} D_T \frac{\partial^2 Y_k}{\partial x^2} = -\frac{\partial(Y_k \cdot V)}{\partial x} + \frac{1}{...Le} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\}}{Cp} \frac{\partial Y_k}{\partial x} \right) - M\check{S}(Y, T) - \frac{1}{Le} D_T \frac{\partial^2 Y}{\partial x^2}$$

Pour conséquent l'équation de conservation des espèces s'écrit sous la forme :

$$\frac{\partial Y_k}{\partial t} - \frac{1}{Le} D_T \frac{\partial^2 Y_k}{\partial x^2} = \frac{1}{\dots Le} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\}}{cp} \frac{\partial Y_k}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{Le} D_T \frac{\partial Y_k}{\partial x} + Y_k \cdot V \right) - M \check{S}(Y, T) \quad (VI.3)$$

VI.3.2.2 Equation de l'énergie :

En procédant de façon similaire pour l'équation de conservation d'espèce. On divise l'équation de l'énergie (IV.22) par $\dots Cp$, on obtient :

$$\frac{\partial T}{\partial t} + V \nabla(T) = M \frac{Q}{Cp} \check{S}(Y, T) + \frac{1}{\dots} \nabla \left(\frac{\}}{Cp} \nabla T \right)$$

La diffusivité thermique est donnée par :

$$D_T = \frac{\}}{\dots Cp} \quad (VI.4)$$

En remplaçant l'expression de la diffusivité thermique dans l'équation précédente et on réarrangeant les termes, on aura :

$$\frac{\partial T}{\partial t} - D_T \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = -V \frac{\partial T}{\partial x} + M \frac{Q}{Cp} \check{S}(Y, T) + \frac{1}{\dots} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\}}{Cp} \frac{\partial T}{\partial x} \right) - D_T \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$$

L'équation simplifiée d'énergie dans le cas instationnaire et monodimensionnelle :

$$\frac{\partial T}{\partial t} - D_T \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = \frac{1}{\dots} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\}}{cp} \frac{\partial T}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial x} (D_T \frac{\partial T}{\partial x} + VT) + M \frac{Q}{Cp} \check{S}(Y, T) \quad (VI.5)$$

VI.3.2.3 Equation de quantité de mouvement :

Nous pouvons s'écrire l'équation de quantité de mouvement (IV.24) en négligeant les termes visqueux, on obtient alors :

$$\frac{\partial \dots V_i}{\partial t} + \nabla(\dots V \cdot V_i) = - \frac{\partial P}{\partial x}$$

Le nombre de Prandtl est définie par :

$$Pr = \frac{\sim \cdot Cp}{\}} \quad (VI.6)$$

On introduit (VI.6) l'équation (IV.24) s'écrit :

$$\frac{\partial \dots V}{\partial t} - \text{Pr} \cdot D_T \frac{\partial^2 \dots V}{\partial^2 x} = -\text{Pr} \cdot D_T \frac{\partial^2 \dots V}{\partial^2 x} - \frac{\partial \dots V \cdot V}{\partial x} - \frac{\partial P}{\partial x}$$

Finalement on trouve :

$$\frac{\partial \dots V}{\partial t} - \text{Pr} \cdot D_T \frac{\partial^2 \dots V}{\partial^2 x} = \frac{\partial}{\partial x} [-\text{Pr} D_T \frac{\partial \dots V}{\partial x} - \dots V \cdot V] - \frac{\partial P}{\partial x} \quad (\text{VI.7})$$

VI.4 Les équations de bilan en fonction des grandeurs réduites : [2]

Les équations de bilan peuvent être simplifiées en introduisant des grandeurs réduites.

VI.4.1 Les grandeurs réduites :

– La fraction massique réduite :

La fraction massique réduite est adimensionnée en conduisant la valeur initiale dans le mélange réactif.

$$Y_{k_re} = \frac{Y_k}{Y_k^1} \quad (\text{VI.8})$$

Y_k^1 : fraction massique initial du gaz frais (réactifs)

La fraction massique réduite du combustible et l'oxydant atteint le nombre : un, dans les gaz frais et zéro dans les gaz brûlés.

– Température réduite :

La température réduite de la flamme est dépend de celle du gaz frais, du gaz brûlé et la température pour chaque point du front, elle est exprimée par :

$$" = \frac{Cp(T - T_1)}{QY_k^1} = \frac{T - T_1}{T_2 - T_1} \quad (\text{VI.9})$$

Ainsi la température réduite varie de zéro dans les gaz frais et atteinte un pour les gaz brûlés.

– Le coefficient d'expansion :

Il est défini par :

$$r = \frac{QY_k^1}{CpT_2} = \frac{T_2 - T_1}{T_2} \quad (\text{VI.10})$$

T_2 : température adiabatique de flamme

T_1 : température du gaz frais

– **Le nombre de Zeldovitch :**

On définit le nombre de Zeldovitch par l'expression :

$$Ze = \frac{T_A(T_2 - T_1)}{T_2^2} \quad (\text{VI.11})$$

T_A : température d'activation

– **La masse volumique adimensionnelle :**

La variation de la masse volumique est en fonction de la température réduite θ est de la manière suivante :

$$\rho = 1.16 \frac{1}{1 + \gamma \theta / (1 - \theta)} \quad (\text{VI.12})$$

On suppose de plus que $Le = 1$, soit :

$$D_T = \frac{\lambda}{\rho C_p} = D \quad (\text{VI.13})$$

Par hypothèse la diffusivité thermique D_T égale à l'unité.

Lors de variation de la masse volumique engendre une variation de terme $\frac{\lambda}{C_p}$ à cause de lien entre les deux grandeurs par le nombre de Lewis :

$$D = D_T = \frac{\lambda}{\rho C_p}$$

Donc l'équation de second membre des équations des espèces et de température devient

$$\frac{\lambda}{C_p} = \dots \quad (\text{VI.14})$$

– **Le taux de réaction adimensionné :**

Pour pouvoir résoudre les équations d'une flamme gazeuse de prémélange, on propose un modèle du taux de réaction qui est :

$$\tilde{S}(Y, T, Ze, T_2, T_1) = F(Tb) * Y_F * Y_O * \exp \left[-Ze * \frac{(1 - r)}{1 + \frac{T_2 - T_1}{T_2} * (r - 1)} \right]$$

Le modèle proposé considère que le taux de réaction est fonction de la température réduite :

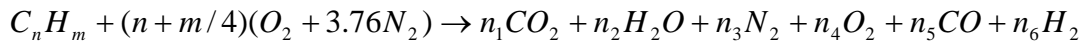
$$\tilde{S}(Y, T, Ze, r) = F(Tb) * Y_F * Y_O * \exp \left[-Ze * \frac{(1 - r)}{1 + r * (r - 1)} \right] \quad (VI.15)$$

Avec le coefficient $F(Tb)$ empirique.

$$F(Tb) = 0.25 * Ze^3 * Le^{-2} * (1.06 / (1 - r))^2 / Y_{o_fuel_air_stoch} \quad (VI.16)$$

$Y_{o_fuel_air_stoch}$: fraction massique de l'oxydant dans le cas stoechiométrique

La combustion complète d'un hydrocarbure s'écrit :



par définition les taux de production massiques sont :

$$W_T = \frac{1}{Y_{comb}} \quad (VI.17)$$

Y_{comb} : fraction massique du combustible stoechiométrique.

$$W_F = -\frac{m(C_n H_m)}{m(C_n H_m)} = -1 \quad (VI.18)$$

$$W_T = -\frac{m(O_2)}{m(C_n H_m)} \quad (VI.19)$$

$$W_P = \frac{m(CO_2) + m(H_2O) + m(CO) + m(H_2)}{m(C_n H_m)} \quad (VI.20)$$

m : masse des espèces.

VI.4.2 Les équations de flamme en grandeurs réduites :

VI.4.2.1 Conservation d'énergie

L'équation de l'énergie en fonction de la température réduite est :

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} - D_T \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} = \frac{1}{\dots} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \theta}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial x} (D_T \frac{\partial \theta}{\partial x} + V_{\theta}) + \frac{W_k \cdot \check{S}(\theta, Z_{e,\theta}, r)}{Y_k^1} \quad (\text{VI.21})$$

Les conditions aux limites pour la température réduite du mélange sont :

$$x=0 \text{ Condition.de.Dirichlet.} \theta(x \rightarrow 0) = 0$$

$$x=u \text{ Condition.de.Neumann} \frac{d\theta}{dx}(x \rightarrow u) = 0$$

VI.4.2.2 Conservation des espèces :

Les équations de bilan de masse des espèces s'écrivent :

Combustible :

$$\frac{\partial Y_{F-re}}{\partial t} - \frac{1}{Le} D_T \frac{\partial^2 Y_{F-re}}{\partial x^2} = \frac{1}{Le} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial Y_{F-re}}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{Le} D_T \frac{\partial Y_{F-re}}{\partial x} + V Y_{F-re} \right) - W_F \cdot \check{S}(\theta, Z_{e,\theta}, r) \quad (\text{VI.22})$$

Oxydant :

$$\frac{\partial Y_{O-re}}{\partial t} - \frac{1}{Le} D_T \frac{\partial^2 Y_{O-re}}{\partial x^2} = \frac{1}{Le} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial Y_{O-re}}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{Le} D_T \frac{\partial Y_{O-re}}{\partial x} + V Y_{O-re} \right) - W_O \cdot \check{S}(\theta, Z_{e,\theta}, r) \quad (\text{VI.23})$$

Avec les conditions aux limites des espèces (combustible et oxydant) :

$$x=0 \text{ Condition.de.Dirichlet.} Y_{k-re}(x \rightarrow 0) = 1$$

$$x=u \text{ Condition.de.Neumann} \frac{dY_{k-re}}{dx}(x \rightarrow u) = 0$$

Produit :

$$\frac{\partial Y_{p_re}}{\partial t} - \frac{1}{Le} D_T \frac{\partial^2 Y_{p_re}}{\partial x^2} = \frac{1}{Le} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial Y_{p_re}}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{Le} D_T \frac{\partial Y_{p_re}}{\partial x} + V Y_{p_re} \right) - W_p \check{S}(Y, u, Z, \tau) \quad (VI.24)$$

Avec les conditions aux limites du produit :

$$x=0 \text{ Condition.de.Dirichlet.} Y_{p_re}(x \rightarrow 0) = 0$$

$$x=u \text{ Condition.de.Neumann} \frac{dY_{p_re}}{dx}(x \rightarrow u) = 0$$

VI.4.2.3 Conservation de quantité de mouvement :

L'équation de bilan de la quantité de mouvement du mélange s'écrit :

$$\frac{\partial \dots V}{\partial t} - Pr.D_T \frac{\partial^2 \dots V}{\partial x^2} = \frac{\partial}{\partial x} [-Pr \frac{\partial V}{\partial x} - \dots VV] - \frac{\partial P}{\partial x} \quad (VI.25)$$

La pression a une très petite variation le long du front de flamme, donc :

$$P = \dots r.T = cte \quad (VI.26)$$

Avec les conditions aux limites suivantes :

$$x=0 \text{ condition.de.Dirichlet.} V(x \rightarrow 0) = 0$$

$$x=u \text{ condition.de.Neumann} \frac{dV}{dx}(x \rightarrow u) = 0$$

VI.5 Propriété de la flamme de prémélange :

Pour exprimer les équations de bilan pour une flamme de prémélange laminaire sous une forme adimensionnelle, nous introduisons :

$$\frac{\partial u}{\partial t} - D_T \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{1}{\dots} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial x} \left(D_T \frac{\partial u}{\partial x} + V \dots \right) + \frac{M \check{S}(Y, u)}{Y_k^1} \quad (VI.27)$$

des quantités référentielles et les nombres caractéristiques tel que le nombre de Lewis est :

$$\frac{\partial Y_{k_re}}{\partial t} - \frac{1}{Le} D_T \frac{\partial^2 Y_{k_re}}{\partial x^2} = \frac{1}{\dots} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial Y_{k_re}}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{Le} D_T \frac{\partial Y_{k_re}}{\partial x} + V.Y_{k_re} \right) - \frac{M \check{S}(Y, T)}{Y_k^1} \quad (VI.28)$$

Additionner ces deux équations (VI.27) et (VI.28):

$$\frac{\partial(Y_{k_{re}} + Y_n)}{\partial t} - \frac{1}{Le} D_T \frac{\partial^2(Y_{k_{re}} + Y_n)}{\partial x^2} = \frac{1}{cp} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial(Y_{k_{re}} + Y_n)}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{Le} D_T \frac{\partial(Y_{k_{re}} + Y_n)}{\partial x} + V.(Y_{k_{re}} + Y_n) \right) \quad (VI.29)$$

C'est une équation scalaire conservé (passif) sans terme source avec $Y_n + Y_{k_{re}}$ dans les gaz frais égale a 1 et même dans les gaz brûlés. La solution unique de cette équation (VI.29) est :

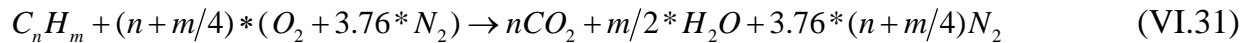
$$Y_n + Y_{k_{re}} = 1 \quad (VI.30)$$

Cette propriété spécifique de la flamme de prémélange peut aussi être dérivée en supposant que l'enthalpie total de mélange est constant partout. La température et les fractions massiques ne sont pas des quantités indépendantes, quand les fractions massique décroît (l'enthalpie de réaction diminue), pour une augmentations de température (L'enthalpie sensible augmente). Au point de vue numérique, seulement une variable peut être résolue. L'autre est obtenue de équation (VI.30).

VI.6 Calcul des fractions massiques initiales et finales de combustion : [7]

A- Equation de combustion complète :

Pour hydrocarbure l'équation de réaction chimique est :



- Les fractions massiques des réactifs et des produits :

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

On regroupe les produits de combustion ($CO_2 + H_2O$) dans une seule variable Y_p^k

- La masse totale de mélange des réactifs est :

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

Réactifs :

La fraction massique de l'hydrocarbure est :

$$Y_F^1 = \frac{12n + m}{mtr}$$

La fraction massique de l'oxygène s'écrit :

$$Y_O^1 = (n + \frac{m}{4}) \frac{32}{mtr}$$

La fraction massique de azote donnée par :

$$Y_{N_2}^1 = 3.76(n + \frac{m}{4}) \frac{28}{mtr}$$

La fraction massique des produits :

$$Y_P^1 = 0$$

Produit:

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

La fraction massique de l'hydrocarbure est :

$$Y_F^2 = 0$$

La fraction massique de l'oxygène est :

$$Y_O^2 = 0$$

La fraction massique de azote est :

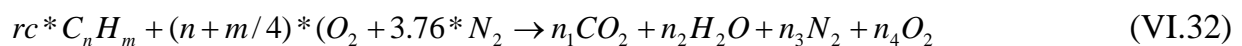
$$Y_{N_2}^2 = 3.76(n + \frac{m}{4}) \frac{28}{mtp}$$

La fraction massique des produits est :

$$Y_P^2 = \frac{44n}{mtp} + \frac{(m/2)18}{mtp}$$

B – mélange pauvre (rc<1) :

L'équation de réaction chimique s'écrit :



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

$$as=(n+m/4)$$

$$\text{nombre de mole de CO}_2: n_1=n$$

$$\text{nombre de mole de H}_2\text{O}: n_2=m/2$$

$$\text{nombre de mole de N}_2 : n_3=3.76*as/rc$$

$$\text{nombre de mole de O}_2 : n_4=as*(1/rc-1)$$

$$\text{nombre de mole de CO} : n_5=0$$

$$\text{nombre de mole de H}_2 : n_6=0$$

Masse totale des produits:

$$mtp = 44.*n_1+18.*n_2+n_3*28.+n_4*32.+n_5*28.+n_6*2. \quad (\text{g/mole})$$

Les fraction massiques

$$Y_{CO_2}^2 = n_1 * 44 / mtp$$

$$Y_{H_2O}^2 = n_2 * 18 / mtp$$

$$Y_{N_2}^2 = n_3 * 28 / mtp$$

$$Y_{O_2}^2 = n_4 * 32 / mtp$$

$$Y_{CO}^2 = n_5 * 28 / mtp$$

$$Y_{H_2}^2 = n_6 * 2 / mtp$$

$$\text{Produits} = Y_{CO_2}^2 + Y_{H_2O}^2 + Y_{H_2}^2 + Y_{CO}^2$$

La fraction massique de l'hydrocarbure est :

$$Y_F^2 = 0$$

La fraction massique de l'oxygène est :

$$Y_{O_2}^2 = (n + \frac{m}{4}) (\frac{1}{rc} - 1) \frac{32}{mtp}$$

La fraction massique de azote est :

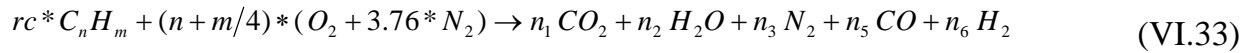
$$Y_{N_2}^2 = 3.76 (n + \frac{m}{4}) \frac{1}{rc} \frac{28}{mtp}$$

La fraction massique des produits est :

$$Y_P^2 = Y_{CO_2}^2 + Y_{H_2O}^2 + Y_{H_2}^2 + Y_{CO}^2$$

C- mélange riche (rc>1) :

L'équation de combustion alors devient :



L'équation de l'équilibre de la réaction de dissociation :



La constante d'équilibre s'écrit :

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

L'évolution de la température :

$$400 < T < 3200 \text{ (°K)}$$

La constante d'équilibre est :

Par conséquent le constante d'équilibre est met sous la forme :

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

$$as = (n + m/4)$$

$$a1 = 1 - kp$$

$$d1 = 2 * as * (1 - 1/rc)$$

$$b1 = m/2 + kp * n - d1 * (1 - kp)$$

$$c1 = -n * d1 * kp$$

$$\text{Nombre de mole de CO : } n5 = \frac{-b1 + \sqrt{b1^2 - 4 \cdot a1 \cdot c1}}{2a1}$$

$$\text{nombre de mole de CO2 : } n1 = n - n5$$

$$\text{nombre de mole de H2O : } n2 = m/2 - d1 + n5$$

$$\text{nombre de mole de N2 : } n3 = (3.76 * as) / rc$$

$$\text{nombre de mole de O2 : } n4 = 0$$

$$\text{nombre de mole de H2 : } n6 = d1 - n5$$

Masse totale des produits:

$$mtp = 44 * n1 + 18 * n2 + n3 * 28 + n4 * 32 + n5 * 28 + n6 * 2$$

Les fraction massiques:

$$Y_{CO_2}^2 = n1 * 44 / mtp$$

$$Y_{H_2O}^2 = n2 * 18 / mtp$$

$$Y_{N_2}^2 = n3 * 28 / mtp$$

$$Y_{O_2}^2 = n4 * 32 / mtp$$

$$Y_{CO}^2 = n5 * 28 / mtp$$

$$Y_{H_2}^2 = n6 * 2 / mtp$$

$$\text{Produits} = Y_{CO_2}^2 + Y_{H_2O}^2 + Y_{CO}^2 + Y_{H_2}^2$$

La fraction massique de l'hydrocarbure est :

$$Y_F^2 = 0$$

La fraction massique de l'oxygène est :

$$Y_{O_2}^2 = 0$$

La fraction massique de azote est :

$$Y_{N_2}^2 = 3.76 \left(n + \frac{m}{4} \right) \frac{1}{rc} \frac{28}{mtp}$$

La fraction massique des produits est :

$$Y_P^2 = Y_{CO_2}^2 + Y_{H_2O}^2 + Y_{CO}^2 + Y_{H_2}^2$$

VI.7 Détermination de la vitesse de propagation de la flamme et son épaisseur : [3]

Schéma réactif d'un hydrocarbure peut s'écrire:



L'intégration de l'équation (IV.26) de quantité du mouvement suivant l'abscisse :

$$\dot{m} [T]_{T_1}^{T_2} - \frac{\dot{m}}{Cp} \left[\frac{dT}{dx} \right]_{-\infty}^{+\infty} = - \frac{\Delta h_c}{Cp} \int_{-\infty}^{+\infty} \dot{S} dx \quad (\text{VI.34})$$

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

$$\dot{m}(T_2 - T_1) = - \frac{\Delta h_c}{Cp} \int_{-\infty}^{+\infty} \dot{S} dx \quad (\text{VI.35})$$

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

$$\frac{dT}{dx} = \frac{T_2 - T_1}{u} \Rightarrow dx = \frac{u}{T_2 - T_1} dT \quad (\text{VI.36})$$

Avec ce changement de variable l'équation (VII.35) devient :

$$\dot{m}(T_2 - T_1) = - \frac{\Delta h_c}{Cp} \frac{u}{(T_2 - T_1)} \int_{-\infty}^{+\infty} \dot{S} dT \quad (\text{VI.37})$$

Soit

$$\dot{m}(T_2 - T_1) = - \frac{\Delta h_c}{Cp} u \bar{S} dx \quad (\text{VI.38})$$

Avec

$$\bar{S}_F = \frac{1}{(T_2 - T_1)} \int_{T_2}^{T_1} \bar{S}_F dT \quad (VI.39)$$

\bar{S}_F : Taux de réaction moyen de fuel.

L'équation (VI.38) a deux inconnues le débit masse et l'épaisseur, donc elle n'est pas suffisante. Pour résoudre le problème, il est nécessaire de trouver une autre équation.

Cette équation peut être obtenue à partir de l'équation (VI.34) avec les conditions aux limites suivantes :

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

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

Sachant qu'a

$$x = 0, \quad T = \frac{T_1 + T_2}{2} \quad (VI.40)$$

Et

$$\frac{dT}{dx} = \frac{T_2 - T_1}{u} \quad (VI.41)$$

On obtient de l'équation (VI.32) avec la modification des limites précédentes.

$$m \frac{u}{2} - \frac{\dot{Q}}{C_p} = 0 \quad (VI.42)$$

La résolution des équations (VI.38) et (VI.40) simultanément donne :

$$\dot{m} = \left[2 \frac{\dot{Q}}{C_p^2} \frac{(-\Delta h_c)}{(T_2 - T_1)} \bar{S}_F \right]^2 \quad (VI.41)$$

Et

$$u = \frac{2\dot{Q}}{C_p \dot{m}}$$

D'après la définition de la vitesse de flamme (le débit masse par la masse volumique) et la diffusivité thermique et on reconnaît que :

$$\Delta h_c = (\epsilon + 1) Cp(T_2 - T_1)$$

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

$$S_l = \left[-2D_T (\epsilon + 1) \frac{\bar{S}_F}{\dots_1} \right]^{1/2} \tag{VI.42}$$

$$u = \left[\frac{-2\dots_1 D_T}{(\epsilon + 1)\bar{S}_F} \right]^{1/2} \tag{VI.43}$$

L'exprimons de l'épaisseur de la flamme en fonction de la vitesse de propagation est

$$u = \frac{2D_T}{S_l} \tag{VI.44}$$

VI.8 schéma de résolution :

La résolution de l'équation différentielle permet de déterminer l'évolution de la température adimensionnelle d'une flamme dans le cas instationnaire et monodimensionnelle :

$$\frac{\partial_{..}}{\partial t} - D_T \frac{\partial^2_{..}}{\partial x^2} = \frac{1}{\dots} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\}}{Cp} \frac{\partial_{..}}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial x} \left(D_T \frac{\partial_{..}}{\partial x} + V_{..} \right) + \frac{W_{..} \check{S}(Y, Ze_{..}, r)}{Y_k^1}$$

On pose :

$$J_x = -D_T \frac{\partial_{..}}{\partial x} - \frac{1}{\dots} \frac{\}}{Cp} \frac{\partial_{..}}{\partial x} + (D_T \frac{\partial_{..}}{\partial x} + V_{..}) \tag{VI.45}$$

$$J_x = -\frac{1}{\dots} \frac{\}}{Cp} \frac{\partial_{..}}{\partial x} + V_{..}$$

$$S = \frac{W_{..} \check{S}(Y, Ze_{..}, r)}{Y_k^1}$$

Où J_x est le flux total (convection, diffusion), on remplaçant le terme flux et source dans l'équation précédente :

$$\frac{\partial_{..}}{\partial t} + \frac{\partial J_x}{\partial x} = S \tag{VI.46}$$

La discrétisation par la méthode de différence finis, s'écrit :

$$\frac{u_i^{k+1} - u_i^k}{\Delta t} + \frac{J_{i+1}^k - J_i^k}{\Delta x} = S_i$$

$$u_i^{k+1} - u_i^k + \Delta r (J_{i+1}^k - J_i^k) = S_i \Delta t$$

$$u_i^{k+1} = u_i^k + \Delta r (J_{i+1}^k - J_i^k) + S_i \Delta t$$

Avec :

$$\Delta r = \frac{\Delta t}{\Delta x}$$

D'une façon similaire, on discrétise les équations de conservation des espèces et quantité de mouvement pour calculer les fractions massiques.

VI.9 Organigramme :

Les entrées du programme :

n, m : désigne le combustible $C_n H_m$.
 T1 : température du gaz frais.
 Le_O, Le_P, Le_F : les nombres de Lewis.
 Ze : le nombre de Zeldovitch
 Pr : le nombre de Prandtl
 mxp : nombre des pas suivant X
 nombre_t : le nombre du pas du temps.
 eps : critère de convergence

Les termes utilisés dans l'organigramme :

W_T, W_F, W_O, W_P : les taux de productions massiques.
 F(Tb) : coefficient de taux de réaction.
 τ : grandeur d'expansion.
 Raffinage : adaptation dynamique du pas de temps.
 Z : la solution générale des équations.

Remarque :

Pour la solution de l'équation de température, la solution générale décrite dans le programme Z reçoit la valeur réduite u , de la même manière on obtient la solution des autres équations.



Chapitre

VII

Résultats et interprétation

VII Résultats et interprétations :

Après le choix du schéma numérique discuté dans le chapitre précédent. En utilisant les données spécifiques au combustible choisi, on a obtenu les courbes suivantes :

VII.1.Méthane (CH_4) :

On s'est intéressé à la flamme de prémélange dans des conditions standard, à la température ambiante 300K et la pression atmosphérique (0.1 Mpa), avec les nombres de Lewis des espèces égales à l'unité, le nombre de Zeldovitch et Prandtl sont respectivement 10 et 0.71.

La figure obtenue (VII.1) montre l'évolution des fractions massiques à différentes richesses du méthane.

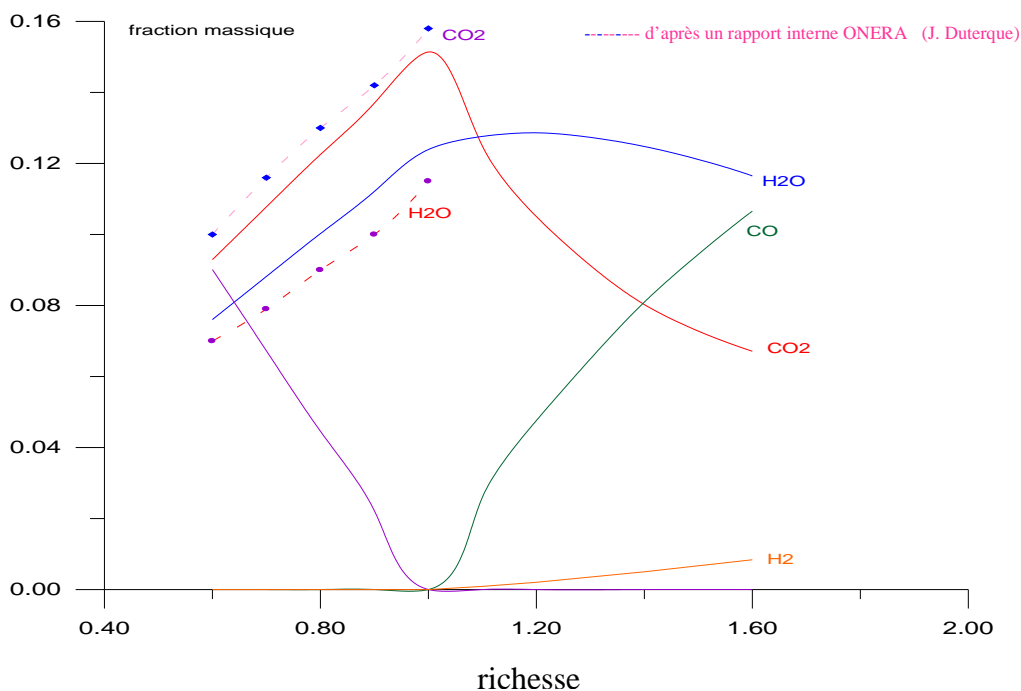


Fig.VII.1 composition de fin de combustion pour des mélanges méthane-air à différentes richesses.

Les produits de combustion sont influés par la nature de mélange dans les réactifs, de telle manière que, si le mélange est pauvre une quantité d'oxygène reste imbrûlé, pour une richesse égale à 0.8 on a environ 5 pourcent d'oxygène dans les produits puis il s'annule pour le cas stoechiométrique et une augmentation de CO_2 atteint une valeur maximale pour une équation de combustion complète.

Dans le cas où le mélange est riche, on constate une apparition de CO , H_2 et une diminution de dioxyde de carbone.

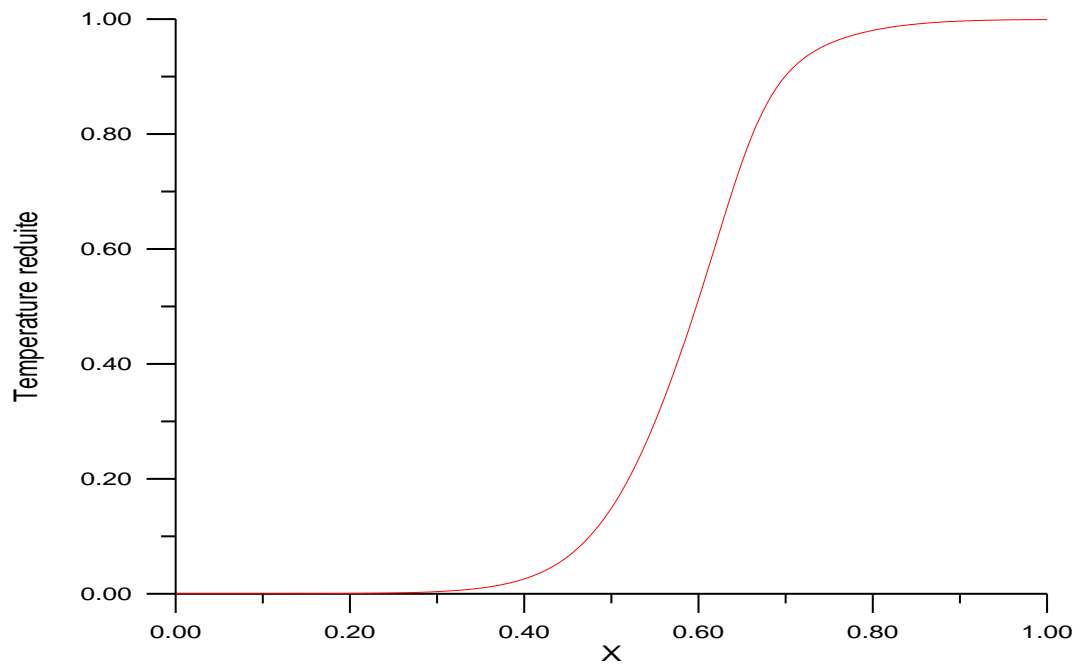


Fig.VII.2 Profil de température réduite, en fonction de x

La température réduite varie suivant la variable x de zéro qui correspond en réalité à la température des gaz frais T_1 jusqu'à l'unité à la limite qui représente la température de fin de combustion de mélange méthane-air, d'après la courbe tracé, on estime que la zone de préchauffage est de 0 à 0.6 suivant l'abscisse x on remarque une légère augmentation, ce pendant l'évolution est importante dans l'autre zone (de réaction).

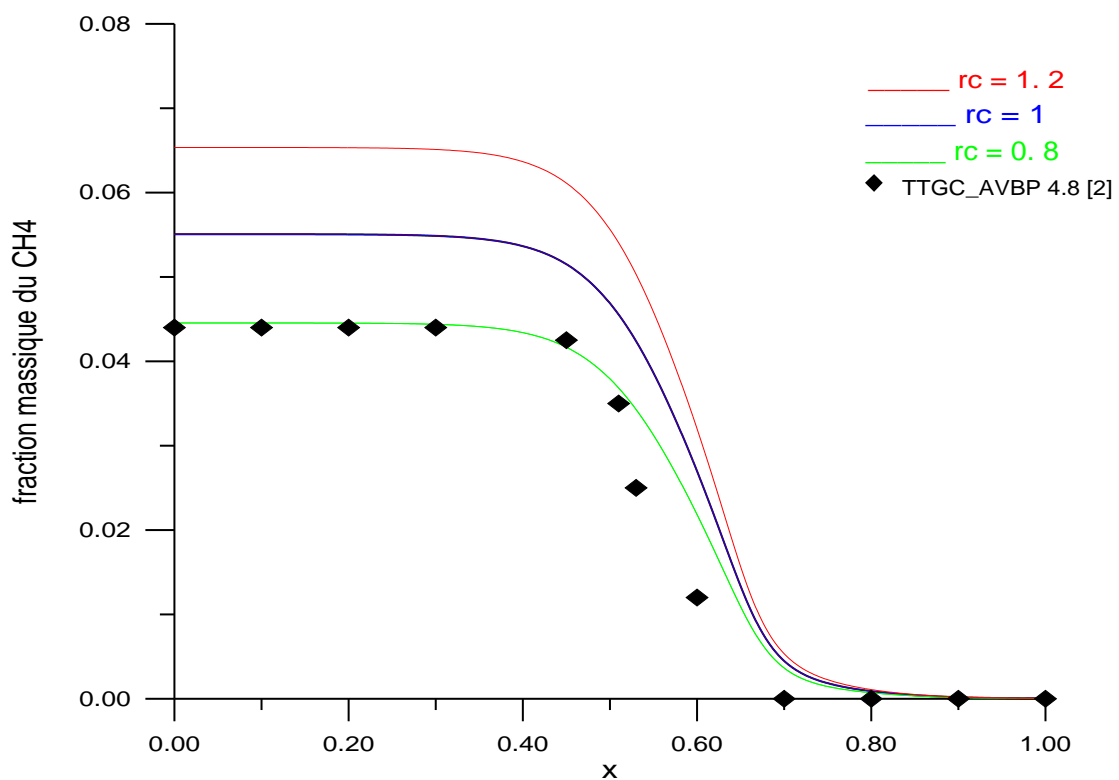


Fig.VII.3 Variation des fractions massiques de CH4 en fonction de x à différentes richesses

D'après la figure (VII.3) la consommation du combustible est négligeable dans la zone de préchauffage, par contre elle est importante dans la zone de réaction où le combustible réagit avec l'air et se transforme aux produits. Dans le cas de défaut d'air ($rc=1.2$), la quantité de combustible réagit avec l'air est très importante par contre ce dernier diminue pour le cas stoechiométrique et plus pour un mélange avec excès d'air.

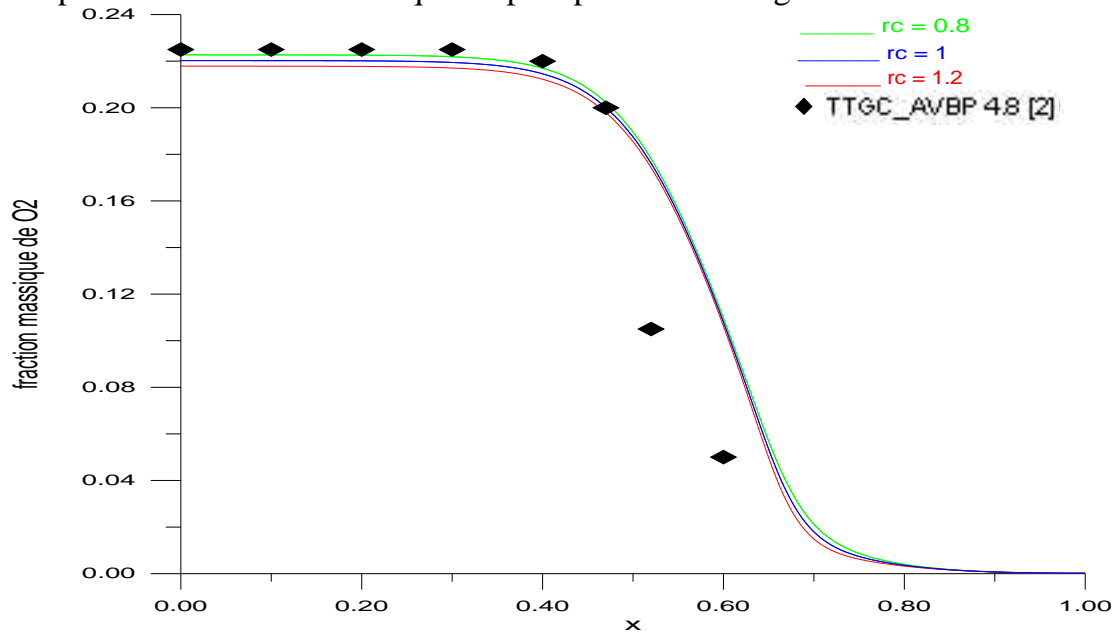


Fig.VII.4 : Variation des fractions massiques de O_2 en fonction de x à différentes richesses.

La consommation du combustible et de l'oxydant suit la même évolution la fraction massique est minimale dans le cas d'un défaut d'air et maximale dans le cas d'excès d'air. Les pertes sont estimées à cinq pourcent pour une richesse égale à 0.8, le profil de Taylor Galarkin modifié (TTGC) montre que nos approximations sont validées dans la zone de préchauffage et dans la zone réaction les courbes suivent l'allure de (TTGC) avec un avancement de la zone de réaction des résultats du code AVBP 4.8 du à l'impacte de la chaleur de réaction considéré.

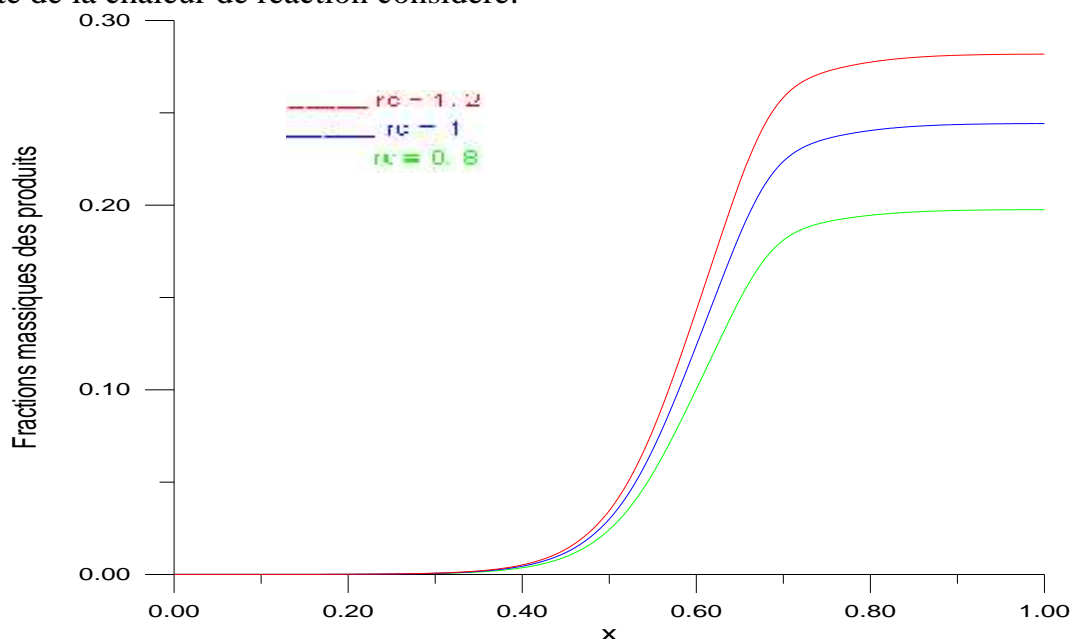


Fig.VII.5 Variation des fractions massiques des produits en fonction de x à différentes richesses

L'évolution des produits de combustion (CO_2, H_2O, CO, H_2) sont regroupés dans une seule courbe et ceci ne montre pas des produits dans la zone de préchauffage à cause de la température qui est faible entraîne une diffusion des espèces par contre dans la zone de réaction la transformation des réactifs aux produits est brutale.

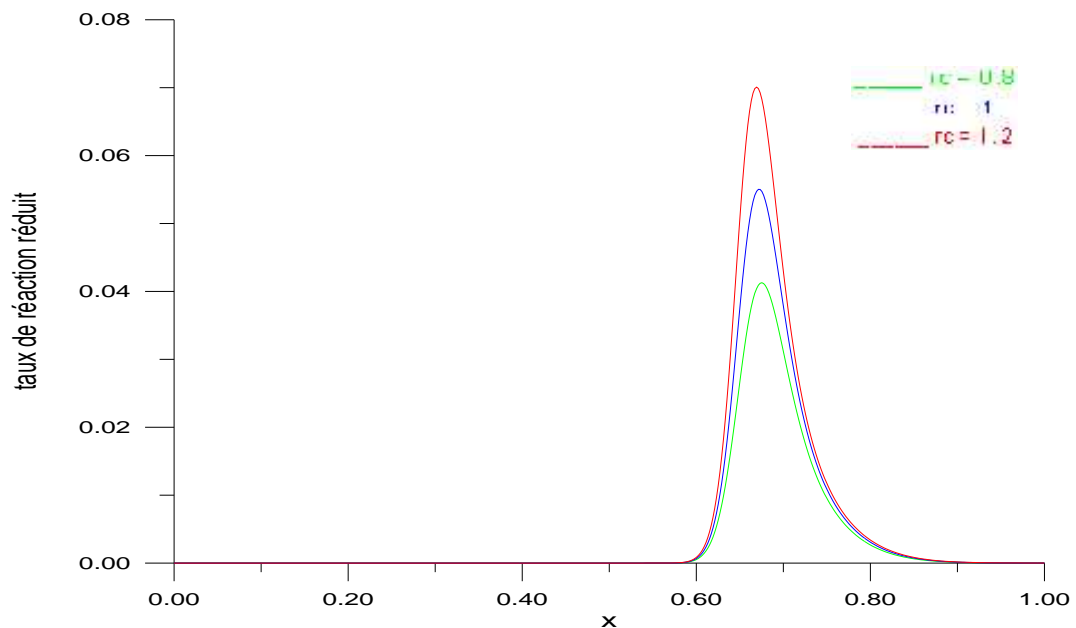


Fig.VII.6 : Variation de taux de réaction en fonction de x à différentes richesses

Dans la zone de préchauffage le phénomène essentiel est le transfert de chaleur et la diffusion de matière qui conduit à un taux de réaction négligeable. Dans la zone de réaction augmentation de température d'un côté et la consommation du carburant et de comburant de l'autre, la transformation est très rapide ce qui correspond à une croissance brutale de taux de réaction dans cette zone.

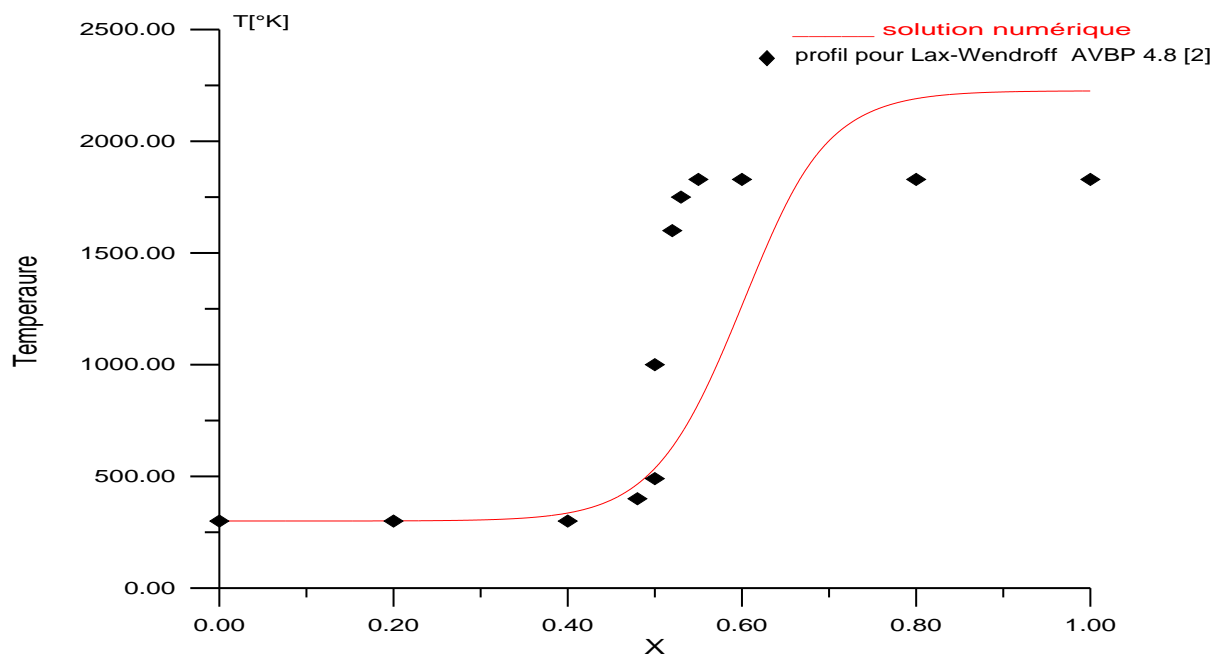


Fig.VII.7 : profil de la température de combustion pour des mélanges méthane-air suivant x.

D'après la figure (VII.7), l'évolution du profil de température est faible dans la zone de préchauffage, car le phénomène essentiel dans cette zone est la diffusion de matière et transfert de chaleur, par la suite le profil de température augmente à cause des effets d'échanges thermiques des molécules par convection et les réactions chimiques ne se produisent que dans cette zone, puis le profil devient presque linéaire. D'après la courbe la température maximale atteinte est supérieure à la valeur trouvée en expérience de Elgofopoulos (2226 au lieu de 1829K) ceci dû à des pertes de chaleur.

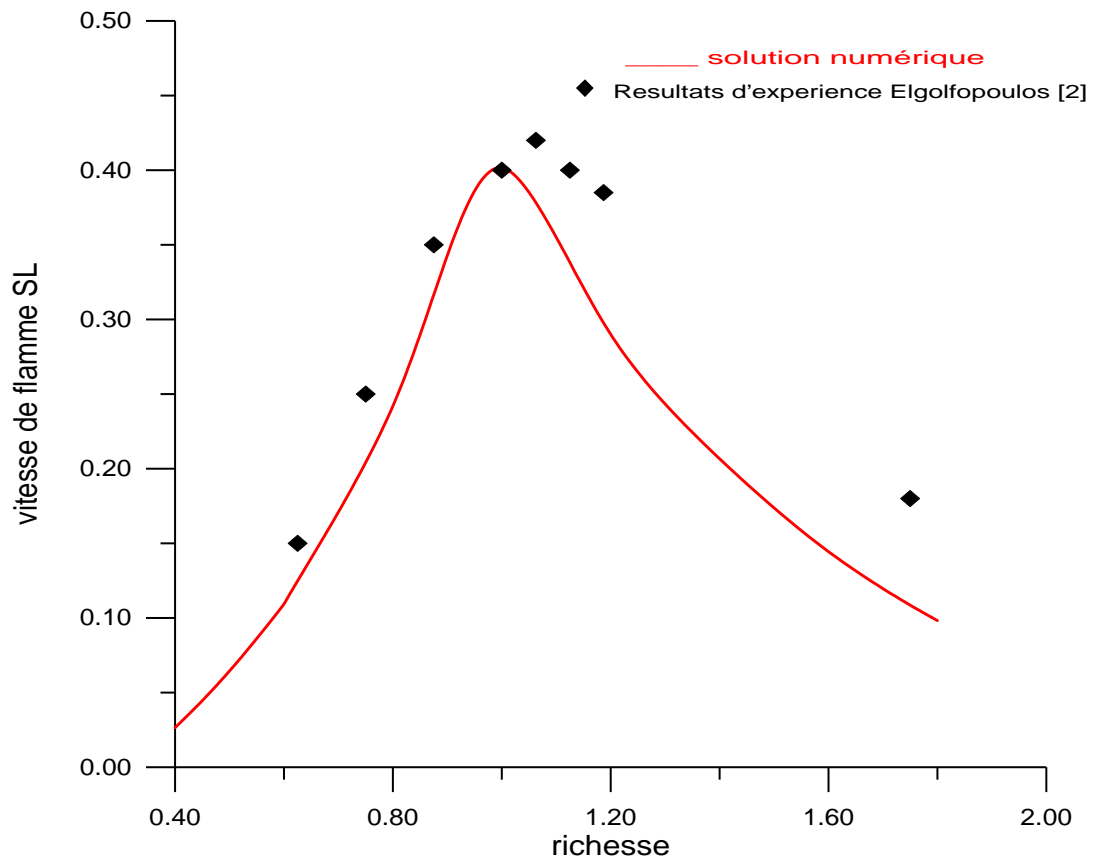


Fig.VII.8 : Vitesse de flamme laminaire méthane-air à différentes richesses

La figure VII.8 montre que la vitesse de propagation de la flamme augmente avec l'augmentation de la richesse pour atteindre son maximum à une richesse égale à l'unité alors que l'expérience de Elgofopoulos prouve que la valeur maximale est atteinte pour une richesse égale à 1.1. ce dernier donne meilleur rendement de combustion correspondant à une température maximale, puis la vitesse de flamme diminue pour une richesse supérieure à l'unité.

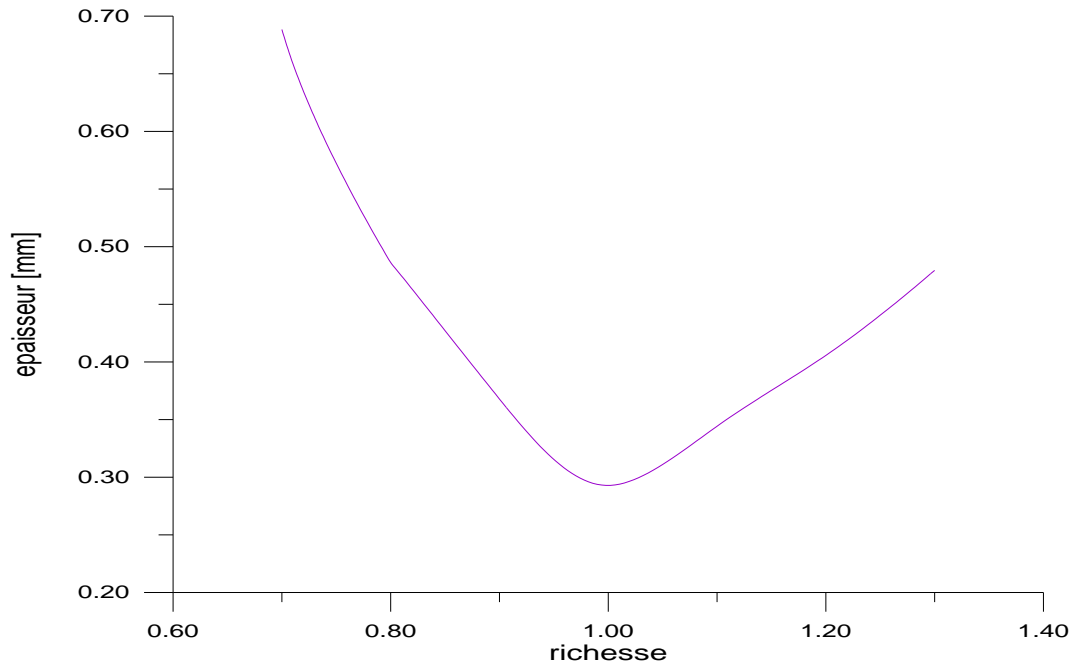


Fig.VII.9 : Epaisseur de flamme laminaire méthane-air à différentes richesses

On s'aperçoit d'après la figure VII.9 que l'épaisseur de la flamme est inversement proportionnel à la vitesse. En effet, l'épaisseur diminue avec l'augmentation de la richesse pour un mélange pauvre et atteint une valeur minimale pour un mélange stoechiométrique, puis il augmente avec la richesse pour un mélange riche.

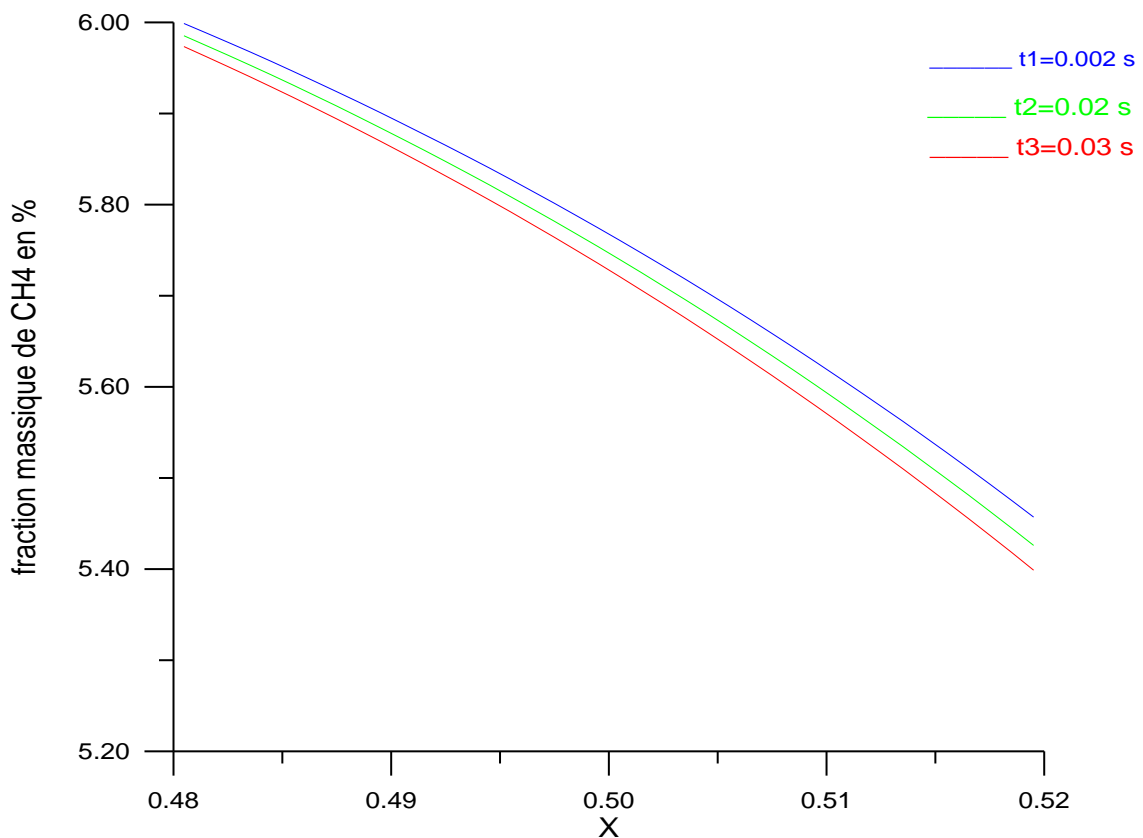


Fig.VII.10 Fractions massiques du combustible en fonction de x à des temps différents

La figure.VII.10 représente la variation de la consommation du combustible avec une richesse égale à l'unité aux différents moments de combustion, les fractions sont de milieu de la distance x considéré en avant. On remarque que la fraction massique diminue pendant l'écoulement du temps dû à l'instationnarité de la flamme. Par les mêmes conditions on a les graphes si dessous.

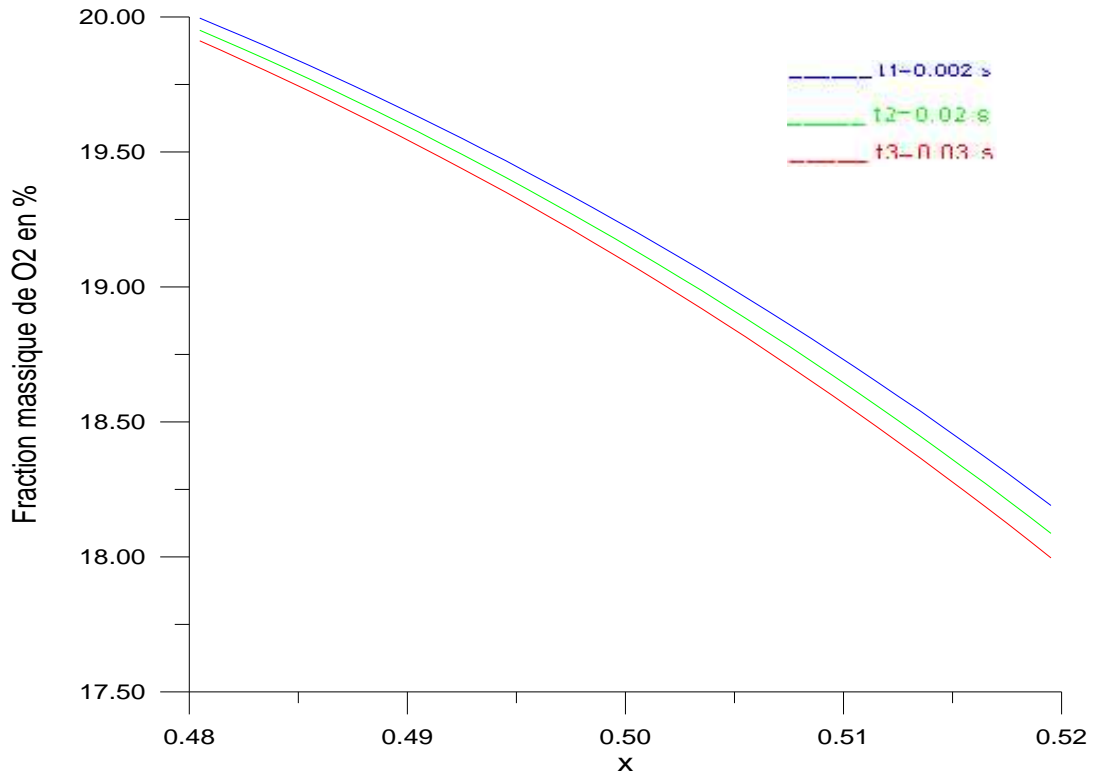


Fig.VII.11 Fractions massiques de l'oxydant en fonction de x à des temps différents

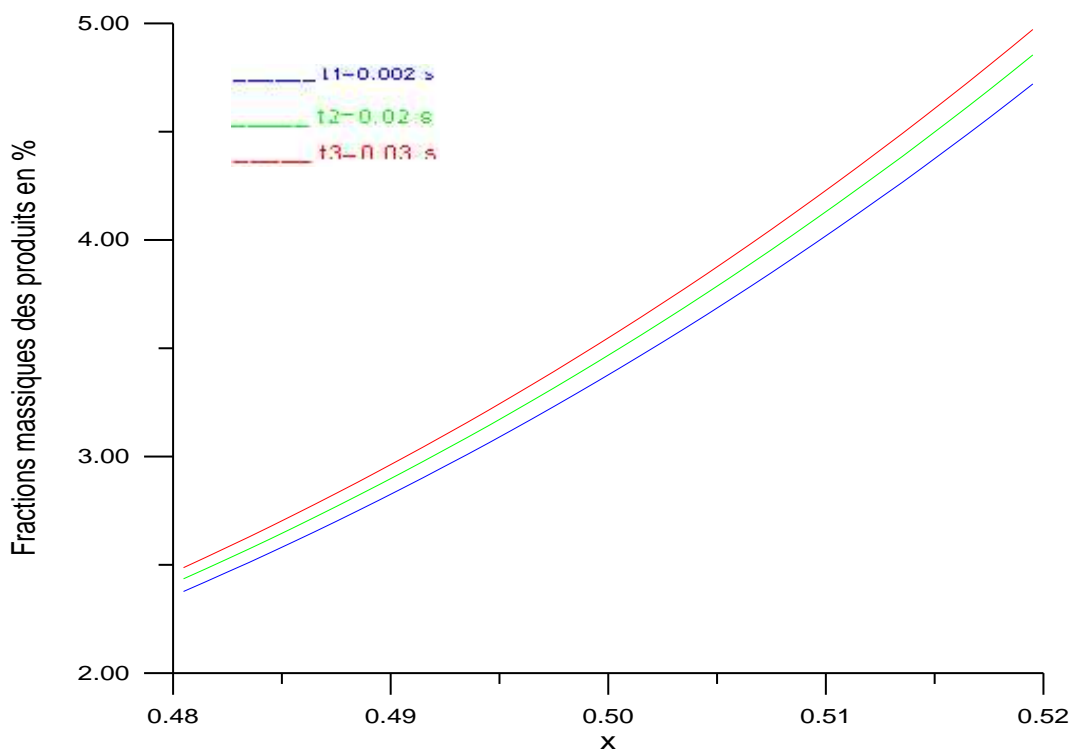


Fig.VII.12 Fractions massiques des Produits en fonction de x à des temps différents

D'après la figure.VII.12 les fractions massiques des produits augmentent avec le temps c'est-à-dire les fractions apparaissent pendant le temps.

VII.2 Propane C₃H₈:

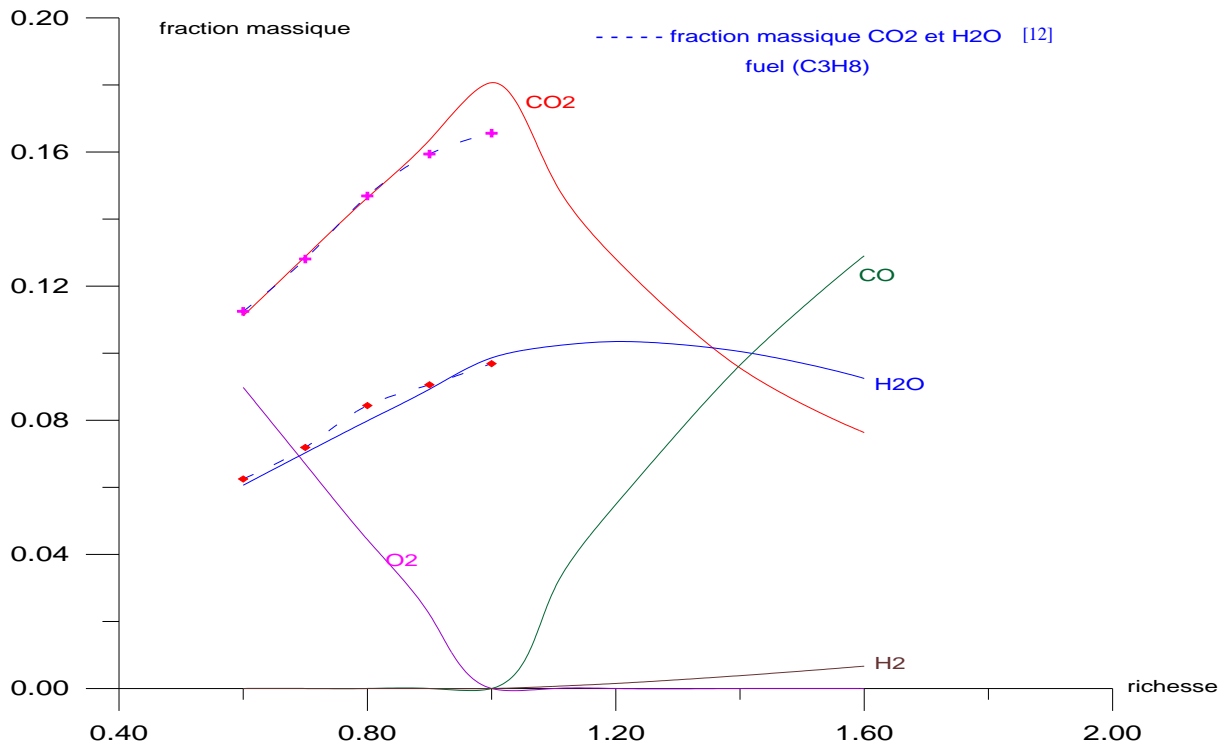


Fig.VII.13 composition de fin de combustion pour des mélanges propane-air à différentes richesses

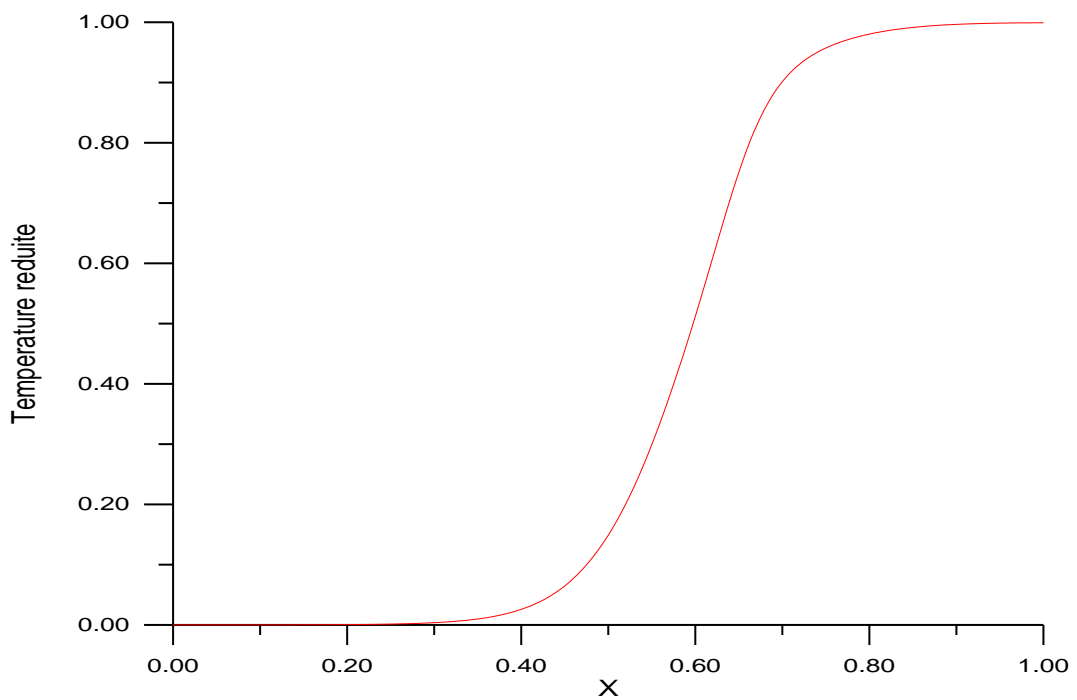


Fig.VII.14 Variation du profil de température réduite „ en fonction de x

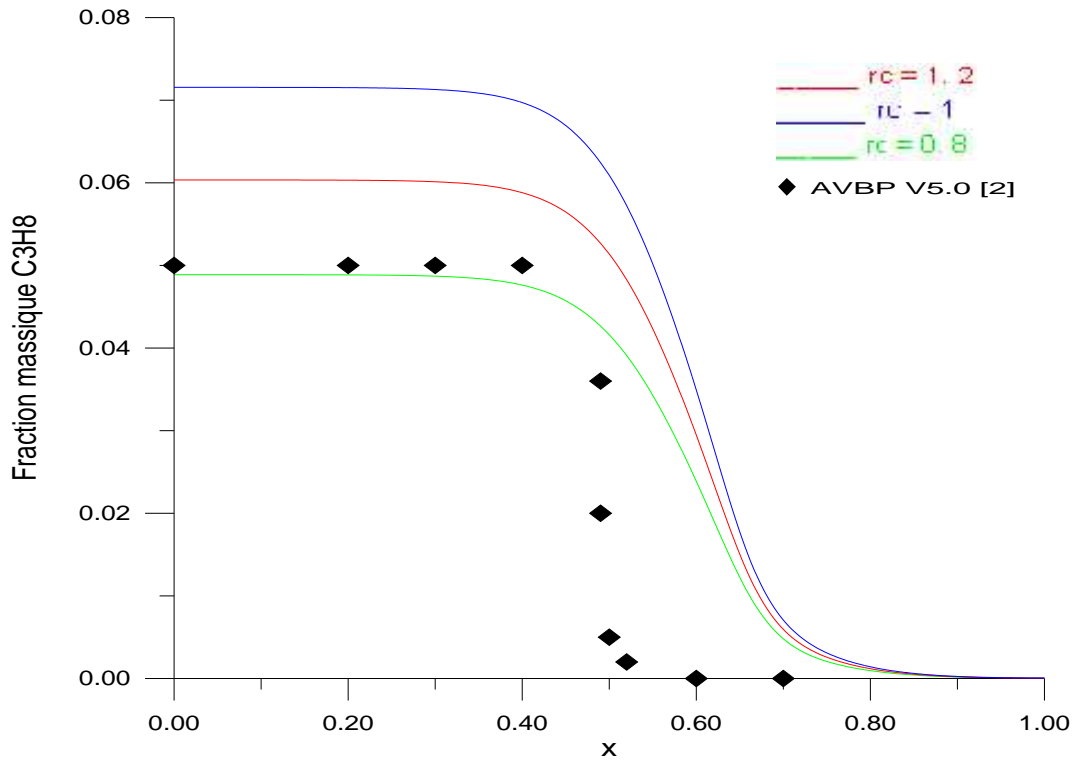


Fig.VII.15 Variation des fractions massiques de C₃H₈ en fonction de x à différentes richesses

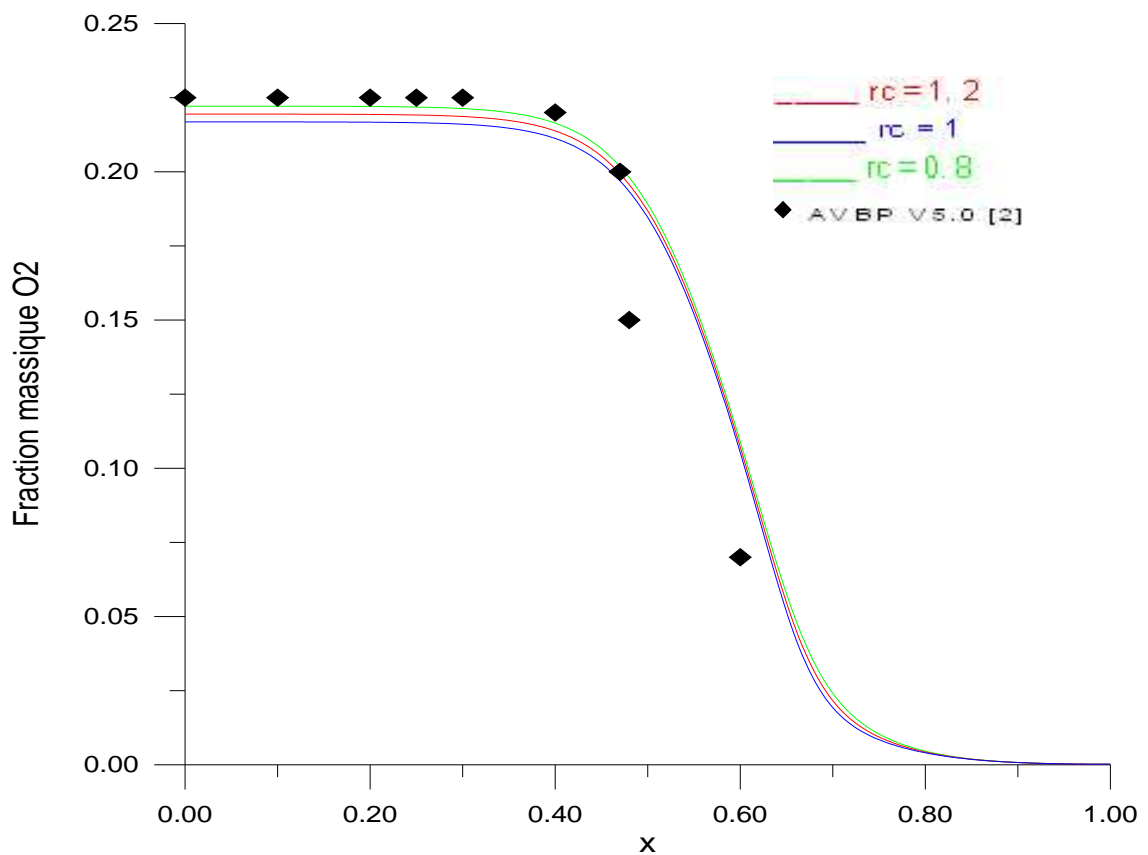


Fig.VII.16 : Variation des fractions massiques de O₂ en fonction de x à différentes richesses

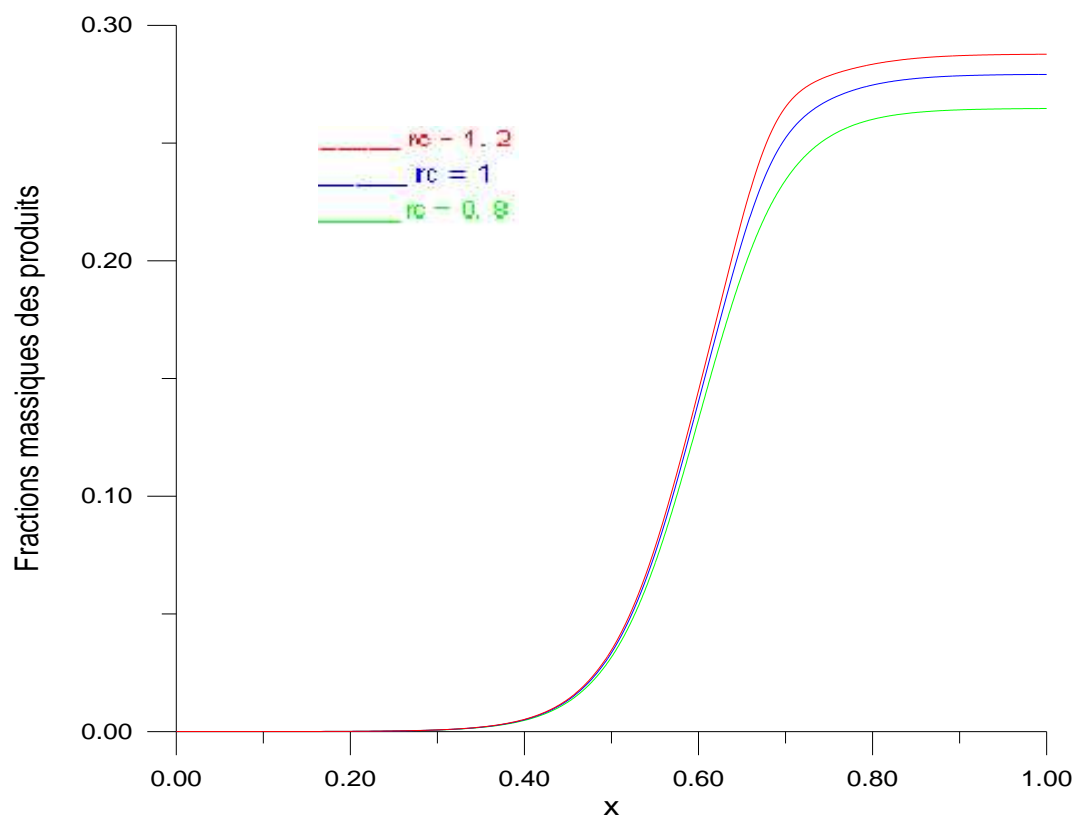


Fig.VII.17 : Variation des fractions massiques des produits en fonction de x à différentes richesses

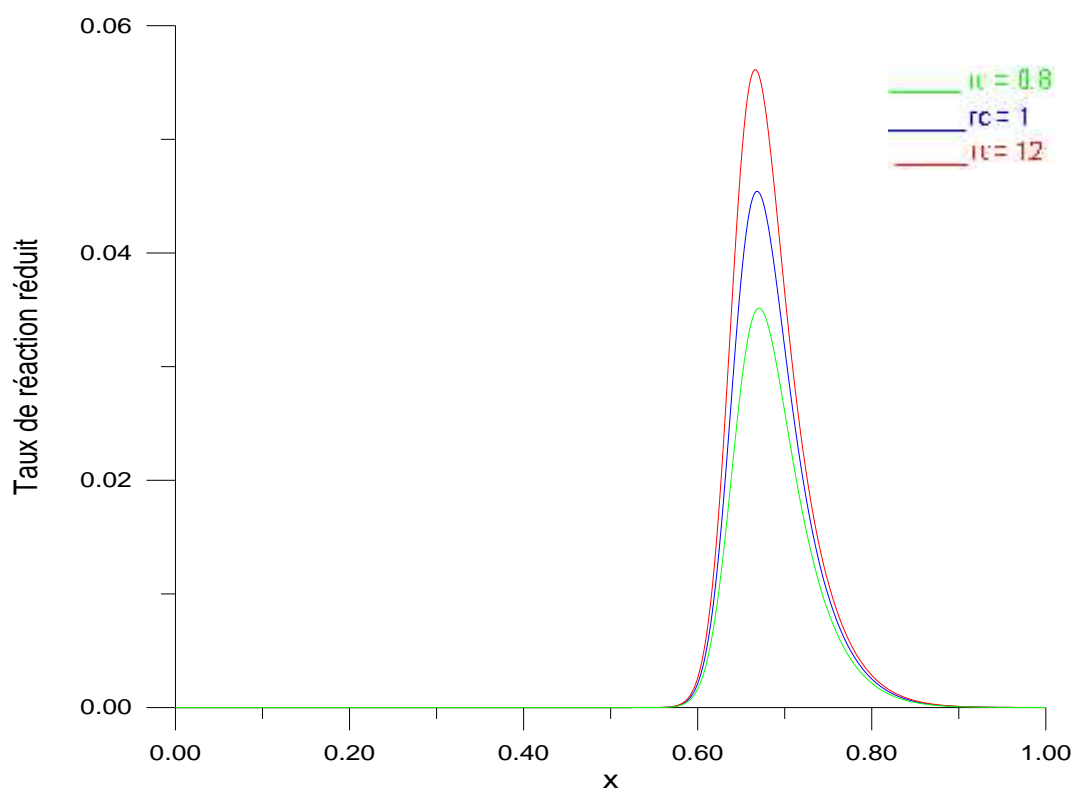


Fig.VII.18 :Variation de taux de réaction en fonction de x à différentes richesses

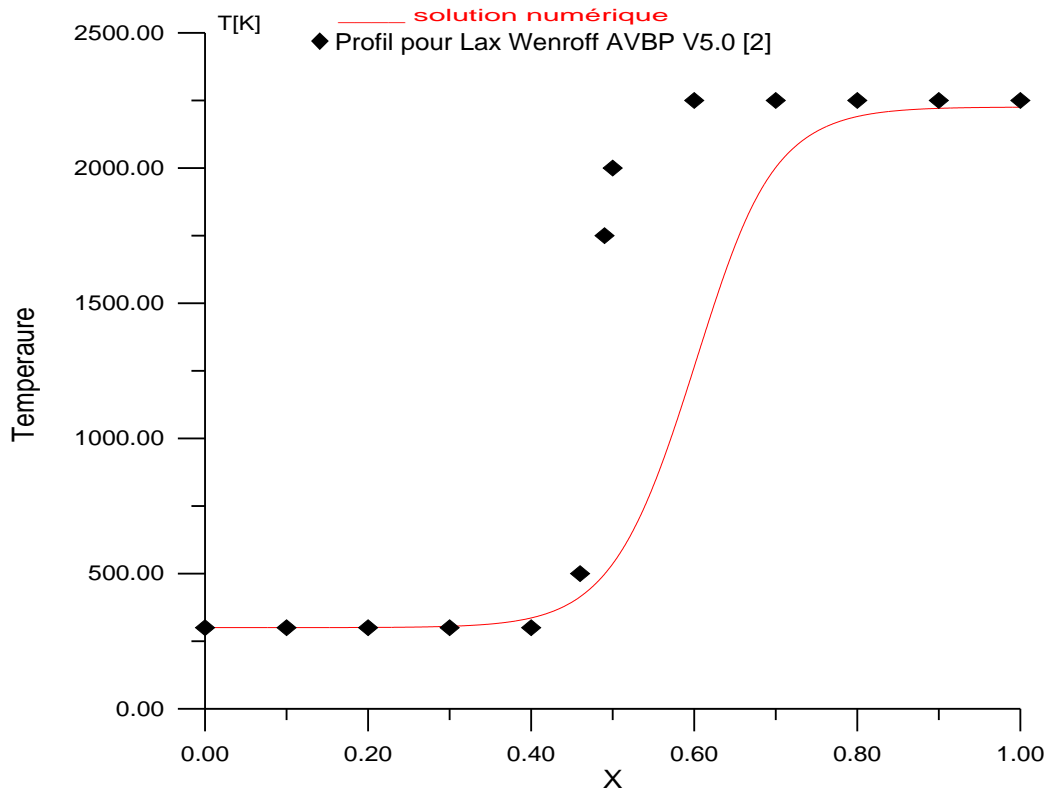


Fig.VII.19 : Température de combustion pour un mélange propane-air suivant x

La figure.VII.19 montre la variation de la température du propane-air, pour des conditions standards de combustion ($T_1=300$ K) la courbe suivre le profil de AVPB V5.0 dans la zone de préchauffage et des valeurs de température de fin de combustion acceptable.

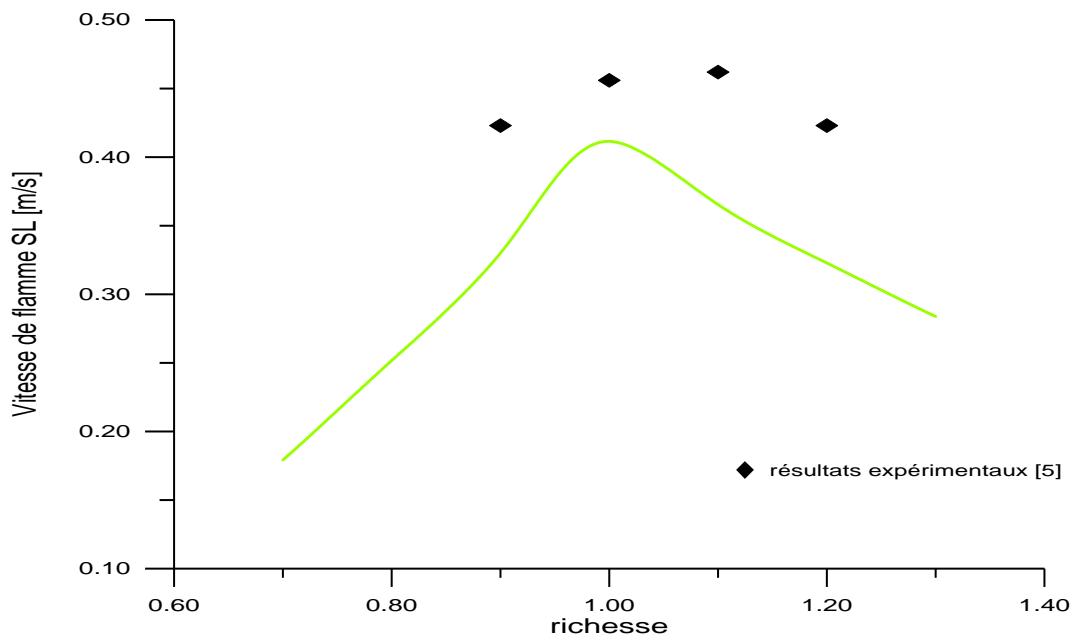


Fig.VII.20: Vitesse de propagation de flamme laminaire propane-air à différentes richesses.

De la figure VII.20 la vitesse de flamme théorique est moins élevée par rapport aux résultats expérimentaux.

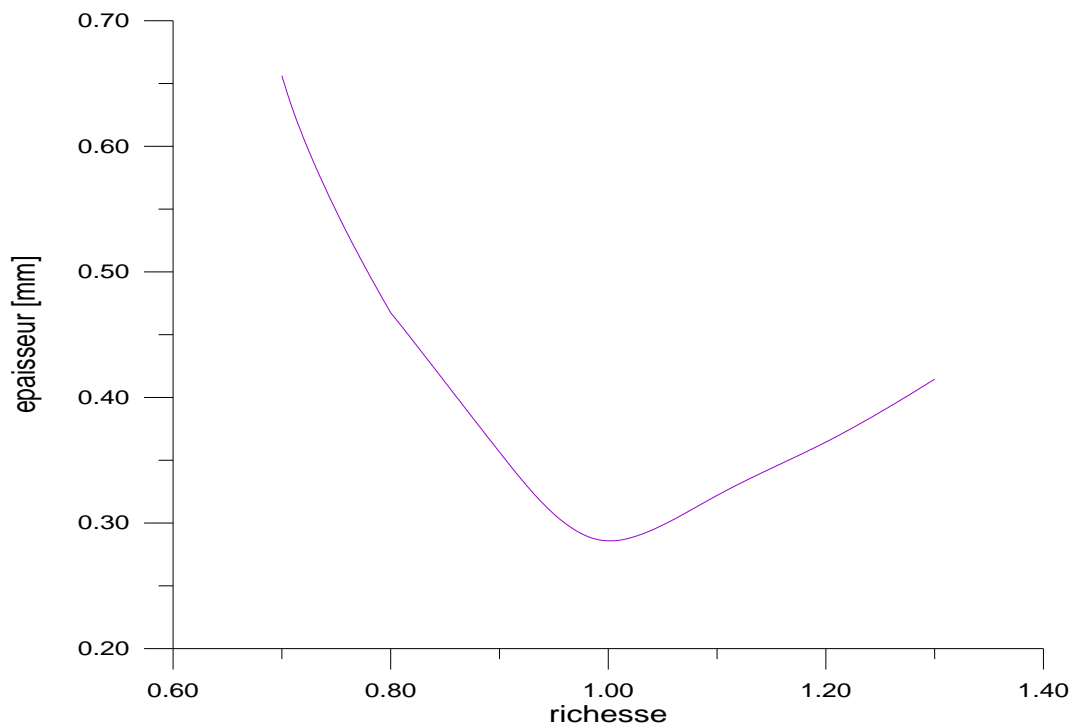


Fig.VII.21 Epaisseur de flamme laminaire propane-air à différentes richesses.

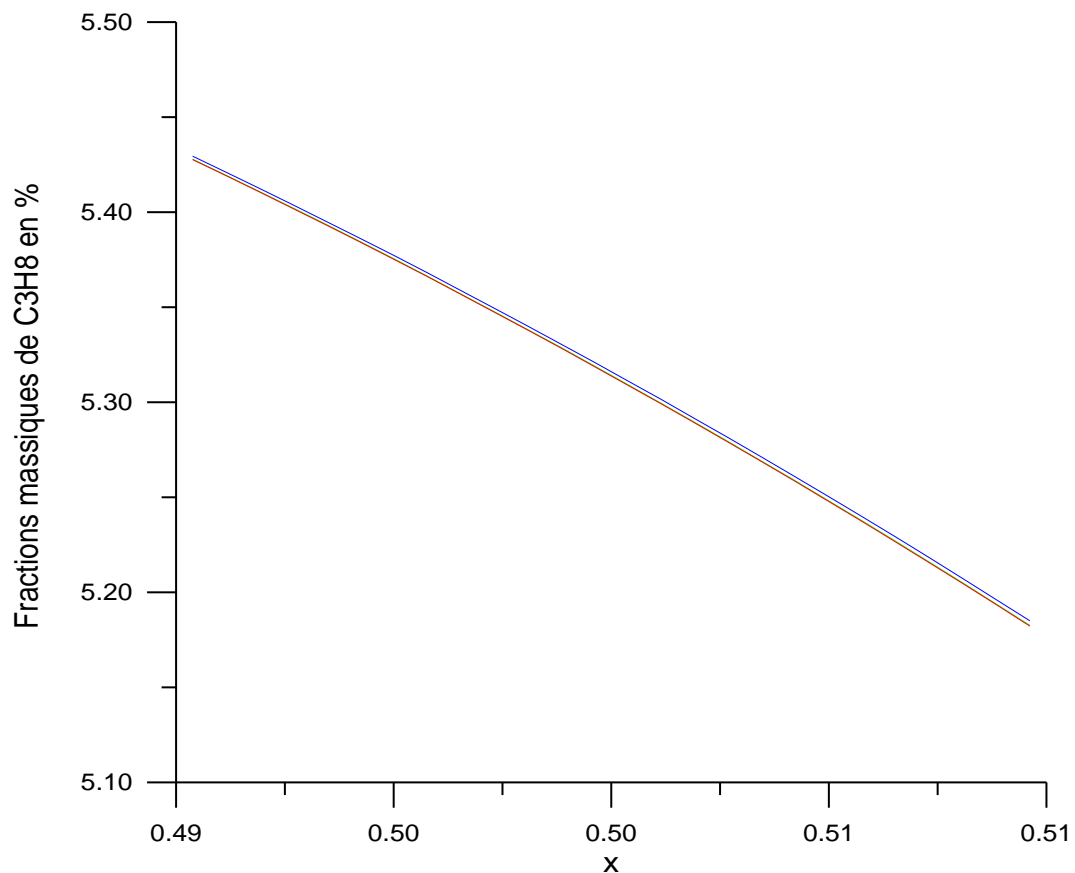


Fig.VII.22 Fractions massiques du combustible en fonction de x à des temps différents

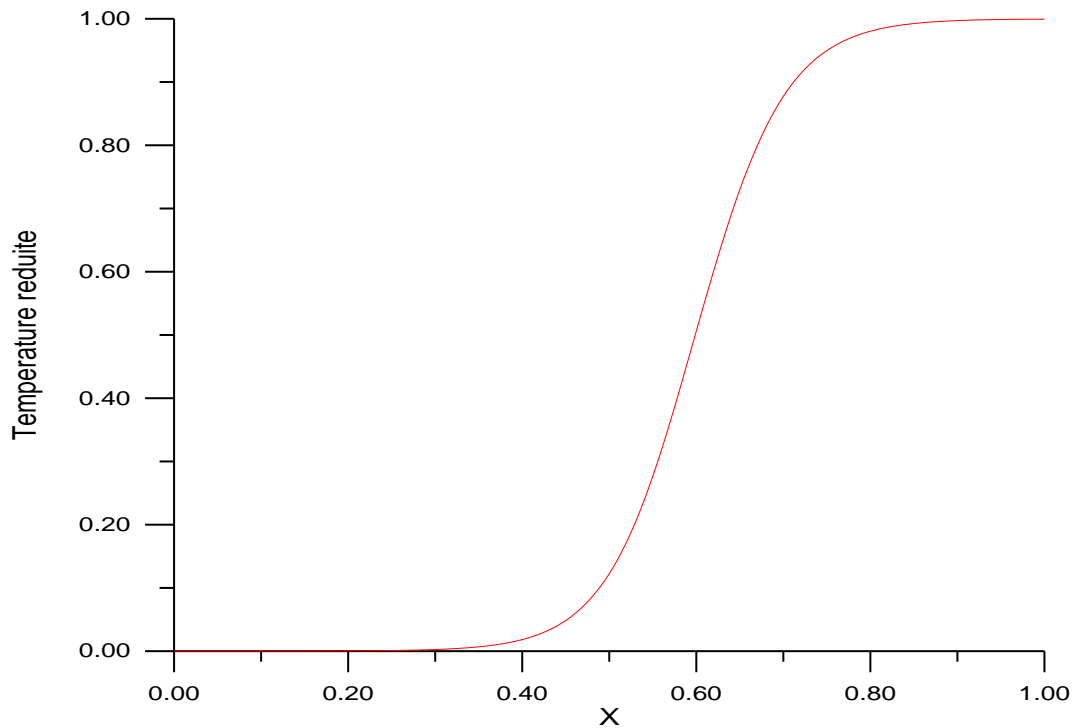
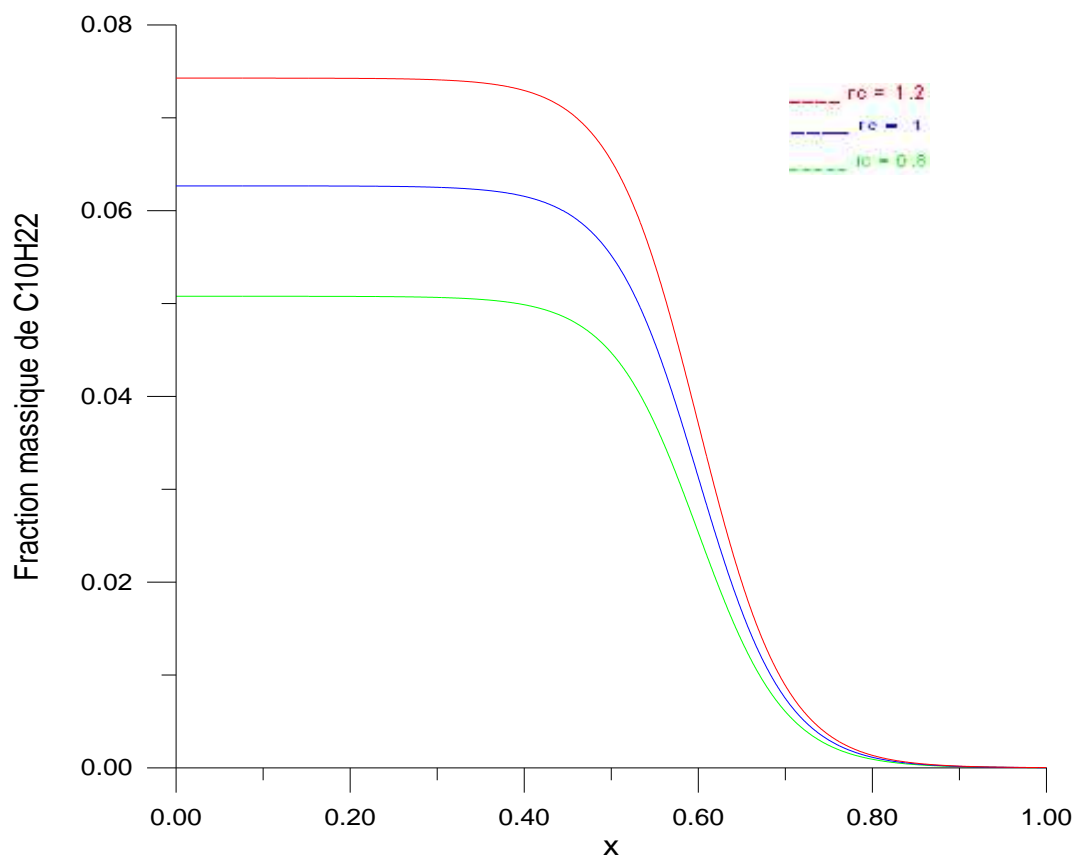
VII.3 n-Decane $C_{10}H_{22}$:

Fig.VII.23 Variation du profil de température réduite „ en fonction de x

Fig.VII.24 Variation des fractions massiques de $C_{10}H_{22}$ en fonction de x à différentes richesses

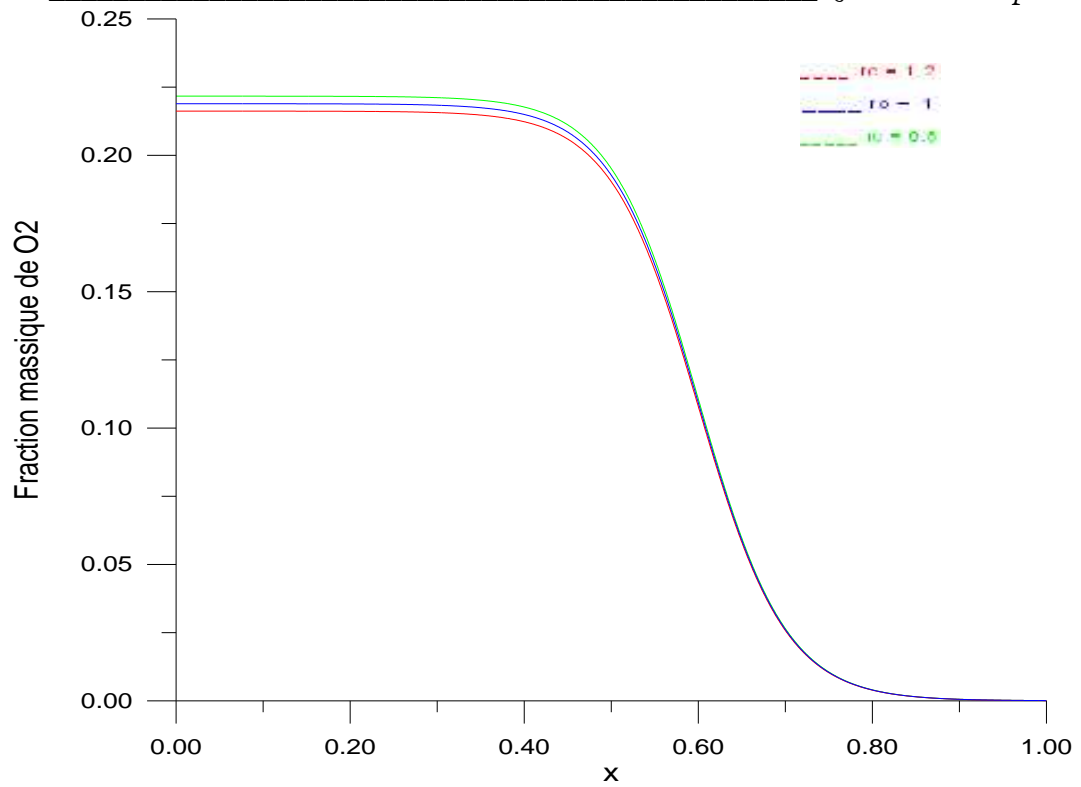


Fig.VII.25 variation des fractions massiques de O₂ en fonction de x à différentes richesses

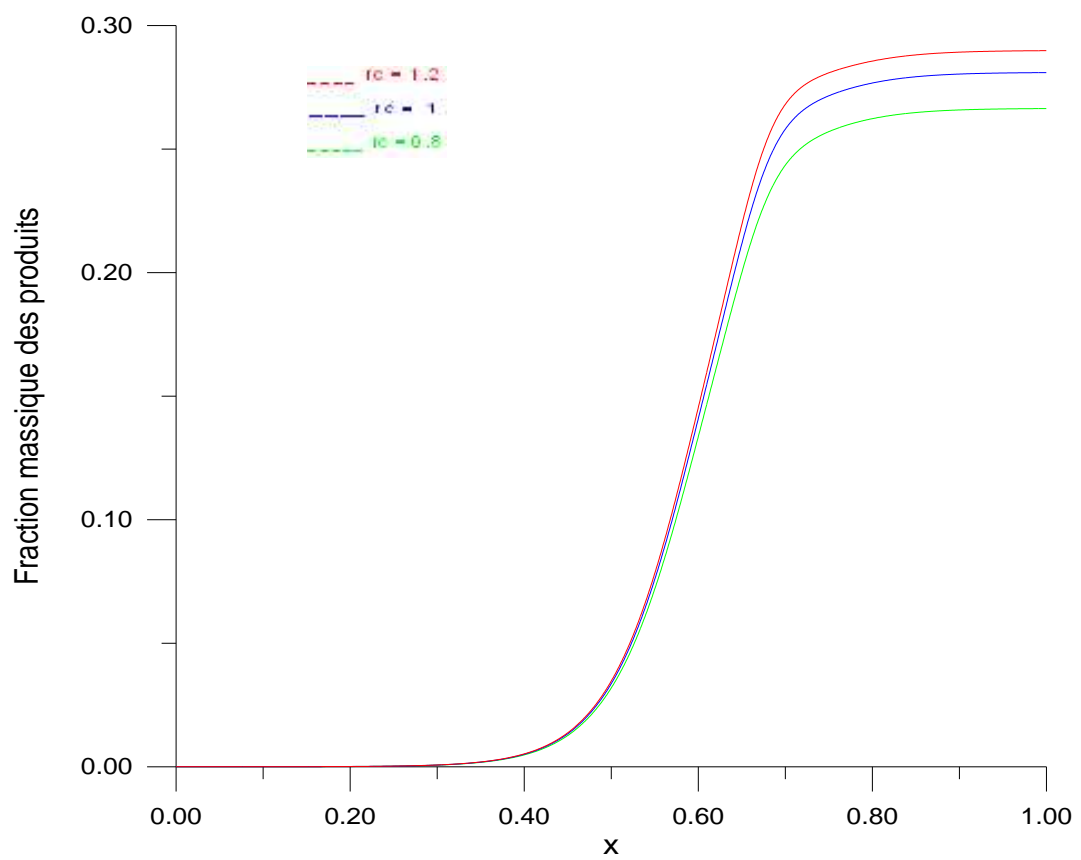


Fig.VII.26 Variation des fractions massiques des produits en fonction de x à différentes richesses

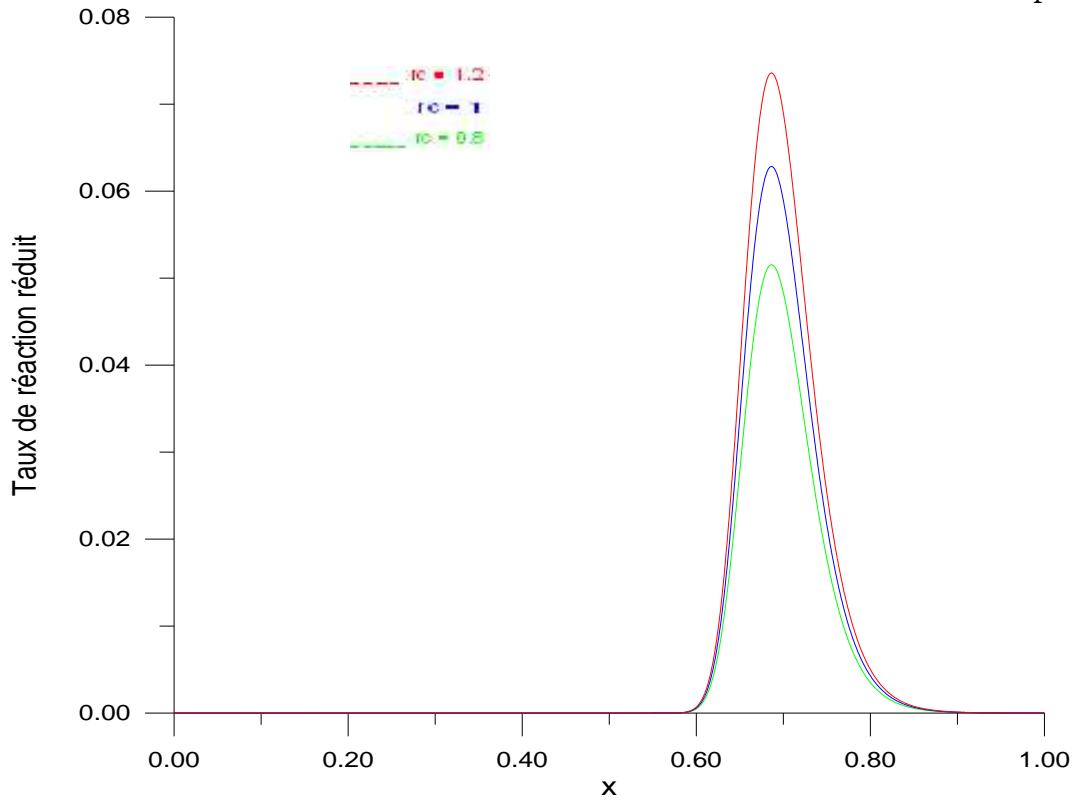


Fig.VII.27 Variation de taux de réaction en fonction de x à différentes richesses

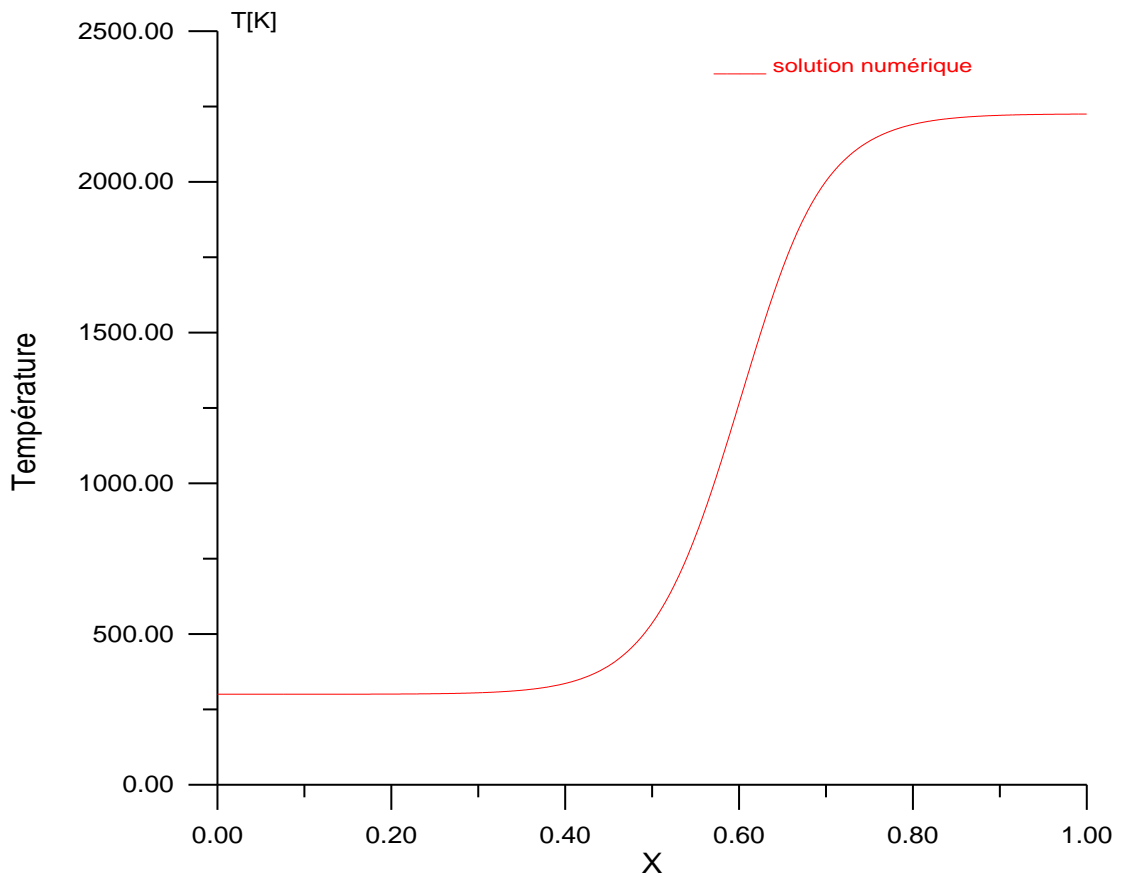


Fig.VII.28 Température de combustion pour un mélange n-Decane-air suivant x

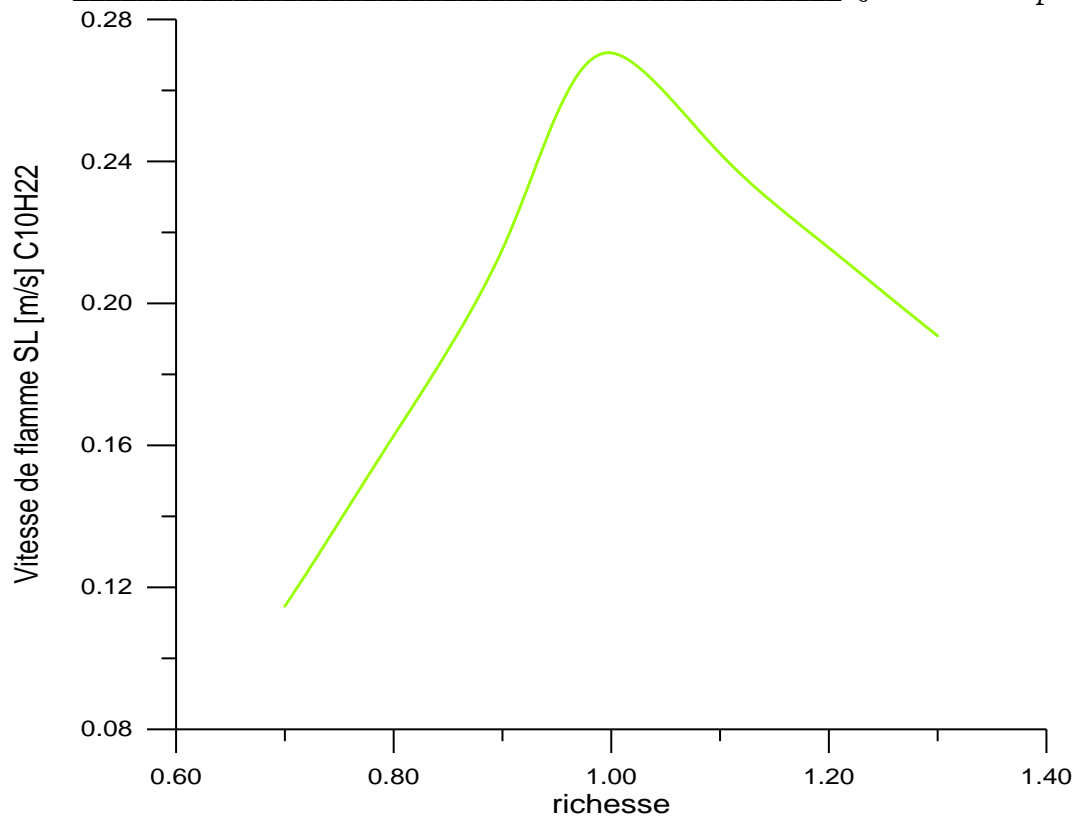


Fig.VII.29 : Vitesse de propagation de flamme laminaire n-decane-air à différentes richesses.

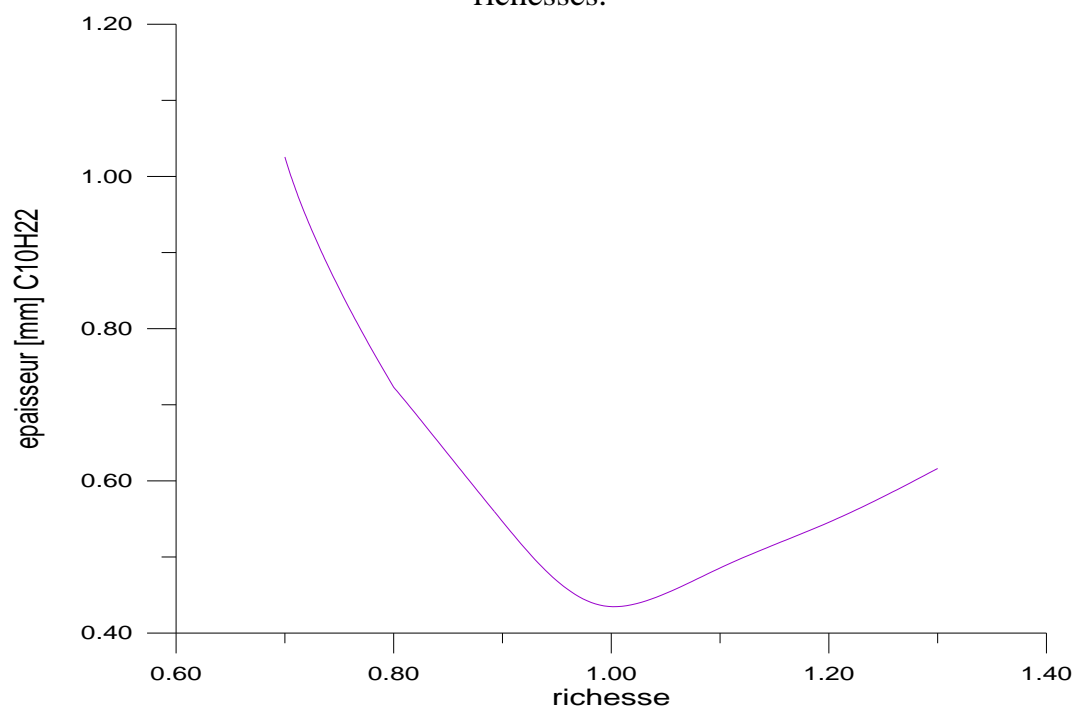
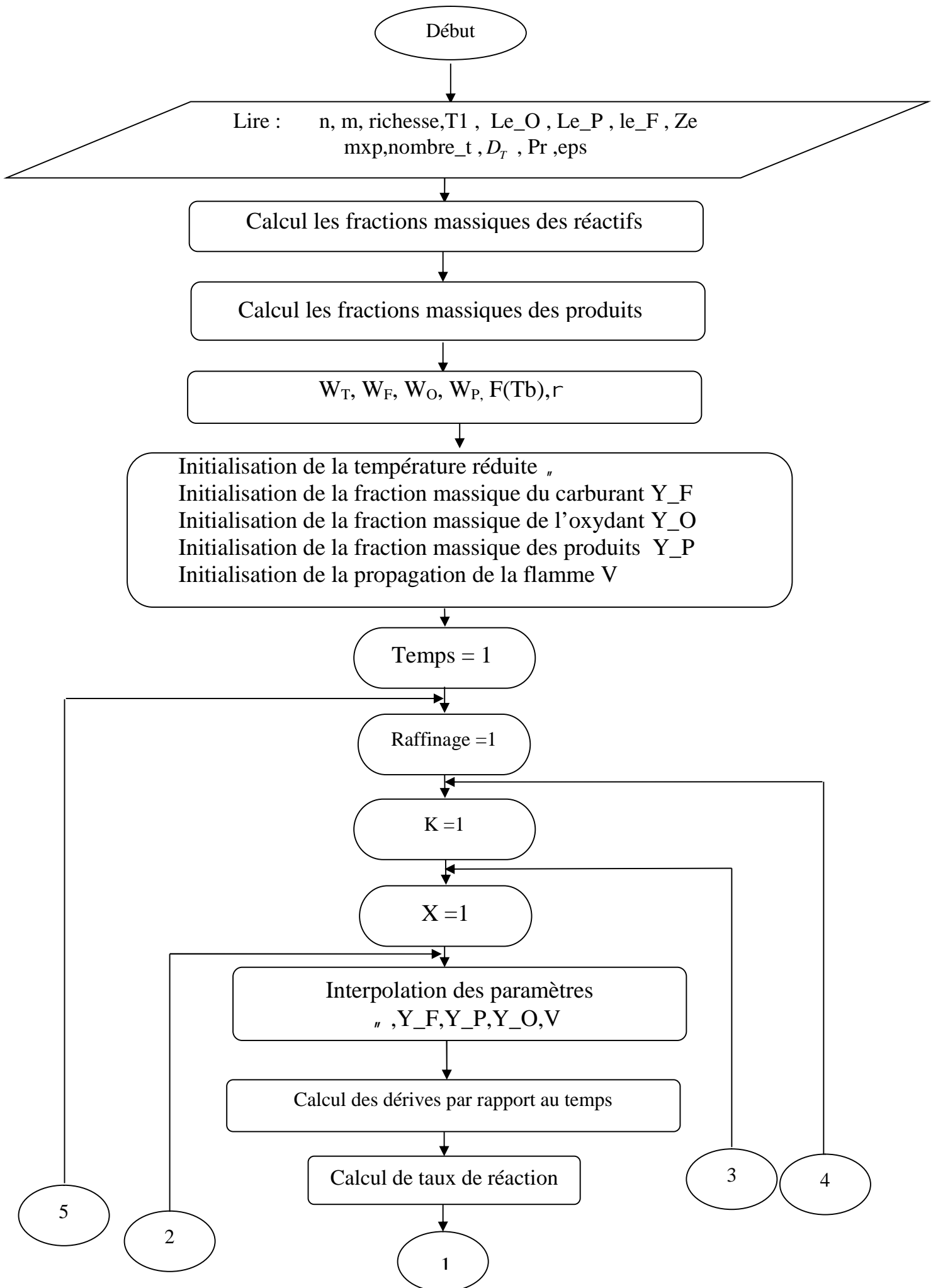
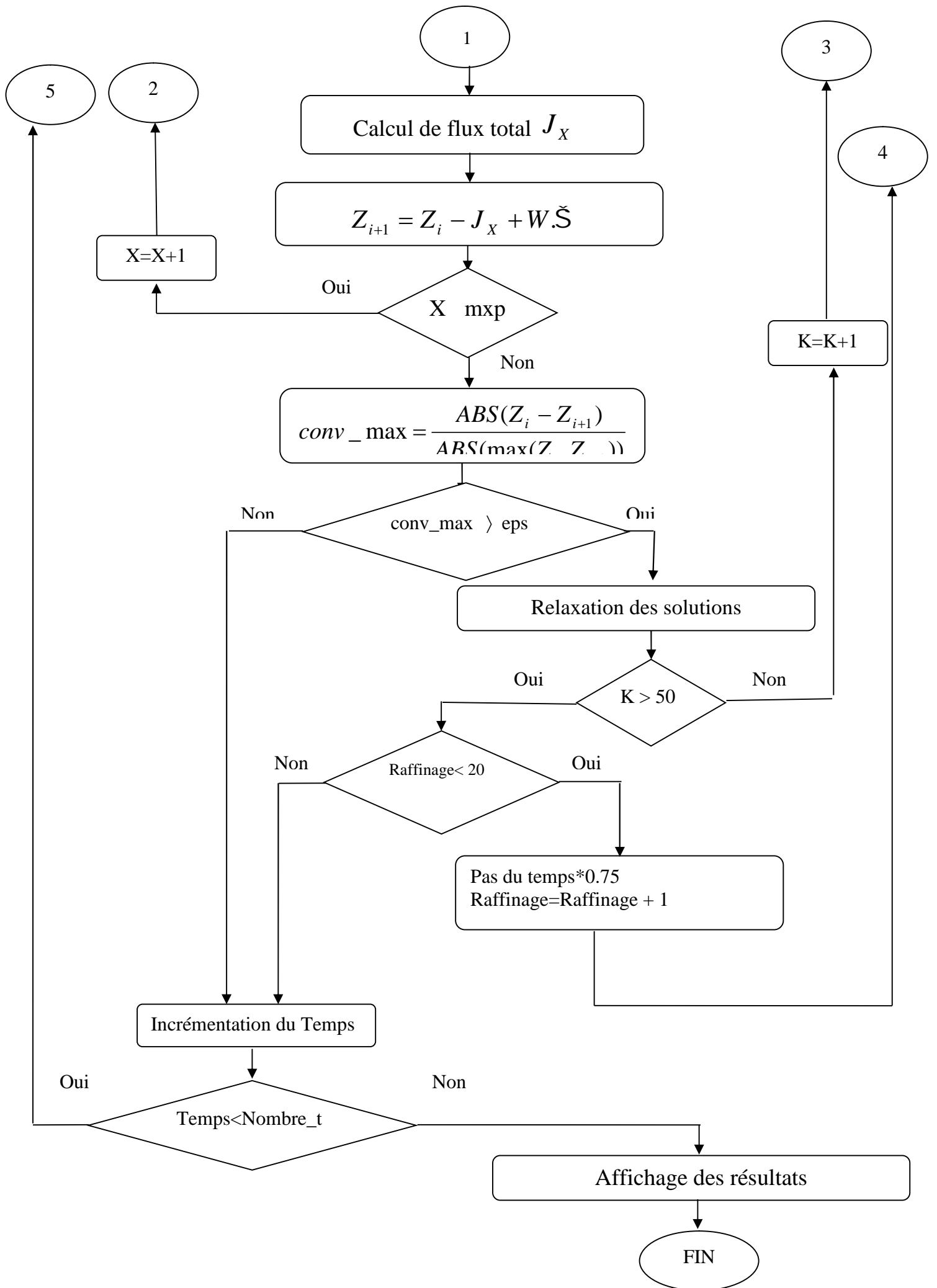
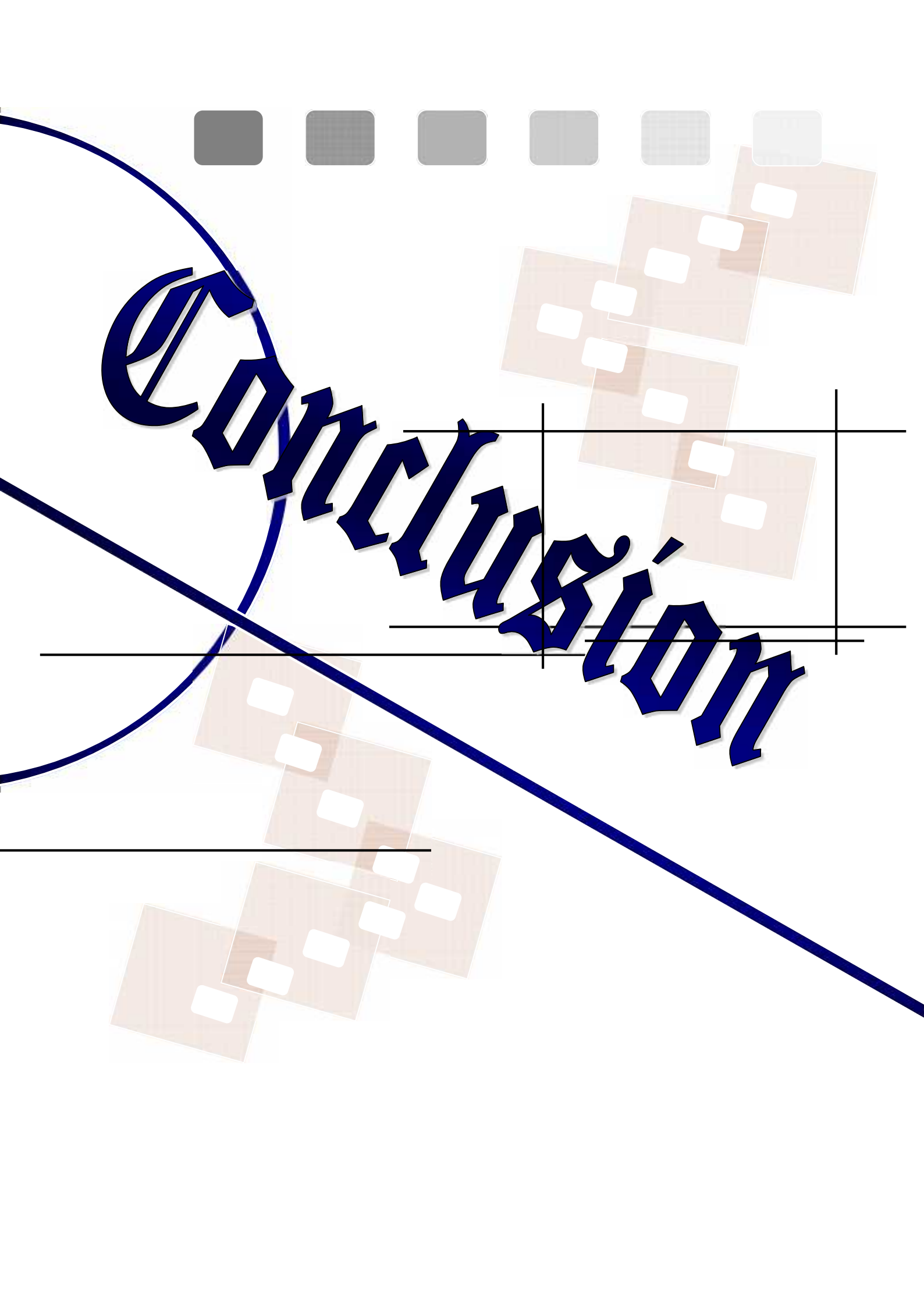


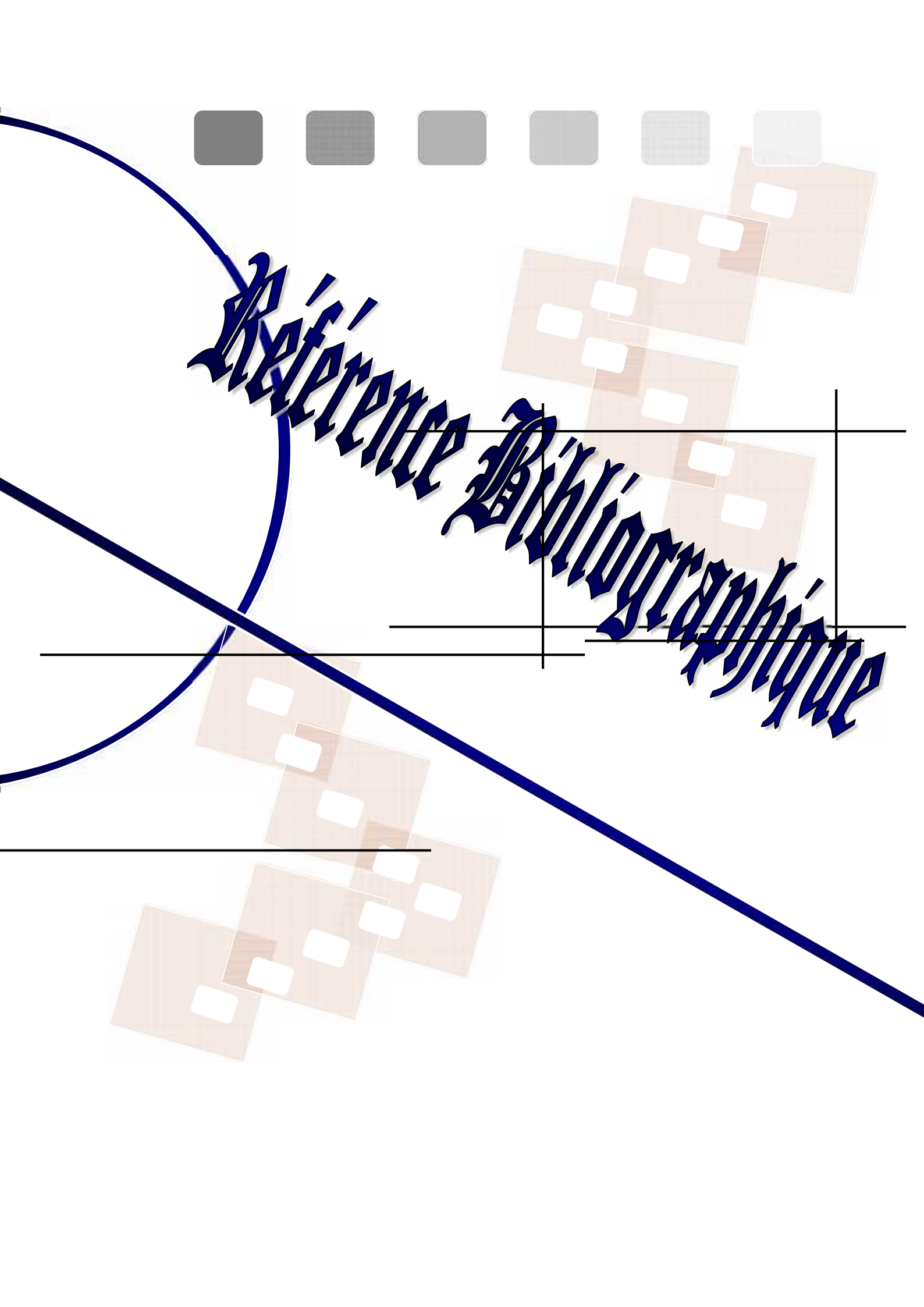
Fig.VII.30 Epaisseur de flamme laminaire n-decane-air à différentes richesses







Conclusión



Reference Bibliographie

- [1] ROLAND BORGHI ET MICHEL CHAMPION
MODELISATION ET THEORIE DES FLAMMES
Edition tchnip paris 2000
- [2] T. POINSOT
CALCULS DE FLAMMES LAMINAIRES PREMELANGEES
C.E.R.F.A.C.S. Référence: WN/CFD/02/67 juillet 2002
- [3] STEPHEN R. TURNS
AN INTRODUCTION TO COMBUSTION (CONCEPT AND APPLICATIONS)
mc graw-hill, inc 1996
- [4] L. GASNOT
MODELISATION DE LA CINETIQUE CHIMIQUE DE COMBUSTION
FLAMMES PLATES LAMINAIRES ET PREMELANGEES
Mont Saint Odile - 2000
- [5] TECHNIQUE DE L'IGENIEURE B-8315 11-1995 ET BE 8320 4-1999.A1620
- [6] LES MOTS DE COMBUSTION
Groupement français de la combustion 2004
- [7] COLIN R.FERGUSON ET ALLAN T.KIRKPATRICK
INTRERNAI COMBUSTION ENGINES APPLIED THERMOSCIENCES
(SECOND EDITION)
Colorado State University -1995
- [8] DEBBI Med ET KACEDALL BILLEL
Elaboration d'un programme de calcul de la température de combustion et la composition molaire des produits de combustion d'un hydrocarbure (C_nH_m).
application à la combustion de kérosène $C_{10.3}H_{20.6}$ et gasoil $C_{14.4}H_{24.9}$
Promoteur Mr. HENNI Mansour Zoubir (2004).
- [9] M.BARRERE-R.PRUD'HOMME
EQUATIONS FONDAMENTALES DE L'AEROTHERMOCHIMIE
MASSON ET *C^{ie}*, PARIS(VI^e), 1973
- [10] G.DE SOETE et A. FEUGIER
ASPECT PHYSIQUE ET CHIMIQUE DE LA COMBUSTION
Institut français du pétrole recherche et témoignages
Edition tchnip 1976.
- [11] ENCYCLOPEDIE ENCARTA
Edition 2006
- [12] R. BORGHI, M.DESTRIAU ET GERAD DE SOET.
LA COMBUSTION ET LA FLAMME
Edition tchnip paris 1995.

Référence Bibliographique : _____

- [13] T. POINSOT
LAMINAR PREMIXED FLAMES: A SUMMARY OF IMPORTANT RESULTS
IMF Toulouse .December 10, 2005

- [14] KUZMAN RAZNJVIC
TABLES ET DIAGRAMME THERMODYNAMIQUE
Edition Eyrolles 1970.

Les coefficients de Gordon et Mac Brid

Pour calculer l'enthalpie standard des produits de combustion, on utilise les formules et ces coefficients présentés dans le tableau ci-dessous [7] :

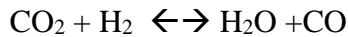
$$\bar{c}_p/R_u = a_1 + a_2T + a_3T^2 + a_4T^3 + a_5T^4 \quad (\text{cal/ mol} \cdot \text{K})$$

$$\bar{h}^0/R_uT = a_1 + \frac{a_2}{2}T + \frac{a_3}{3}T^2 + \frac{a_4}{4}T^3 + \frac{a_5}{5}T^4 + \frac{a_6}{T} \quad (\text{cal/ mol})$$

Espèces	a ₁	a ₂	a ₃	a ₄	a ₅	a ₆
CO ₂	0.04453623E+02	0.03140168E-01	-0.12784105E-05	0.02393996E-08	-0.16690333E-13	-0.04896696E+06
H ₂ O	0.02672145E+02	0.03056293E-01	-0.08730260E-05	0.12009964E-09	-0.06391618E-13	-0.02989921E+06
N ₂	0.02926640E+02	0.14879768E-02	-0.05684760E-05	0.10097038E-09	-0.06753351E-13	-0.09227977E+04
O ₂	0.03697578E+02	0.06135197E-02	-0.12588420E-06	0.01775281E-09	-0.11364354E-14	-0.12339301E+04
CO	0.03025078E+02	0.14426885E-02	-0.05630827E-05	0.10185813E-09	-0.06910951E-13	0.14268350E+05
H ₂	0.02991423E+02	0.07000644E-02	-0.05633828E-06	-0.09231578E-10	0.15827519E-14	-0.08350340E+04

Tableau 1: les coefficients de Gordon et Mac Brid (1000 < T < 5000 (°K)).

Équation de dissociation :



Pour calculer la constante d'équilibre, on utilise la formule suivante [7] :

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

Avec 400 < T < 3200 (°K).

Combustible	Formule	Enthalpie de formation (Kj/Kmol)	Tada (°K)	cp(kj/kg.K)	} (w/m.K)
Methane	CH ₄	-74873	2226	2.225	3.42E-2
Propane	C ₃ H ₈	-103847	2267	4.6448	2.5E-2
n-decane	C ₁₀ H ₂₂	-242284	2277	1.68506	1.2087E-2
Benzène	C ₆ H ₆	82927	2342	-	-

Tableau 2 : Propriétés thermodynamiques des combustibles et température adiabatique de la flamme (mélange stoechiométrique) des combustibles dans des conditions normales (0.1Mpa et 298.15 K) [3].

Fuel	Facteur pré exponentiel A^a (mole/cm ³) ^{1-i-j} *S ⁻¹	Temperature d'activation Ea/R (°K)	i	j
CH ₄	8.3E+05	15098	-0.3	1.3
C ₃ H ₈	8.6E+11	15098	0.1	1.65
C ₁₀ H ₂₂	3.8E+11	15098	0.25	1.5
C ₈ H ₁₈	7.2E+12	20131	0.25	1.5
C ₂ H ₆	1.1E+12	15098	0.1	1.65

Tableau 3: paramètre de taux de réaction pour une réaction élémentaire [3].

Gaz	Masse molaire	Cp (kj/kg.K)	λ (W/m.K)	ρ (kg/m ³)
Air	29	1.186	8.09E-2	1.16
O ₂	32	1.125	8.71E-2	0.2960
CO	28	1.222	2.22E-2	1.25
CO ₂	44	1.259	2.093E-2	1.9768
H ₂ O	18	2.6042	2.419E-2	0.577

Tableau 4 : propriétés thermiques des éléments de réaction chimique à une température moyenne 1300 (K) [14].

Les résultats expérimentaux de la vitesse de propagation de la flamme [5]

richesse \ combustible	0.8	0.9	1	1.1	1.2
Méthane (CH ₄)	30	38.3	43.4	44.7	39.8
Propane (C ₃ H ₈)		42.3	45.6	46.2	42.3
Benzène (C ₆ H ₆)	39.4	45.6	47.6	44.8	40.2

Tableau 5 : vitesse (cm/s) de déflagration laminaire pour divers combustible en mélange avec l'air et pour différentes valeurs de la richesse.

	AVBP V5.0	PREMIX
Energie interne	$e_s = \sum_1^n Y_k \epsilon_{s,k} = \sum_1^n Y_k \int_{T_0}^T C_{vk}(T) dT - \frac{RT_0}{M}$	$e_s = \sum_1^n Y_k \int_{T_0}^T C_{vk}(T) dT - \frac{RT_0}{M}$
Enthalpie sensible	$h_s = \sum_1^n Y_k h_{s,k} = \sum_1^n Y_k \int_{T_0}^T C_{pk}(T) dT$	$h_s = \sum_1^n Y_k \int_{T_0}^T C_{pk}(T) dT$
Diffusion moléculaire	$D_k = \frac{\mu}{Sc_k}$ pour $k = 1, n$, Loi de Fick (Eq. 2.3)	$D_k = \frac{1 - Y_k}{\sum_{j \neq k} \lambda_{kj} / L_{jk}}$ pour $j \neq k$, $V_k = V_k + V_c$ avec $V_k = -D_k \frac{1}{X_k} \frac{\partial Y_k}{\partial x}$
Vitesse de Correction	Loi de Fick, $V_c = -\rho \sum_1^n D_k \frac{\partial Y_k}{\partial x}$	$V_c = -\sum_1^n V_k V_k$
Flux de chaleur	$q = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x} + \rho \sum_1^n h_{s,k} D_k \frac{\partial Y_k}{\partial x}$	$q = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x} + \rho \sum_1^n h_k Y_k V_k$ avec $h_k = h_{s,k} + \Delta h_f^0$
Equation d'état	$\rho = \frac{P}{RT}$	$\rho = \frac{P_0}{RT}$
Pression	$P = \rho RT = \sum_1^n \rho_k \frac{R}{W_k} T$	$P = P_0 = cste$
Température	$T = f(e_s)$	$T = f(e_s)$

Tableau 06 : Différences entre les codes de calcul AVBP V5.0 et PREMIX

	AVBP V4.8	DC-PREMIX
Energie interne	$e_s = C_v T$, $C_v = cste$	$e_s = C_v T$, $C_v = cste$
Enthalpie sensible	$h_s = C_p T$, $C_p = cste$	$h_s = C_p T$, $C_p = cste$
Diffusion moléculaire	$D_k = cste$	$D_k = cste$ pour les réactifs
Vitesse de correction	aucune	aucune
Flux de chaleur	$q = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x}$	$q = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x}$
Equation d'état	$\rho = \frac{P}{R_0 T}$	$\rho = \frac{P}{R_0 T}$
Pression	$P = (\gamma - 1)(\rho E - \frac{1}{2} V^2)$	$P = P_0 = cste$
Température	$T = \frac{W(\gamma-1)}{\rho R} (\rho E - \frac{1}{2} V^2)$	$T = \frac{W(\gamma-1)}{\rho R} (\rho E - \frac{1}{2} V^2)$

Tableau 07 : Différences entre les codes de calcul AVBP V4.8 et DC-PREMIX

formule	carburant	M (kg/k.mol)	\bar{h}_f^0 (kj/k.mol)	\bar{g}_f^0 (kj/k.mol)	\bar{s}^0 (kj/k.mol-k)	HHV (kj/kg)	LHV (kj/kg)	T_{ad} (K)
CH ₄	Méthane	16.03	-74.8	-50.7	186.1	55.52	50.01	2226
C ₂ H ₂	Acetylene	26.03	226.2	209.2	200.8	49.92	48.22	2539
C ₂ H ₄	Ethene	28.05	52.28	68.18	219.8	50.13	47.16	2369
C ₂ H ₆	Ethane	30.06	-84.6	-32.8	229.4	51.90	47.48	2259
C ₃ H ₈	Propane	42.08	20.14	62.71	266.9	48.93	45.78	2334
C ₃ H ₈	Propane	44.09	-103	-23.4	269.9	50.36	46.35	2267
C ₄ H ₈	1-Butene	56.10	1.172	72.03	307.4	48.47	45.31	2322
C ₄ H ₁₀	n- Butene	58.12	-124	-15.7	310.0	49.54	45.74	2270
C ₅ H ₁₀	1-Pentene	70.13	-20.9	78.60	347.6	48.15	45.00	2314
C ₅ H ₁₂	n-Pentene	72.15	-146	-8.20	384.4	49.03	45.35	2272
C ₆ H ₆	Benzene	78.11	82.92	129.6	269.1	42.27	40.57	2342
C ₆ H ₁₂	1-hexene	84.16	-41.6	87.02	358.9	47.95	44.80	2308
C ₆ H ₁₄	n-hexene	86.17	-167	209.0	386.8	48.69	45.10	2273
C ₇ H ₁₄	1-Hptene	98.18	-62.1	95.56	424.3	47.81	44.66	2305
C ₇ H ₁₆	n-Hptene	100.2	-187	8.745	425.2	48.45	44.92	2274
C ₈ H ₁₆	1-Octene	112.2	-82.9	104.1	462.7	47.71	44.56	2302
C ₈ H ₁₈	n-Octene	114.2	-208	17.32	436.6	48.27	44.79	2275
C ₉ H ₁₈	1-Nonene	126.2	-103	112.7	501.2	47.63	44.47	2300
C ₉ H ₂₀	n-Nonene	128.2	-229	25.85	502.8	48.13	44.68	2276
C ₁₀ H ₂₀	1-Decene	140.2	-124	121.2	539.6	47.56	44.41	2298
C ₁₀ H ₂₂	n-Decene	142.2	-249	34.33	540.5	48.08	44.60	2277
C ₁₁ H ₂₂	1-Undeca	154.2	-144	129.8	578.6	47.51	44.36	2296
C ₁₁ H ₂₄	n-Undeca	156.3	-270	43.01	578.9	47.92	44.53	2277

Tableau 08: Tableau des propriétés des hydrocarbures [3]