

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE

MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE
LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

UNIVERSITE DE SAAD DAHLEB DE BLIDA
INSTITUT NATIONAL D'AERONAUTIQUE
DEPARTEMENT DE PROPULSION
OPTION PROPULSION

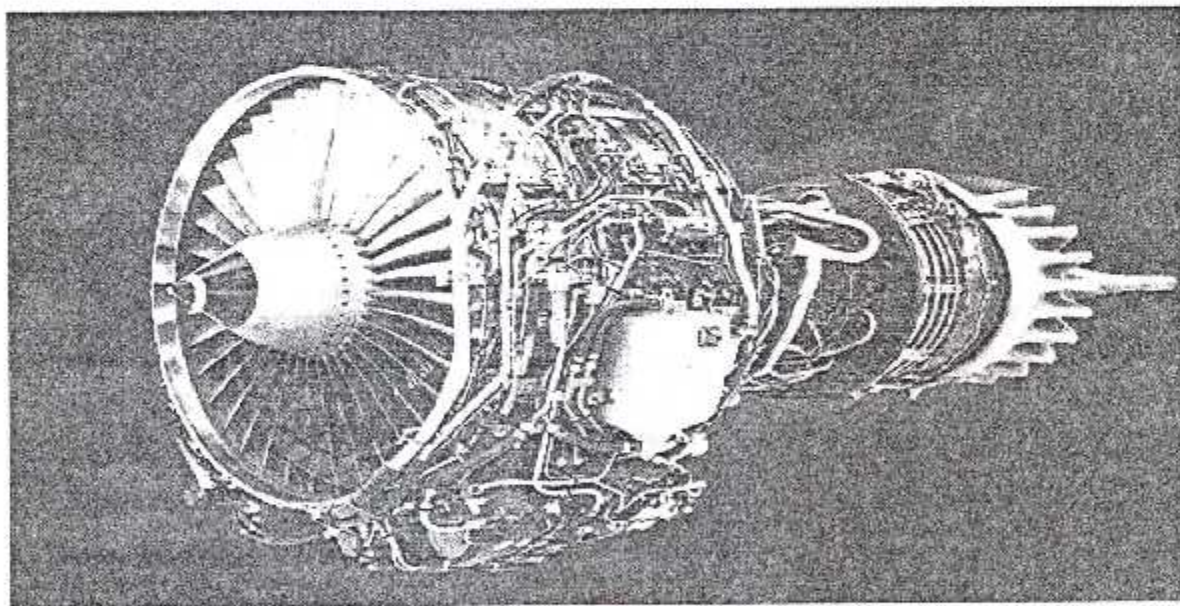


MEMOIRE DE FIN D'ETUDES

POUR L'OBTENTION DU DIPLOME DES ETUDES UNIVERSITAIRES
APPLIQUEES

THÈME

Effet De La Pression Sur La Combustion Des Hydrocarbures



Réalisé par :

SEKHRI ZEGGAR MOHAMED
BOULENOUAR EL WALID

Dirigé par :

Mv : A/BADREDDINE
Mv : AZZAZEN

PRODIGES 2001 / 2002

A decorative border of small, repeating floral motifs surrounds the entire page. The motifs consist of stylized leaves and small flowers, arranged in a continuous line.

REMERCIEMENT

Ce présent travail a été effectué sous l'assistance de notre promoteur monsieur I.BADREDDINE que nous tenant à lui exprimer notre profonde reconnaissance et sympathie qui malgré ces travaux il n'a jamais cesse de nous donner des conseil et de nous orienter vers la bonne direction

Nous tenants à remercier aussi notre copromoteur monsieur AZAZENE pour son aide malgré ces études.

Que tous ceux qui ont participe de près ou de loin à l'élaboration de ce mémoire, trouvé ici , nos sincères remerciements.

DEDICACE

Je dédie ce modeste travail :

- Y à mes parents qui m'ont toujours soutenu, encouragé et apporté une aide précieuse .
- Y à mon chaire oncle Abbou Mohamed pour son soutien morale et financière .
- Y à ma chaire sœur LAILA et mes frères Lotfi , M^{od} L'yacine, Ahmed Faiçal .
- Y à tous les professeurs de l'institut d'aéronautique.
- Y à tous nos collègues de l'université de Blida.
- Y à tous mes amis et plus particulièrement BOUAZZA et pour les famille Boulenouar, Abbou et Ben Slimane.

Mr : B. EL WALID

A ceux qui m'aime, je cite :

- Ma chère mère .
- Mon chère père .
- Mes chères frères et sœurs : ZINEB, HAYAT, HAMIDA, IMANE, AMMAR, RAMZI et HALA.
- Mon grand-père AMMAR surnommé SIFI.
- Mon oncle ABDELAH.
- Mon ami d'enfance CHARAF EDDINE
- Tous ceux qui m'ont connu à Blida.
- Toute la famille SEKHRI ZEGGAR

Mr : S. Z MOHAMED

SOMMAIRE

SOMMAIRE

<u>TITRE</u>	<u>PAGE</u>
INTRODUCTION	1
CHAPITRE 1 : GENERALITES	3
I-1 LES CHAMBRES DE COMBUSTIONS	
I-1-1 Définition	
I-1-2 Description	
I-1-3 But	4
I-1-4 Type de chambres	
I-1-4-1 Chambres individuelles	
I-1-4-2 Chambres annulaires	6
I-1-4-3 Chambres tubo-annulaires (Mixtes)	7
I-2 LES DIFFERENTS TYPES DE COMBUSTIBLES	9
I-2-1 Combustibles solides	
I-2-2 Combustibles gazeux	
I-2-3 Combustibles liquides	
I-3 LES COMBURANTS	10
I-3-1 L'oxygène	
I-3-2 Le fluor	11
I-3-3 L'acide nitrique	
I-3-4 L'eau oxygénéé (pétroxyde d'oxygène)	
I-4 LES HYDROCARBURES	
I-4 -1 Classification générale des hydrocarbures	
I-4 -1-1 Les hydrocarbures saturés	12
I-4 -1-1-1 Les paraffines	
I-4 -1-1-2 Les naphtes	
Exemple	
I-4 -1-2 Les hydrocarbures insaturés	13
I-4 -1-2-1 Les oléfines	
Exemples	
A/ Alcènes	
A-1/ Mono oléfines	
A-2/ Poly oléfines	
B/ Cyclènes	14
I-4 -1-2-2 Les acétyléniques	
I-4 -1-3 Les hydrocarbures aromatiques	
Exemple	15
CHAPITRE II : LA COMBUSTION	17
II-1 COMBUSTION DES GAZ	
II-2 PHÉNOMÈNE DE COMBUSTION	
II-2-1 Propagation	18
II-2-2 L'auto-inflammation	
II-2-3 Température	19

II-2-4	Limite d'inflammabilité	20
II-2-5	Enthalpie et énergie interne de combustion	21
II-2-5-1	Enthalpie de formation	22
II-2-5-2	Enthalpie sensible	23
II-2-6	Expression de l'entropie	
II-2-6-1	Entropie en fonction des variables (T et V)	24
II-2-6-2	Entropie en fonction des variables (T et P)	
II-2-6-3	Entropie en fonction des variables (V et P)	25
II-3	CARACTERISTIQUES FONDAMENTALES DE LA COMBUSTION DES GAZ	26
II-3-1	Pouvoir calorifique	
II-3-2	Densité par apport à l'air	
II-3-3	Dioxyde de carbone total	
II-3-4	Air stoechiométrique de combustion	27
II-3-5	Pouvoir fumigène	
II-3-6	Teneur maximal en CO_2 des produits de combustion secs	
 CHAPITRE III : Température et produits de fin de combustion		
III-1	EQUATIONS D'ETAT DES GAZ	28
III-1-1	Les gaz parfaits	
III-1-1-1	Définition des gaz parfaits	
	- Première condition	
	- Deuxième condition	29
	- Troisième condition	
	Remarque 1	
	Remarque 2	
III-1-2	Les gaz réels	
III-1-2-1	Equation caractéristique des fluides réels	30
III-1-3	Comparaison entre l'équation d'état des gaz parfait et celle des gaz réels	31
III-2	LA TEMPERATURE D'EQUILIBRE	
III-2-1	L'importance de la température d'équilibre	
III-2-2	Mécanisme de la réaction	
III-2-2-1	Position du problème	
III-2-2-2	Hypothèses	32
III-2-2-3	Mécanisme de la réaction	
III-2-3	Méthodes de résolutions	34
	Remarque	
III-2-4	Détermination de la composition à l'équilibre	35
III-2-5	Détermination de la température de fin de combustion	39
 CHAPITRE IV : RESULTATS ET INTERPRETATIONS		
IV	PROGRAMME DE CALCUL DES PROPRIETES THERMODYNAMIQUES DES ESPECES CHIMIQUES	40
IV-1	CALCUL DES CONSTANTS D'EQUILIBRES	
	Exemple	
VI-2	CALCUL DE LA TEMPERATURE DE FIN DE COMBUSTION	41
	Exemple 01	

Exemple 02	43
VI-3 CALCUL DES FRACTIONS MOLAIRES	
Exemple 01	
Exemple 02	45
Exemple 03	46
VI-4 LES GRAPHES	48

CONCLUSION

ANNEXES

BIBLIOGRAPHIE

INTRODUCTION

INTRODUCTION

La combustion est et restera encore longtemps la principale source d'énergie.

La combustion est une réaction chimique exo-énergétique avec O₂, c'est la seule réaction utilisée en aéronautique avec l'air comme comburant, et dans les fusées avec des comburants riches en O₂.

La combustion est le phénomène au cours duquel l'énergie potentielle de l'ensemble combustible - comburant est transformée en énergie utilisable sous forme de chaleur.

Jusqu'à présent, les foyers de combustion ne posaient pas les problèmes qu'on rencontre dans les réacteurs :

_ haute énergie sous très faible volume .

_ gaz circulant à grande vitesse, ce qui rend difficile la stabilité de la réaction .

_ la puissance libérée par unité de volume dans les foyers est élevée de l'ordre de 70×10^6 (K cal / m³ / h) dans un turboréacteur .

_ la température s'élève aux environs de 1800 °C à 2000 °C à l'extrémité de la flamme la turbine et les matériaux constituant la chambre de combustion ne résisteraient pas longtemps .

Savoir que la température de fin de combustion à laquelle le matériaux soit résistant, sera la première approximation nécessaire au calcul des transferts

thermiques, et pour laquelle aussi la combustion produit un mélange gazeux non polluant est le but de cette étude,

Pour cela nous allons présenter la méthode dite des « ENTHALPIES TOTALES » qui sert à déterminer la température d'équilibre et la composition Du mélange des gaz brûlés suivant des différentes hypothèses d'équations d'états en utilisant un programme de calcul en langage « Fortran » pour laquelle l'enthalpie du propergol soit égale à l'enthalpie des gaz brûlés.

En adoptant la méthode numérique dite : «DICHOTOMIE», qui avec Des itérations permet de résoudre l'équation donnant l'équilibre des enthalpies du propergol et des gaz brûlés.

CHAPITRE 1

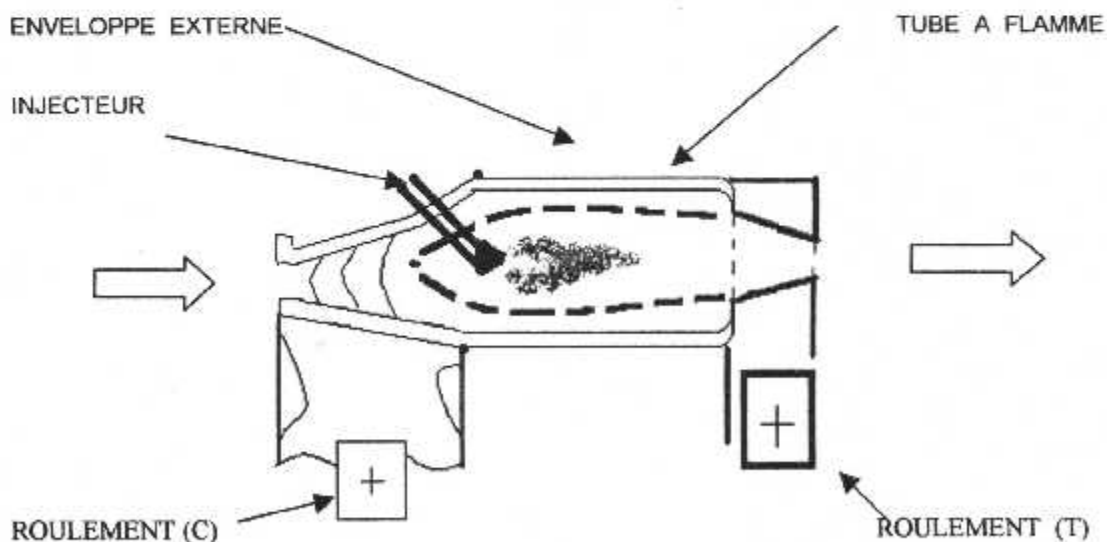
I-1 LES CHAMBRES DE COMBUSTIONS**I-1-1 DEFINITION**

La chambre de combustion est un élément où se réalise la réaction de combustion, en d'autre terme, c'est l'endroit où le fluide venant du compresseur à pression (P_c) reçoit une quantité de chaleur pour augmenter son énergie (enthalpie). Cette dernière récupérée en partie par les turbines et le reste est utilisé pour accélérer les gaz d'échappements.

I-1-2 DESCRIPTION

Elle se compose d'une façon générale de :

- Un carter intermédiaire de raccordement à la veine d'air du compresseur (contient le matériel d'injection).
- Un ou plusieurs tubes à flamme dans le ou les quels séjournera la flamme.
- Une enveloppe externe et une enveloppe interne dans la quelle passe l'arbre du moteur.
- Un carter de raccordement au premier étage de turbine.



I-1-3 BUT

Elle doit pouvoir assurer le mélange carburant et oxygène (contenu dans l'air) et permettre la transformation la plus complète que possible de l'énergie chimique du mélange en énergie calorifique (moins d'imbrûlés possible donc moins polluant) et cela dans toute la plage du vol.

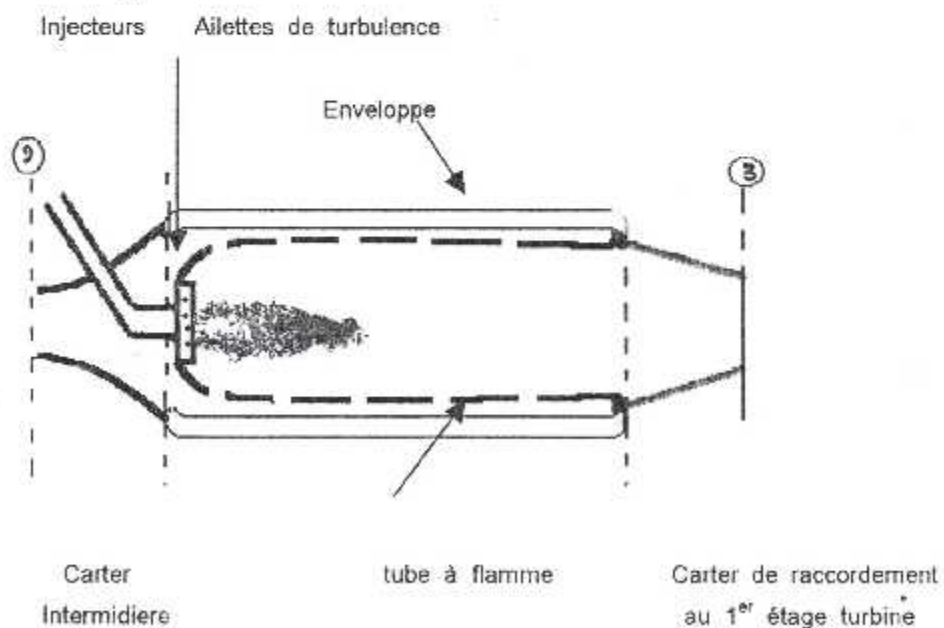
I-1-4 TYPES DE CHAMBRES DE COMBUSTION

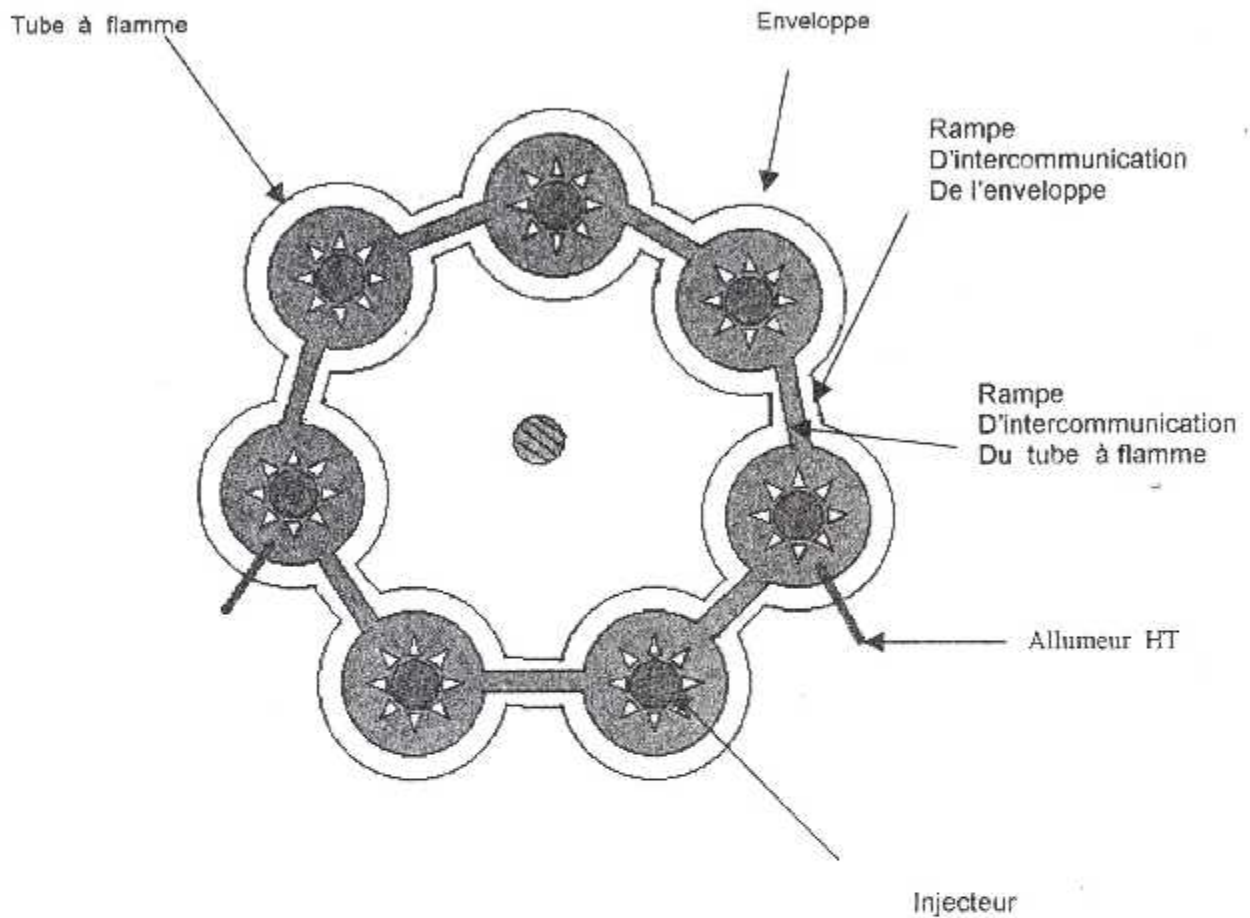
Suivant la forme de la chambre de combustion, on distingue trois types de chambres qui sont :

- Chambres individuelles (Séparées).
- Chambres annulaires .
- Chambres tubo-annulaires (mixtes).

I-1-4-1 CHAMBRES INDIVIDUELLES

Nous allons représenter cette dernière à l'aide d'une coupe transversale et longitudinale .

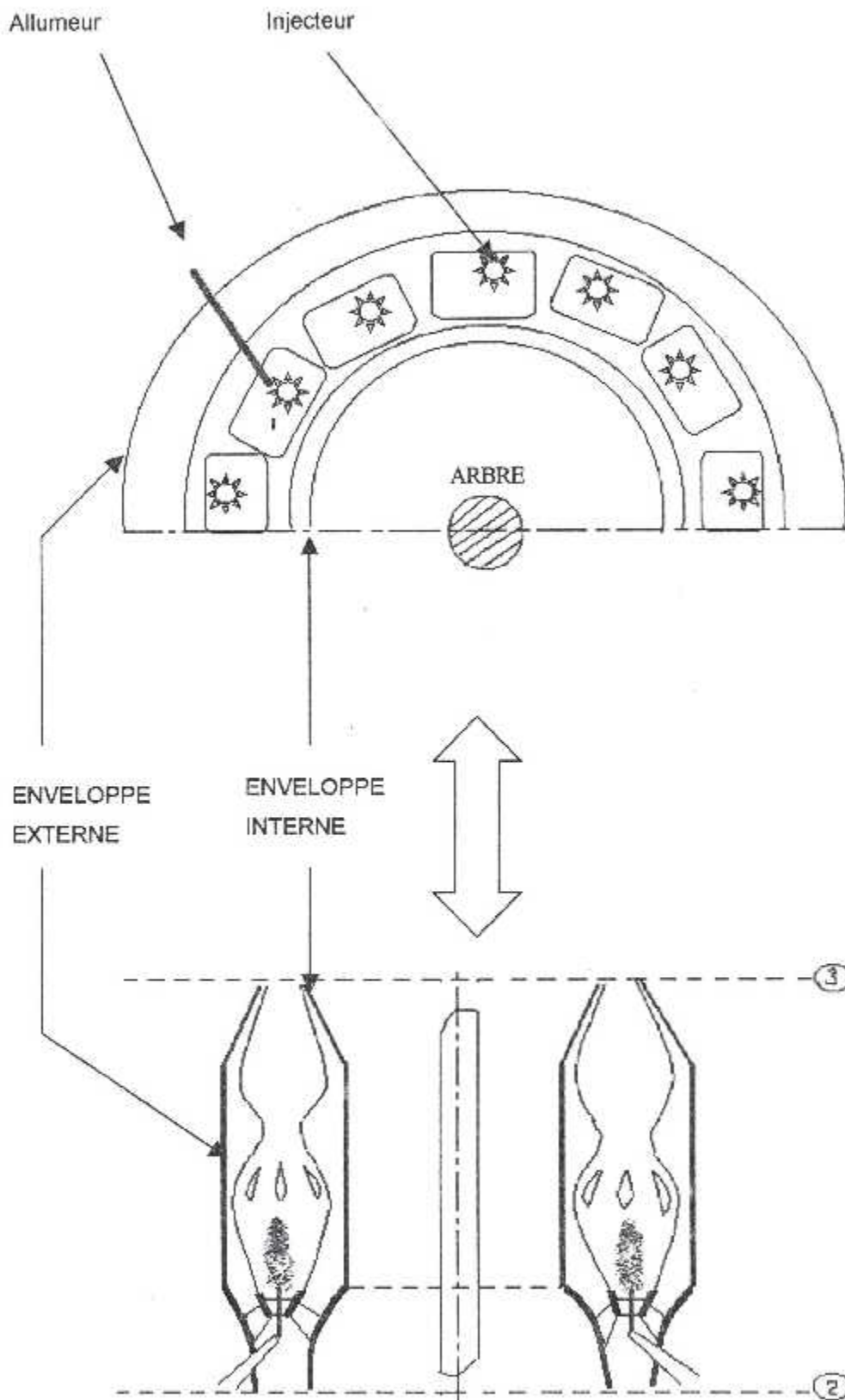




Coupe transversale

Les chambres individuelles sont réparties autour de l'axe longitudinal du moteur. Elles sont reliées entre elles par une rampe d'inter-communication qui permet la propagation de la flamme au démarrage car seulement deux chambres sont équipées d'allumeur.

I-1-4-2 CHAMBRES ANNULAIRES



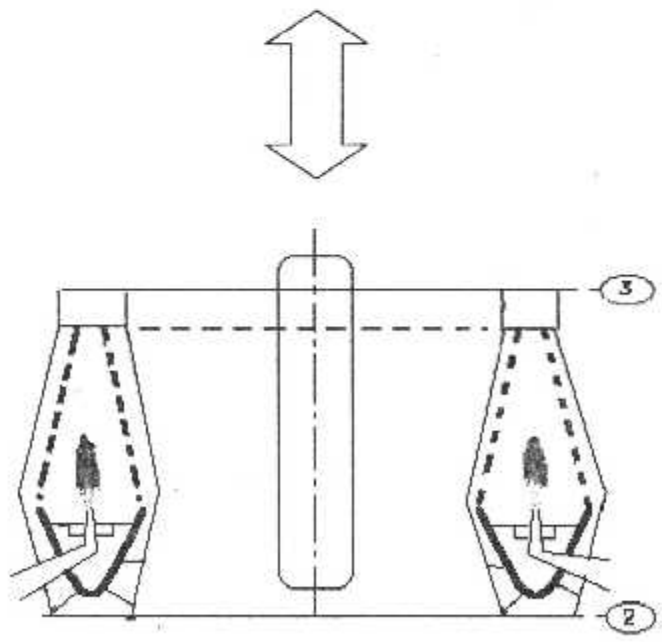
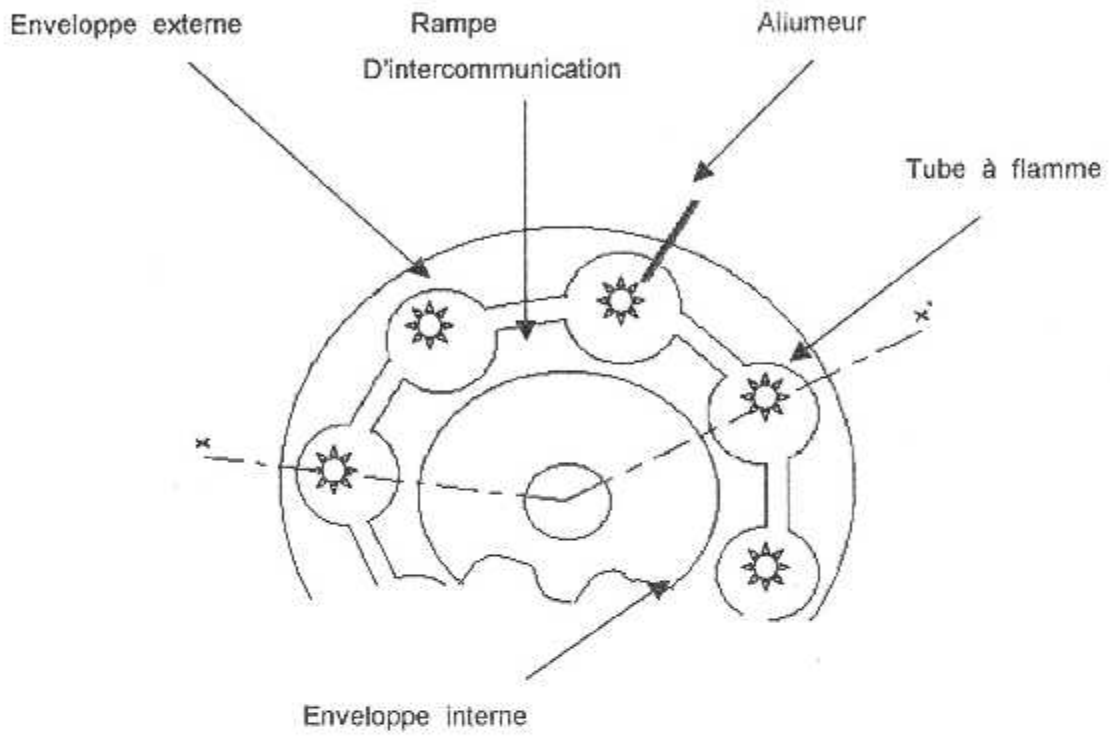
Ce type de chambre ne comporte qu'une enveloppe externe et une enveloppe interne, les deux enveloppes se présentent sous la forme de deux cylindres concentriques ayant leurs axes confondus avec celui du réacteur.

Le tube à flamme (anneau) se présente également sous la forme de deux tôles cylindriques concentriques.

I-1-4-3 CHAMBRES TUBO-ANNULAIRES (MIXTES)

Ce type de chambre résulte d'un compromis entre les deux types précédentes. Cette chambre est constituée par des tubes à flammes réunis entre eux par des tubes d'intercommunications enfermés dans deux enveloppes concentriques externes et internes.

Ce type de chambre se distingue du type de chambre individuelle.



I-2 LES DIFFERENTS TYPES DE COMBUSTIBLES**I-2-1 COMUSTIBLES SOLIDES**

C'est fondamentalement le bois, soit sous forme actuelle, soit sous sa forme fossile où il devient charbon.

Il est utilisé sur tout dans l'industrie.

I-2-2 COMBUSTIBLES GAZEUX

Sur tout employés dans les régions voisines des centres de production de gaz naturel. Il existe aussi (comme carburant gazeux de remplacement) le gaz de gazogène obtenue à partir du charbon de bois, et le gaz de pétrole liquéfié (G.P.L).

Le combustible gazeux est introduit avec l'air de charge sous forme homogène et le mélange est enflammé par un jet de combustible d'appoint destiné à provoquer l'inflammation du mélange (air / gaz).

Les gaz répondants le mieux à cette mission sont le Méthane et le Propane, leur comportement dans le moteur à étudié d'une part, en mélange pauvre (richesse 0.65).

L'étude s'étend au comportement de gaz pour différentes températures du mélange aspiré, ce qui modifie la température de la charge gazeuse en fin de compression.

I-2-3 COMBUSTIBLES LIQUIDES

La croyance populaire a toujours attribué aux bitumes, naphtes pétroles, une origine totalement inorganique...ils étaient, bien évidemment de même nature que le roche .

Le nom même de pétrole (huile de pierre) liquide.

Les pétroles sont doués (pouvoir rotatoire) d'un rayon de lumière naturelle comme une onde radio.

Il existe ainsi (comme carburants liquides) de loin les plus couramment utilisés dans les moteurs de (véhicules automobiles) et dans les moteurs d'avion. Ce sont :

- Les essences produites par distillation ou cracking des pétroles bruts.
- Le gasoil et fioul extraits des pétroles bruts. Le gasoil est utilisé dans les moteurs « diesel » routiers.
- Les benzols et les alcools qui sont des carburants de remplacement ou d'addition.

I-3 LES COMBURANTS

La plupart des combustions de types industriel et domestique font appel à l'utilisation de l'air atmosphérique comme comburant. Mais certains applications requérant l'emploi d'autre oxydants énergétiques qui sont l'oxygène, le fluor et les composés porteurs du fluor et oxygène.

Parmi les oxydants les plus importants, on peut citer :

I-3-1 L'OXYGENE

Sous forme liquide, il a une couleur bleutée et est obtenu par distillation de l'air liquide. Pour produit 1 Kg d'oxygène liquide, on dépense environ 1 kW d'énergie électrique.

L'oxygène liquide est très énergétique surtout s'il est employé avec des hydrocarbures ou de l'hydrogène liquide.

L'oxygène liquide a l'avantage de n'être ni toxique ni corrosif ; ses effets sur la peau sont comparable à des brûlures.

I-3-2 LE FLUOR

Sous sa forme liquide ou gazeuse, il a une couleur jaunâtre. Il est obtenu par électrolyse d'un mélange HF ou KF, d'où son prix de revient assez élevé. Le fluor présente le grand avantage d'être le plus énergétique de tous les oxydants utilisés.

I-3-3 L'ACIDE NITRIQUE

A l'état liquide, il est incolore et il est préparé par hydratation du peroxyde d'azote. Sa manipulation exige plusieurs précautions à cause de sa toxicité, de son pouvoir très corrosif et des brûlures qu'il peut occasionner à la peau.

I-3-4 L'EAU OXYGENEE (Péroxyde d'oxygène)

Sous forme liquide, c'est un produit incolore. Malgré la facilité de production, il présente des problèmes de stockage, de corrosion et de stabilité. Ce composé s'enflamme facilement sous l'effet de certaines poussières.

Le peroxyde d'oxygène n'est pas toxique mais peut provoquer des brûlures sur la peau.

I-4 LES HYDROCARBURES

Les produits pétroliers sont constitués essentiellement d'hydrocarbures; nous rappellerons brièvement quelques propriétés de ces types de composés.

I-4-1 CLASSIFICATION GENERALE DES HYDROCARBURES

Nous savons qu'il existe plusieurs produits organiques, les hydrocarbures apparaissent comme les plus simples car ils comportent

la moindre variance d'atomes, associés uniquement par des liaisons du type carbone-carbone, ou carbone-hydrogène.

On distingue trois grandes familles de composés, présentées dans le tableau (1-1)

I-4-1-1 LES HYDROCARBURES SATURÉS

Ce sont des hydrocarbures qui ne comportant que des liaisons carbone-carbone simples. Ils se divisent en deux catégories.

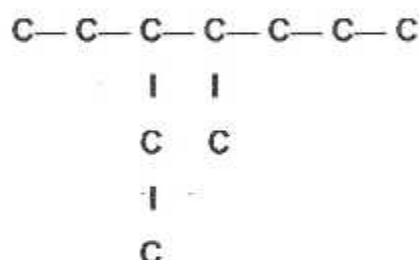
I-4-1-1-1 LES PARAFFINES

Ou alcane à chaînes carbonées ouvertes ; ces hydrocarbures ont pour formule générale « C_n H_{n+2} ». Il peuvent être constitués :

- Soit de chaînes droite.



- Soit de chaînes ramifiées.

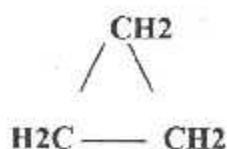


I-4-1-1-2 LES NAPHTÉS :

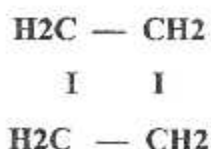
Ou cyclanes dans les quels les chaînes se ferment sur elles-mêmes pour former des cycles. Ces hydrocarbures ont pour formule générale « C_n H_{2n} ».

Les naphènes sont désignés par la préfixe « cyclo » du nom de l'alcane à même nombre de carbones.

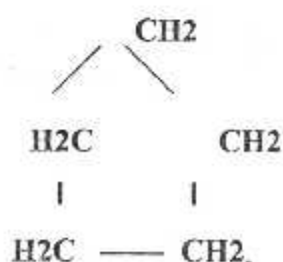
EXEMPLES



Cyclopropane



Cyclobutane



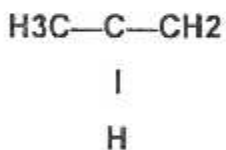
Cyclopentane

I-4-1-2 LES HYDROCARBURES INSATURÉS

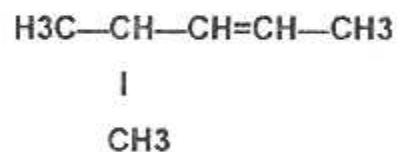
Ce sont des hydrocarbures qui comportent des carbone-carbone « doubles ou triples ». Ils se répartissent eux même en deux groupes distincts :

I-4-1-2-1 LES OLÉFINES

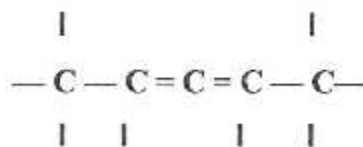
Ce sont des hydrocarbures insaturés avec une ou plusieurs doubles liaisons appelées dans la nomenclature officielle, alcènes ou cyclènes selon qu'elles se présentent sous forme de chaînes ou de cycles.

EXEMPLES**A/ ALCÈNES****A-1/ Mono oléfines**● **Chaîne droite**

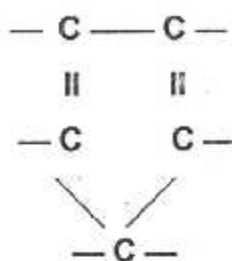
Propylène (propène)

● **Chaîne ramifier**

Méthyl-4 pentène-2

A-2/ Polyoléfines

Pentène

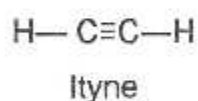
B/ CYCLÈNES

Cyclopentène

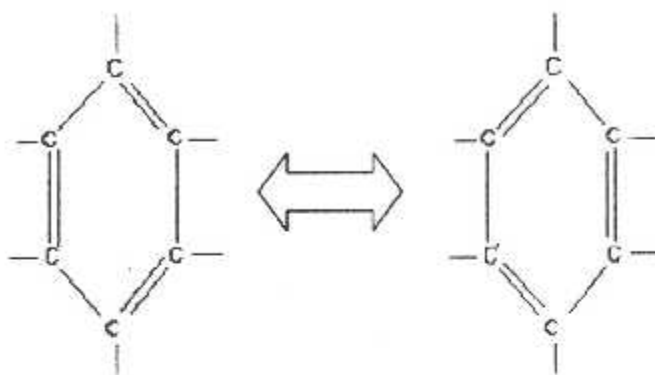
I-4-1-2-2 LES ACÉTYLÉNIQUES

Ce sont des hydrocarbures insaturés caractérisés par l'existence d'au moins une triple liaisons appelées dans la nomenclature officielle, alcynes. Dans cette famille, les composés cycliques que l'on appellera cyclynes, sont très rares.

Ils ont pour formule générale : $C_n H_{2n-2}$

EXEMPLEI-4-1-3 LES HYDROCARBURES AROMATIQUES

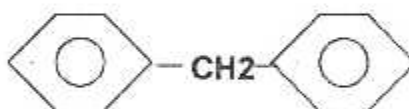
Ce sont des hydrocarbures qui contiennent un ou plusieurs cycles insaturés à six atomes de carbones du même type que celui qui constitue le benzène.

EXEMPLE

C_6H_6
BENZÈNE




Diphényle



Diphénylméthane

TABLEAU (I-1). Classification générale des hydrocarbures :

TYPE DE FAMILLE	DESIGNATION COURANTE	DESIGNATION OFFICIELLE	MOTIF STRUCTURALE	FORMULE
SATURÉS	Paraffines	Alcanes	$\begin{array}{c} \quad \\ -C-C- \\ \quad \end{array}$	$C_n H_{2n+2}$
	Naphtènes	Cyclanes	Cycle à 3,4, 5 ou 6 Carbones	$C_n H_{2n}$
INSATURÉS	Oléfines	Alcènes	$\begin{array}{c} \quad \\ -C=C- \end{array}$	$C_n H_{2n}$
	Acétyléniques	Alcynes	$-C \equiv C-$	$C_n H_{2n-2}$
AROMATIQUES	Aromatiques	—		$C_n H_{2n-6}$

CHAPITRE 2

II LA COMBUSTION

II-1 COMBUSTION DES GAZ

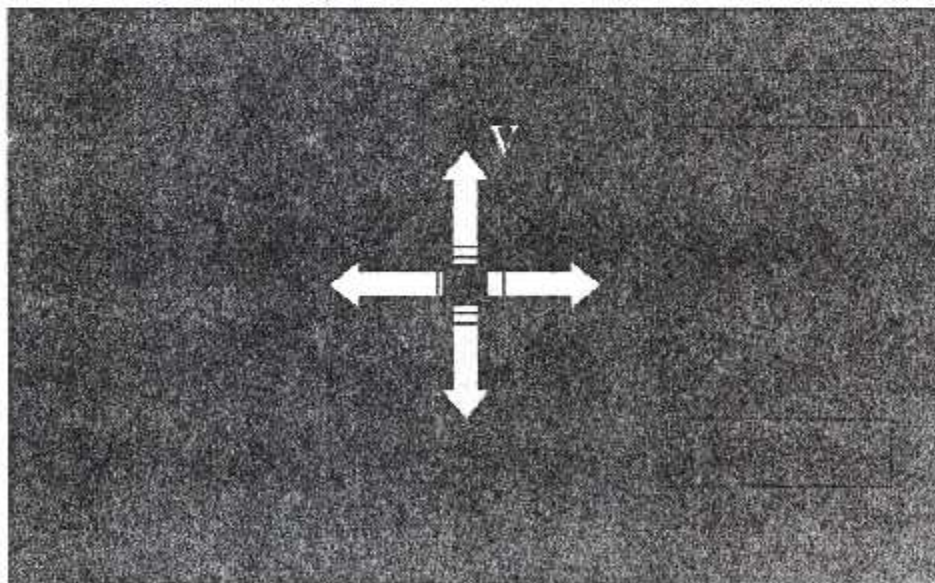
La combustion est une réaction chimique d'oxydation d'une substance inflammable (combustible), avec un oxydant (comburant).

Cette réaction est généralement exothermique.

Les combustibles gazeux rencontrés dans la pratique sont des mélanges de gaz élémentaires combustibles ou non. Il ne contient jamais de carbone libre, celui-ci est toujours combiné, soit à l'hydrogène pour former des hydrocarbures saturés ou non, soit à l'oxygène.

II-2 PHÉNOMÈNE DE COMBUSTION

La combustion peut être amorcée par une source d'énergie ponctuelle, et la chaleur dégagée par la réaction, permet à la combustion de se propager dans la masse du mélange combustible-comburant.



II-2-1 PROPAGATION :

L'inflammation du mélange se propage avec une vitesse qui dépend de la composition du mélange, de sa température, de sa pression, de son agitation et parfois de la forme et des dimensions de l'enceinte. Cette propagation peut s'effectuer suivant deux mécanismes différents :

- Détonation
- Déflagration

Dans la détonation, la transmission de chaleur s'effectue par l'intermédiaire d'une onde de choc qui provoque une brusque compression adiabatique des couches gazeuses, entraînant l'auto-inflammation du mélange. La vitesse de propagation est constante et très grande (de 1 à 4 KM/S).

Dans la déflagration on admet que la transmission de la chaleur se fait par conduction, rayonnement et convection de la tranche enflammation à la tranche voisine. La vitesse de propagation est subsonique (de l'ordre de 30 cm à quelque mètres / s).

II-2-2 L'AUTO-INFLAMMATION

Si on porte le mélange initial à des températures ou des pressions de plus en plus élevées, on atteint une température ou la réaction d'oxydation s'emballe est se transforme en combustion vive. C'est par définition l'auto-inflammation.

La température minimale à la quelle elle peut se produire est appelée (température d'auto-inflammation). Ce phénomène ne peut

apparaître que dans un domaine d'une température et de pression définie.

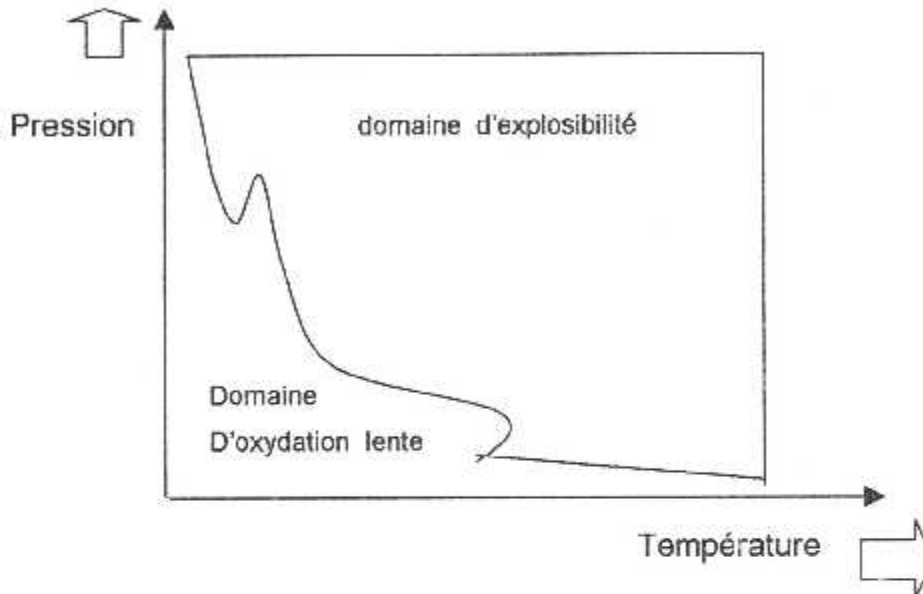


fig. (2-2) Représentation schématique des domaines d'explosivité
Un mélange Hydrocarbure / air

Il y a une relation inversement proportionnelle entre la pression minimale de l'auto-inflammation et la température minimale de l'auto-inflammation.

II-2-3 TEMPÉRATURE

Deux types de températures sont caractéristiques de la combustion : la température théorique de combustion et la température de l'auto-inflammation (température initiale).

- La température théorique de combustion est la température maximale susceptible d'être obtenue avec un combustible et dépend de la nature de comburant.
- La température d'auto-inflammation d'un mélange est la température à laquelle il faut amener le mélange pour qu'il

s'enflamme spontanément sans autres sources d'inflammation.

COMBUSTIBLE	Température D'auto-Inflammation (K)	Température D'auto-Inflammation (K)
	Avec L'oxygène pur	Avec L'air
Hydrogène	833	843
Ammoniac	-	923
Oxyde de carbone	863	903
Méthane	828	853
Propane	743	753
Ethylène	758	793
Acétylène	568	593
n-Hexane	-	533
n-Heptane	-	508
n-Octane	-	493
Iso-octane	-	943
Benzène	-	893
Acétaldéhyde	423	503
Ether éthylique	453	463
Acide acétique	-	848
Acétone	-	833

TABLEAU (II-1) : Température D'auto-Inflammation De Quelques Combustibles

II-2-4 LIMITE D'INFLAMMABILITÉ :

Un mélange gazeux peut s'enflammer que si la proportion de gaz combustible dans le mélange combustible-comburant est compris entre deux limites d'inflammabilité :

- La limite inférieure qui correspond à un mélange pauvre en Combustible.
- la limite supérieure qui correspond à un mélange riche en combustible.

La limite d'inflammabilité dépend de nombreux facteurs,

notamment de l'énergie d'inflammation, de la direction et du sens de la propagation de la flamme, des dimensions de l'enceinte, et de l'humidité.

Les limites pour les mélanges gazeux peuvent se calculer par la loi de « LECHATELIER »

$$1/L = \sum N_x / L_x$$

avec :

L : Limite d'inflammabilité du mélange.

L_x : Limite d'inflammabilité du gaz x.

N_x : Concentration relative du gaz x.

II-2-5 ENTHALPIE ET ÉNERGIE INTERNE DE COMBUSTION

L'enthalpie de combustion est définie comme la différence entre l'enthalpie des produits et celle des réactifs, l'ors qu'une combustion complète se produit à une température et une pression données on a :

$$H_{rp} = H_p - H_r$$

L'énergie interne de combustion est définie de façon semblable.

$$U_{rp} = U_p - U_r$$

On utilise souvent l'expression « pouvoir calorifique » ou « chaleur de réaction » pour désigner la chaleur perdue par la chambre de combustion, dans le cas d'une évolution à pression constante, le premier principe permet de conclure que cette chaleur est égale à la valeur négative de l'enthalpie de combustion.

Dans le cas d'une évolution à volume constant, la perte de la chaleur est égale à la valeur négative de l'énergie interne de combustion.

Le premier principe permet dans tous les cas de faire le bilan de l'énergie ; individualisant une certaine masse de gaz subissant une évolution.

On pourra toujours écrire que : la variation de son énergie interne est égale à la différence des quantités algébriques de chaleur reçue et des quantités algébriques de travail fourni ; en effet.

$$\Delta U = C_p \cdot \Delta T - P \cdot (\Delta V) \text{ à } P = \text{cte}$$

D'après les définitions de l'enthalpie : $H = U + PV$, on peut écrire.

$$H = U + PV \text{ à } p = \text{cte}$$

$$H = C_p \cdot T - PV + PV = C_p \cdot T$$

II-2-5-1 ENTHALPIE DE FORMATION

Dans les tables thermodynamiques, on peut trouver directement la valeur de ΔH°_{298K} pour certaines réactions, en particulier les enthalpies de formation des corps simples étant nulles, si l'enthalpie de formation d'un composé est négative, ce composé est plus stable que ses éléments et si l'enthalpie de formation est positive, le composé est moins stable.

En comparant les composés et le plus stable est celui qui aura l'enthalpie de formation la plus faible, par exemple :

$SO_{2(g)}$ ($\Delta H^\circ_{FSO_2} = -70,96 \text{ K cal / mole}$) est moins stable que :

$\text{SO}_{3(g)}$ ($\Delta H_{F\text{SO}_3}^\circ = -94,54 \text{ K cal/ mole}$)

Le méthane ($\Delta H_F^\circ = -17,89$) est plus stable que l'éthylène

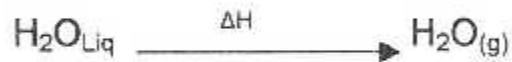
($\Delta H_F^\circ = +12,50$)

On remarque que l'état physique du composé obtenu est précisé.

On voit par exemple, que $\Delta H_{F(\text{H}_2\text{O})}^\circ (g) = -57,80$ et

$\Delta H_{F(\text{H}_2\text{O})}^\circ (L) = -68,32$.

La différence provient de l'état physique de l'eau.



$$\Delta H = \Delta H_{F\text{H}_2\text{O}(g)}^\circ - \Delta H_{F\text{H}_2\text{O}(L)}^\circ$$

Soit $\Delta H = -57,8 - (-68,32) = 10 \text{ K cal / mole}$.

Fournir 10 K calories. Pour transformer une mole d'eau liquide en une mole d'eau à l'état vapeur (gazeux).

II-2-5-2 ENTHALPIE SENSIBLE

L'enthalpie sensible = $\int \text{Cp} \cdot dt$ (en K cal / mole)

II-2-6 EXPRESSION DE L'ENTROPIE

Ces expressions seront obtenues par combinaison du premier principe de la thermodynamique, nous choisirons d'établir ces nouvelles relations un processus réversible.

S'agissant de la variation d'une fonction d'état de chemin choisi importe peu qu'il soit réversible ou irréversible. Rappelons que pour un processus réversible, et la température du système est la même que la température du système extérieur.

II-2-6-1 ENTROPIE EN FONCTION DES VARIABLES (T et V)

Le premier principe s'exprime par l'égalité :

$$dU = \delta Q + \delta W$$

$\delta Q/T = dS$ pour un processus réversible et $\delta W = -PdV$, d'où l'on tire :

$$dU = TdS - PdV.$$

Si le système considéré est gazeux (gaz parfait), cette expression s'écrit puisque.

$$dU = C_v.dT, \text{ et } P = RT/V \text{ donc : } C_v.dT = TdS - PdV \text{ et } dS = C_v.dT/T + RdV/V$$

S étant une fonction d'état, cette nouvelle expression de l'entropie est valable pour une transformation réversible ou irréversible.

On voit donc que l'entropie liée à une variation de volume à température constante, sera donnée par :

$$dS = RdV/V \text{ à } V = \text{cte}$$

II-2-6-2 ENTROPIE EN FONCTION DES VARIABLES (T et P)

On peut exprimer l'enthalpie en fonction de S et P.

$$H = U + PV \text{ et } dH = dU + PdV + VdP$$

$$dU = TdS - PdV \text{ soit } dH = TdS + VdP$$

Pour un système gazeux (gaz parfait) on trouve que :

$$dH=C_p.dT \text{ soit } C_p.dT=TdS+VdP \text{ et } dS=C_p.dT/T-RdP/P$$

Car : $V=RT/P$

La variation d'entropie liée à une variation de pression à température constante, sera donnée par :

$dS=C_p.dT/T$ si la pression reste constante.

II-2-6-3 ENTROPIE EN FONCTION DES VARIABLES (V et P)

Considérons les deux nouvelles expressions de dS établies plus haut, On peut établir une autre relation de l'entropie en fonction des variables V et P , s'agissant du même système, on peut écrire alors :

$$dS=C_v.dT/T+R.dV/V=C_p.dT/T-R.dP/P \text{ soit :}$$

$$R.dV/V=(C_p-C_v).dT/T-R.dP/P$$

$C_p-C_v=R$ (relation de REGNANLT) ce qui revient à dire que :

$$dT/T=dV/V+dP/P$$

Remplaçons la valeur de dT/T trouvée dans l'une ou l'autre des expressions de dS , il vient :

$$dS=C_p.dV/V+C_p.dP/P-R.dP/P$$

$$dS=C_p.dV/V+C_v.dP/P$$

II-3 CARACTÉRISTIQUES FONDAMENTALES DE LA COMBUSTION DES GAZ

II-3-1 POUVOIR CALORIFIQUE

Le pouvoir calorifique d'un combustible est la quantité de la chaleur dégagée par la combustion complète, sous pression atmosphérique normale de 1,013 bars, de l'unité de quantité de combustible, et le comburant étant à 0°C, les produits de la combustion étant ramenés à 0°C.

Le pouvoir calorifique, est dit supérieur quand l'eau qui résulte de la combustion des hydrocarbures est supposée à l'état liquide dans les produits de combustion.

Le pouvoir calorifique, est dit inférieur quand cette eau de combustion est supposée à l'état vapeur, dans les produits de combustion.

II-3-2 DENSITÉ PAR APPORT A L'AIR

C'est le rapport entre la masse volumique de ce gaz et celle de l'air dans les mêmes conditions de température et de pression.

II-3-3 DIOXYDE DE CARBONE TOTAL

Le dioxyde de carbone total (V_{CO_2}), également appelé carbone total, est le volume en mètres cubes du dioxyde de carbone résultant de la combustion complète d'un mètre cube de gaz.

La vapeur d'eau totale (V_{H_2O}), également appelée hydrogène total, est le volume en mètre cubes de la vapeur d'eau produite par la combustion complète d'un mètre cube de gaz.

II-3-4 AIR STOCHIOMÉTRIQUE DE COMBUSTION

On appelle air stœchiométrique de combustion ou pouvoir comburivore d'un combustible, la quantité d'air nécessaire et suffisante pour assurer la combustion complète de l'unité de volume de ce gaz.

II-3-5 POUVOIR FUMIGÈNE

C'est le volume, ramené aux conditions normales, des produits de combustion complète sans excès d'air, de un mètre cube de gaz, c'est à dire de la combustion d'un mètre cube de gaz associé à l'air stœchiométrique.

On distingue le pouvoir fumigène humide : l'eau produite par la combustion étant à l'état vapeur, et le pouvoir fumigène sec : l'eau est supposée à l'état condensé.

II-3-6 TENEUR MAXIMAL EN CO₂ DES PRODUITS DE COMBUSTION SECS

Souvent appelée CO₂ max. et désignée par (γ_{CO_2}) : la teneur Max en CO₂ des produits de combustion secs est le rapport du dioxyde de carbone total au pouvoir fumigène sec :

$$(\gamma_{CO_2})_0 = \frac{V_{CO_2}}{V_{Fo}}$$

CHAPITRE 3

III-1 EQUATIONS D'ETAT DES GAZ**III-1-1 LES GAZ PARFAITS**

La notion du gaz parfait est une abstraction, il n'y a pas de gaz parfait dans la nature ; il y a seulement des gaz dont les propriétés s'approchent plus ou moins de celles des gaz parfaits.

Il est alors légitime de se poser la question : à quoi peut servir l'étude d'une telle abstraction ? la réponse est aisée : parce que les développements mathématiques auxquels elle conduit sont particulièrement simples. Autrement dit, on peut, en étudiant un tel fluide idéal prévoir approximativement le comportement des fluides réels dans beaucoup de circonstances.

La question est d'importance, dans l'étude des machines compliquées (compresseurs, turbomachines), il est bien commode d'étudier par le calcul l'effet de telle ou telle modification si le remplacement du gaz réel par le gaz parfait introduit une erreur de 2% et si l'on veut connaître l'effet d'une modification qui va par exemple réduire de 10% le taux de compression d'une machine, le calcul exécuté sur le gaz parfait va probablement donner une évaluation de l'écart à 2% près, c'est-à-dire un résultat absolu à 2% de précision bien supérieur aux écarts dus à l'imprécision de la fabrication.

D'où l'intérêt pratique exceptionnel de l'étude des gaz parfaits

III-1-1-1 DEFINITION DES GAZ PARFAITS

Un gaz parfait sera un fluide répondant aux conditions suivantes

Première condition

- a- ce fluide répond à l'équation de Mariotte à température constante $PV = \text{cste}$
- b- D'après la loi de Gay Lussac et par définition du thermomètre à gaz parfait, l'augmentation de pression à valeur constante est proportionnelle à la température absolue. En conséquence, l'équation d'état du gaz parfait est :

$$P \cdot v = m_r \cdot T$$

Deuxième condition

Le fluide répond à l'expérience de Joule. Nous verrons qu'il en résulte que son énergie interne massique est définie par l'équation

$$U_B - U_A = \int_{T_A}^{T_B} C_v dT$$

Il en est de même pour enthalpie

Troisième condition

Le fluide est non visqueux ce qui signifie qu'il n'y a aucun effet d'entraînement tangentiel si l'on veut qu'il est dépourvu de frottement.

$$Wf_{\text{def}} = Wf_{\text{dep}} = 0$$

Ces trois conditions sont seules nécessaires. Cependant, pour la commodité des exposés, on en ajoute fréquemment dans autres.

Remarque 1

Si les chaleurs spécifiques C_p et C_v sont indépendantes de la température, le gaz est dit idéal ou caloriquement parfait. Pour un gaz parfait cette approximation ne peut être admise que dans des intervalles de température relativement modérées (pas à la traversée d'un turboréacteur par exemple).

Remarque 2 :

On suppose que les propriétés du gaz parfait s'étendent jusqu'au Zéro absolu.

Une telle hypothèse qui n'est physiquement incorrecte n'a rien de nécessaire mais elle simplifie les calculs en fixant l'origine des coordonnées.

III-1-2 LES GAZ REELS:

L'équation d'état des gaz réels peut se traduire par la loi physique suivante qui définit d'une nouvelle manière la constante des gaz parfait R .

$$R = \lim_{p \rightarrow 0} \left(\frac{P \cdot v}{T} \right)$$

Dés que l'on s'écarte des pressions très basses, les molécules rapprochent en moyen et des écarts apparaissent autre les propriétés des gaz réels et celles qui sont la conséquence de la qualité de gaz parfait ainsi que le montrent les chiffres du tableau suivant. C'est que les interaction des molécules se manifestent.

Le tableau donne la valeur du rapport $Z_0 = \frac{P \cdot v_0}{RT}$ à 0°C et sous diverses pressions pour quelque gaz.

Gaz	Température Critique (deg.C)	Z ₀		
		P= 0.1 atm	P= 1 atm	P= 50 atm
H ₂	-242°C	1.0002	1.0007	1.0316
N ₂	-146°C	0.9999	0.9995	0.9842
O ₂	-119°C	1.0000	0.9992	0.9565
CO ₂	±31°C	0.9993	0.9932	0.104

Le coefficient $Z = PV/RT$ est souvent appelé facteur de compressibilité

III-1-2-1 EQUATION CARACTERISTIQUE DES FLUIDES REELS

La théorie cinétique des gaz conduit à remplacer l'équation caractéristique des gaz parfaits pour une équation de la forme :

$$(P + \pi) \cdot (v - b) = r \cdot T$$

où π est la pression interne et b le covolume

le covolume b correspond au volume minimal que puisse occuper la matière on démontre qu'il est égal à quatre fois le volume propre des molécules.

III-1-3 COMPARAISON ENTRE L'EQUATION D'ETAT DES GAZ PARFAITS ET CELLE DES GAZ REELS

On sait que les lois des gaz parfaits ne constituent que des lois limites qui ne sont vérifiées exactement que pour des valeurs très faibles de la pression et sous réserve que la température ne soit pas voisine du Zéro absolu.

On vient de voir aussi que dès qu'on s'écarte des pressions très basses, l'équation d'état des gaz parfaits devient insuffisante si l'approximation recherchée est moindre que quelques unités pour cent, pour certains gaz.

III-2 LA TEMPERATURE D'EQUILIBRE

La température d'équilibre d'une flamme « TADF » est la température maximale atteinte par les produits de combustion dans une réaction chimique en l'absence d'échange de chaleur.

III-2-1 L'IMPORTANCE DE LA TEMPERATURE D'EQUILIBRE

La « TADF » est une grandeur purement théorique mais sa connaissance consiste un intérêt pratique imminent ; en effet :

- 1) La « TADF » consiste la température maximale que l'on peut prendre en considération pour le calcul des combustions thermiques.
- 2) La « TADF » sera la première approximation nécessaire au calcul des transferts thermiques.
- 3) L'initialisation de la solution du système d'équations dans la phase de combustion se fait à l'aide de la « TADF » pour la simulation de la combustion dans le moteur diesel.

III-2-2 MECANISME DE LA REACTION

III-2-2-1 Position du problème :

Considérons la réaction isothermique de combustion d'un combustible utilisant l'air comme carburant, les réactifs étant en proportions et dans conditions bien

déterminées ou se propose de déterminer la composition du mélange se trouvant dans ces conditions c'est à dire de pression et des température données.

III-2-2-2 Hypothèses :

Le calcul de la composition du mélange brûlé nous conduit à poser certaines hypothèses simplificatrices nécessaires qui se résument comme suite :

- La combustion est supposée adiabatique.
- Les produits de combustion sont à l'état gazeux.

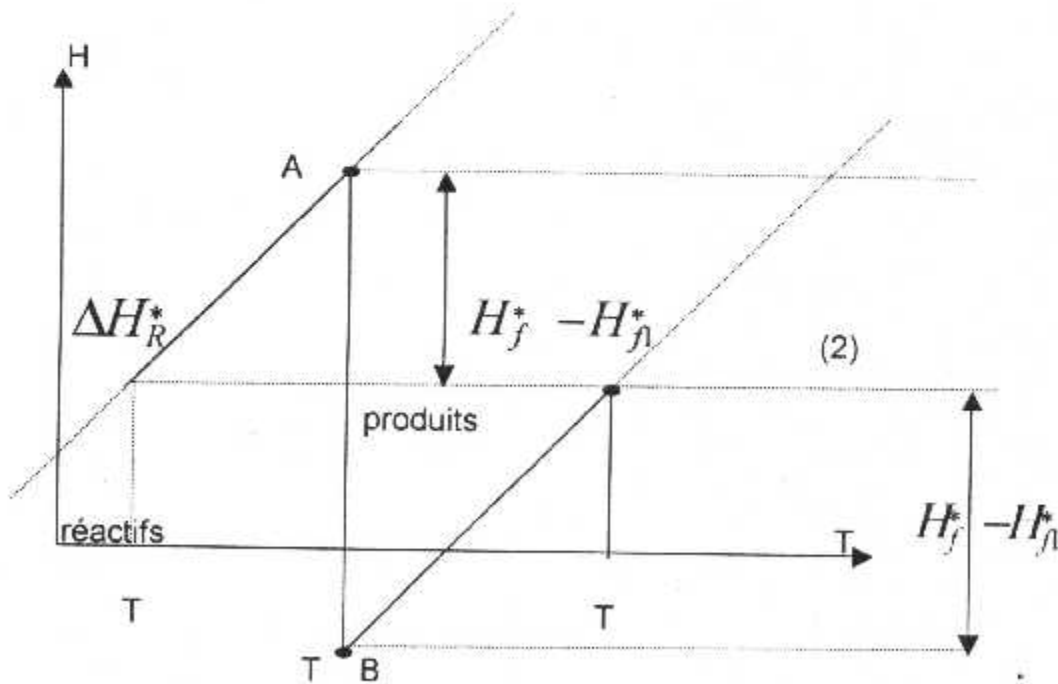
III-2-2-3 Mécanisme de la réaction

Le calcul de la température d'équilibre « T_e » résulte entre des calories dégagées par la réaction et celles absorbées par l'échauffement des produits de combustion et par les processus endothermiques de formation de ces derniers.

Connaissant les produits de combustion et leurs concentration, nous pouvons déterminer les grandeurs suivant H_{f1} , H^*_r et H^*_b puisque $dQ=0$, nous pouvons déterminer ENTHALPIE des produits de combustion H_{b2} et ainsi nous pouvons déduire la température du mélange brûlé.

Les indices f : frais ; b : brûlé.

Nous pouvons représenter les évolutions dans un diagramme ENTHALPIE



- (figure ci – dessus) exprime la relation entre ENTHALPIE et la température des mélanges frais et brûlés.

Le diagramme décrit le chemin du processus de la combustion en tenant compte des hypothèses déjà posées.

Les réactifs de l'état (1) sont portés à l'état de référence. A puis après transformation en produits de combustion à une température constante le long de AB .

Les produits de combustion sont chauffés et portés à l'état (2) à la température T_b qui représente la température de fin de combustion puisque il n'y a pas d'échange de chaleur, il y a donc conservation d'énergie entre réactifs et produits, donc $H_r(1)$ doit être égal à $H_b(2)$

$$DH = dP/q + dQ$$

Puisque l'évolution est adiabatique donc $dQ=0$ et par conséquent $dH=0$ alors $H_{\text{frais}} = H_{\text{brûlé}}$

Où H_{frais} et $H_{\text{brûlé}}$ sont respectivement les enthalpies de mélanges frais et brûlé, elle sont données par équation.

La détermination de la température de fin de combustion conduit donc à la recherche de Zéro de l'équation.

On choisit un intervalle de température dans la température de fin de combustion est susceptible d'y exister.

L'intervalle $[T_1, T_1]$ est choisi de telle manière que l'évolution de l'enthalpie soit linéaire.

III-2-3 METHODES DE RESOLUTIONS

Le problème consiste à élaborer un programme de calcul permettant la résolution du système d'équations des réactions des équilibres chimiques. Ces calculs qui permettent à partir :

De la composition du mélange carburé.

Des constantes d'équilibres.

Des chaleurs de formation des produits et

De la variation d'enthalpie molaire des produits entre la température de référence (0°C ,ou 289°K) et la température d'équilibre.

La composition des gaz brûlés à l'équilibre.

La température d'équilibre «Te» :

Le calcul de la composition du mélange brûlé nous conduit à la résolution d'un système d'équation non linéaire très complexes pour cette raison des méthodes de résolution ont été proposées :

- ❖ Méthode de Brinkley qui fait intervenir les fractions molaires
- ❖ Méthode de Huff qui linéarise toutes les concentrations
- ❖ Méthode de White qui consiste à chercher l'extremum de la fraction G par la Méthode des multiplicateur de Lagrange
- ❖ Méthode simplifiée qui calcule en premier lieu les produits prédominant et ensuite les autres produits.

Remarque :

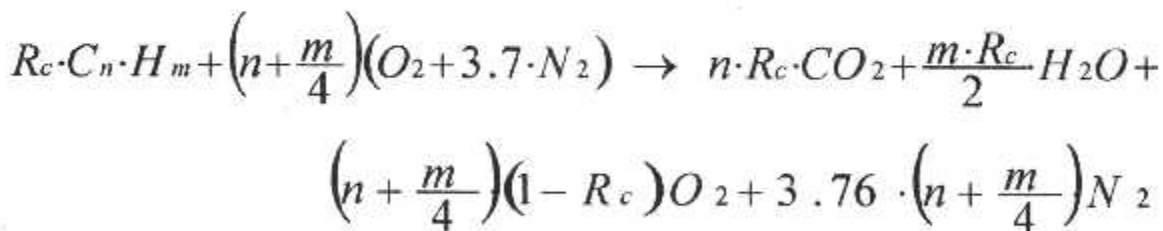
Dans notre étude nous utiliserons la méthode de« Brinkley » :

III-2-3-2 DETERMINATION DE LA COMPOSITION A L'EQUILIBRE :

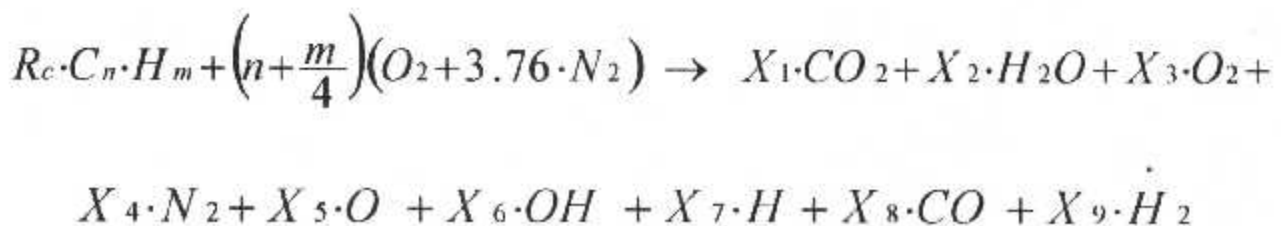
Mise en équations :

L'équation de réaction s'écrit :

- Pour la combustion complète :



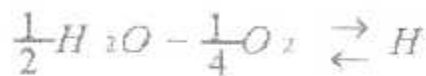
- Pour la combustion réelle :



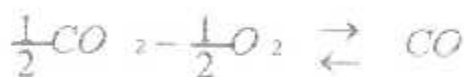
Réaction de base :



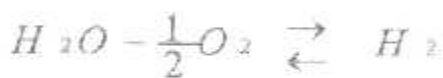
$$PK_1 = (PK_{12} \cdot P_0)^{0.5}$$



$$PK_3 = (PK_{14})^{0.25} \cdot (PK_{11})^{0.5} \cdot (P_0)^{0.75}$$



$$PK_4 = (PK_{13} \cdot P_0)^{0.5}$$



$$PK_5 = (PK_{14} \cdot P_0)^{0.5}$$

Les $PK_{11,12,13,14}$ et 15 sont donnés dans la table VI

$$XO = PK_1 \cdot (XO_2)^{0.5}$$

$$XOH = PK_2 \cdot (XO_2)^{0.25} \cdot (XH_2O)^{0.5}$$

$$XH = PK_3 \cdot ((XO_2)^{0.25} \cdot (XH_2O))^{0.5}$$

$$XCO = PK_4 \cdot (XCO_2) \cdot (XO_2)^{0.5}$$

$$XH_2 = PK_5 \cdot (XO_2)^{0.5} \cdot (XH_2O)$$

CONSERVATION DES ATOMES :

$$\underline{O} : \frac{1}{NT} (2X_1 + X_2 + 2X_3 + X_5 + X_6 + X_8) = \frac{2(n + \frac{m}{4})}{NT}$$

$$\underline{H} : \frac{1}{NT} (2X_2 + X_6 + X_7) = \frac{m \cdot R_c}{NT}$$

$$\underline{C} : \frac{1}{NT} (X_1 + X_8) = \frac{n \cdot R_c}{NT}$$

$$N: \frac{1}{N_T} (2X_A) = \frac{3.76 \cdot \left(n + \frac{m}{4}\right)}{N_T}$$

Soient en fraction molaires :

$$2X_{O_2} + 2X_{CO_2} + X_{H_2O} + X_O + X_{OH} + X_{CO} = \frac{2n + \frac{m}{2}}{N_T}$$

$$2X_{H_2O} + X_H + X_{OH} + 2X_{H_2} = \frac{m \cdot R_C}{N_T}$$

$$X_{CO_2} + X_{CO} = \frac{n \cdot R_C}{N_T}$$

$$X_{N_2} = \frac{3.76 \cdot \left(n + \frac{m}{4}\right)}{N_T}$$

N_T : est le nombre de moles total.

On aura donc :

$$2X + Y + 2Z = \frac{2n + \frac{m}{2}}{N_T} - (X_O + X_{OH} + X_{CO})$$

$$2Y = \frac{m R_C}{N_T} - (X_H + X_{OH} + 2X_{H_2})$$

$$Z = \frac{n R_C}{N_T}$$

on pose :

$$A = \frac{2n + \frac{m}{2}}{N_T} - (X_O + X_{OH} + 2X_{CO})$$

$$B = \frac{m R_C}{N_T} - (X_H + X_{OH} + 2X_{H_2})$$

$$C = \frac{n R_C}{N_T} - X_{CO}$$

d'où :

$$XO_2 = X = \frac{A}{2} - \frac{B}{4} - C$$

$$XH_2O = Y = \frac{B}{2}$$

$$XCO_2 = Z = C$$

pour résoudre ce système d'équation, on s'intéresse à un processus interactif prenant comme valeurs initiales les condition prises à la combustion complète :

$$N_{T0} = 3.76 \cdot \left(n + \frac{m}{4}\right) + \left(\frac{m}{4}\right) R_C$$

$$X_0 = \frac{2n + \frac{m}{2}}{2N_T} - \frac{m \cdot R_C}{4N_{T0}} - \frac{n \cdot R_C}{N_{T0}}$$

$$Y_0 = \frac{m \cdot R_C}{2N_{T0}}$$

$$Z_0 = \frac{n \cdot R_C}{N_{T0}}$$

$$(XO)_0 = (XOH)_0 = (XCO)_0 = (XH)_0 = (XH_2)_0 = 0$$

$$(XO)^K = P_{K1} \cdot ((X)^{0.5})^{K-1} \cdot ((Y)^{0.5})^{K-1} \cdot P^{-\frac{1}{4}}$$

$$(XH)^K = P_{K3} \cdot ((X)^{-0.25})^{K-1} \cdot ((Y)^{0.5})^{K-1} \cdot P^{-\frac{3}{4}}$$

$$(XCO)^K = P_{K4} \cdot (Z)^{K-1} \cdot ((X)^{-0.5})^{K-1} \cdot P^{-\frac{1}{2}}$$

$$(XH_2)^K = P_{K5} \cdot ((X)^{-0.5})^{K-1} \cdot (Y)^{K-1} \cdot P^{-\frac{1}{2}}$$

$$A^K = \frac{2n + \frac{m}{2}}{N_{TK}} - (XO + XOH + 2XCO)^{K-1}$$

$$B^K = \frac{m R_C}{N_{TK}} - (XH + XOH + 2XH_2)^{K-1}$$

$$C^K = \frac{n R_C}{N_{TK}} - (XCO)^{K-1}$$

$$X^K = \frac{A^K}{2} - \frac{B^K}{4} - C^K$$

$$Y^K = \frac{B^K}{2}$$

$$Z^K = C^K$$

$$XN_2^K = 1 - (X + Y + Z + XO + XOH + XH + XCO + XH_2)^K$$

$$N_{TK} = \frac{3.76 \cdot \left(n + \frac{m}{4}\right)}{XN_2^K}$$

$$H_{11} = 2.H_H - H_{H_2} \quad \text{et} \quad S_{11} = 2.S_H - S_{H_2}$$

$$P_{K11} = \exp(-H_{11} + S_{11})$$

$$H_{12} = 2.H_O - H_{O_2} \quad \text{et} \quad S_{12} = 2.S_O - S_{O_2}$$

$$P_{K12} = \exp(-H_{12} + S_{12})$$

$$H_{13} = 2.H_{CO} + H_{O_2} - 2.H_{CO_2} \quad \text{et} \quad S_{13} = 2.S_{CO} + S_{O_2} - 2.S_{CO_2}$$

$$P_{K13} = \exp(-H_{13} + S_{13})$$

$$H_{14} = 2.H_{H_2} + H_{O_2} - 2.H_{H_2O} \quad \text{et} \quad S_{14} = 2.S_{H_2} + S_{O_2} - 2.S_{H_2O}$$

$$P_{K14} = \exp(-H_{14} + S_{14})$$

$$H_{15} = 2.H_{OH} + H_{H_2} - 2.H_{H_2O} \quad \text{et} \quad S_{15} = 2.S_{OH} + S_{H_2} - 2.S_{H_2O}$$

$$P_{K15} = \exp(-H_{15} + S_{15})$$

$$PK_1 = \sqrt{PK_{12} \cdot P_0}$$

$$PK_2 = \frac{\sqrt{PK_{15}}}{(PK_{14})^{0.25} \cdot P_0^{0.25}}$$

$$PK_3 = \frac{\sqrt{PK_{11}}}{(PK_{14})^{0.25} \cdot P_0^{0.75}}$$

$$PK_4 = \sqrt{PK_{13} \cdot P_0}$$

$$PK_5 = \sqrt{PK_{14} \cdot P_0}$$

Les fonctions thermodynamiques (Cp, H, S) en fonction de la température est basée sur l'utilisation des polynômes de Gordon et McBride .

$$C_p(T) = R \left[a_1 + a_2 \cdot T + a_3 \cdot T^2 + a_4 \cdot T^3 + a_5 \cdot T^4 \right]$$

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

$$S(T) = R \left[a_1 \cdot \ln(T) + a_2 \cdot T + \left(\frac{a_3}{2} \right) T^2 + \left(\frac{a_4}{3} \right) T^3 + \left(\frac{a_5}{4} \right) T^4 + a_7 \right]$$

Les coefficients a_i ($i = 1, \dots, 7$) sont donnés sous forme de tables pour différents éléments.

III-2-3-3 DETERMINATION DE LA TEMPÉRATURE DE FIN DE COMBUSTION

La détermination de la température de fin de combustion conduit donc à la recherche de zéro de l'équation suivante : $H_{FR} = H_{BR}$

On choisit un intervalle de température dans lequel la température de fin de combustion est susceptible d'y exister.

L'intervalle $[T_1, T_2]$ est choisi de telle manière que l'évolution de l'enthalpie soit linéaire.

La méthode de «DICHOTOMIE» ou bien dit : «BISECTION» résout ce problème mais le calcul de l'enthalpie des gaz brûlés est assuré par un sous-programme appelé «FRAC» qui calcule chaque fois pour les différentes températures jusqu'à la détermination du H_{BR} qui égale au H_{FR} et ce travail basé sur le calcul des fractions molaires où ces dernières sont calculées grâce à des constantes d'équilibre «PK» qui sont fournies par le 2^{ème} sous-programme appelé «SEQ» [ANNEX B].

CHAPITRE 4

IV PROGRAMME DE CALCUL DES PROPRIETES THERMODYNAMIQUES DES ESPECE CHIMIQUES :

Nous avons élaboré un programme : COM.FOR [ANNEXE A] permettant le calcul des propriétés thermodynamique des espèces chimique qui constituant les produits de combustion d'un hydrocarbure ou d'un propergol.

Ces propriétés (chaleurs spécifiques. Enthalpie et entropies) sont données sous forme de tableaux pour plusieurs éléments chimiques et constituant des donnée thermodynamiques nécessaire pour notre étude [ANNEXE C].

IV-1 CALCUL DES CONSTANTS D'EQUILIBRES :

Les constantes d'équilibres peuvent être également calculées en utilisant une relation qui utilise des coefficients bien détermines. Ces coefficients sont tablés pour chaque réaction d'équilibre [ANNEXES B]. Les tables donnent les constantes d'équilibres pour 7 réaction d'équilibres.

EXEMPLE :

Considérons la réaction d'équilibre suivante :



On donne , ci après, les valeurs des constants d'équilibres de cette réaction calculées par le programme COM.FOR et comparées à celle des tables originales (JANAF Thermodynamical tables).

• COMPARAISON DES RESULTATS

TEMPERATURE (K)	Constantes D'équilibres	
	PROGRAMME	JANAF
1000	0.22601×10^{-8}	0.2260×10^{-8}
1400	0.48451×10^{-5}	0.4837×10^{-5}
1800	0.35672×10^{-3}	0.3563×10^{-3}
2200	0.56118×10^{-2}	0.5603×10^{-2}
2600	0.38246×10^{-1}	0.3820×10^{-1}
3000	0.15731	0.1571
3400	0.46588	0.4647
3800	1.10074	1.100

TABLEAU (4-1) :comparaisons des résultats des constantes d'équilibres (programme/ JANAF)

Les valeurs de log KP calculées on été comparées avec celles des Tables originales (JANAF) et l'erreur observés ne dépasse pas 0.0009 .

IV-2 CALCUL DE LA TEMPERATURE DE FIN DE COMBUSTION :

EXE 01 ; considérons la combustion à pression constante de quelques combustibles dans l'air sous une pression d'une atmosphère dans les conditions atmosphérique ; pour ce la, nous obtenons les résultats suivants :

• COMPARAISON DES RESULTATS :

COMBUSTIBLES	TEMPERATURE DE FIN DE COMBUSTION (K)		ECART %
	PROGRAMME	DOCUMENTATION	
HYROGENE H ₂	2383	2383	0.00
AMONIAC NH ₃	2076	2074	0.09
METHANE CH ₄	2227	2227	0.00
PROPANE C ₃ H ₈	2268	2268	0.00
OCTANE C ₈ H ₁₈	2266	2272	0.26
ACETYLENE C ₂ H ₂	2540	2540	0.00

TABLEAU (4-2): comparaison des résultats des températures d'équilibres (programme/documentation)

EXEMPLE 02

Nous avons considéré la combustion à pression constante de quelques combustibles avec l'air, sous une pression de 50 bars et une richesse de 0.8 et nous avons le tableau suivant :

CARBURANTS	TEMPERATURE DE COMBUSTION (K)	MASSE MOLAIRE MOYENNE (g)
Méthane $C H_4$	2006.6580	27.933
Propane $C_3 H_8$	2055.7940	28.496
Acétylène $C_2 H_2$	2438.6000	29.626
Kérosène $C_{10.3} H_{20.6}$	2023.6040	28.884
gazoline $C_7 H_{8.7}$	2042.0400	28.624
Diesel fuel $C_{14.4} H_{24.9}$	2103.8200	29.065
butane $C_4 H_{10}$	2059.8300	28.580
isooctane $C_8 H_{18}$	2061.5000	28.720
Benzène $C_6 H_6$	2152.2500	29.670

TABLEAU (4-3) : Température de fin de combustion pour quelques combustibles

IV-3 CALCUL DES FRACTIONS MOLAIRES :

EXEMPLE 01 :

Considérons la combustion du propane ($C_3 H_8$) dans l'air avec une richesse de 0.9 sous une pression atmosphérique.

Comparons les résultats de la méthode adoptée avec la documentation pour le calcul de la combustion à une température de 2200 K.

La température de fin de combustion qui a été déterminée en utilisant la méthode de DICHOTOMIE sera comparée avec la documentation.

Pour la composition. Nous avons dressé le tableau suivant :

ESPECES	FRACTIONS MOLAIRES		ECART %
	PROGRAMME	DOCUMENTATION	
H	0.0001884355	0.000184	2.3
O	0.0003725888	0.000430	1.3
H ₂	0.0011274798	0.001076	4.7
OH	0.0011274798	0.002817	13.1
CO	0.0043063592	0.004264	0.99
O ₂	0.0192591339	0.02117	9.49
H ₂ O	0.1369468420	0.1376	0.47
C O ₂	0.1005156410	0.1008	0.28
N ₂	0.7216105460	0.7316	1.36

TABLEAU (4-4) : comparaison des résultats des fractions molaires (programme/ documentation)

- Pour la température de fin de combustion nous avons :

	PROGRAMME	DOCUMENTATION	ECART %
Température de combustion	2181.10	2187	0.27

TABLEAU (4-5) : comparaison de la T_{EQUI} du programme avec la documentation.

Examinant le résultat de la composition obtenue par les deux méthodes et faisons une comparaison. Les valeurs de ces deux méthodes sont proches l'une de l'autre et l'écart le plus important est de 13.1 % pour OH. Ceci est sans doute dû à la méthode de calcul utilisée. De même que pour la température de fin de combustion, un écart relatif de 0.27 % est justifié par la différence des procédures de calcul.

EXEMPLE N°02 :

Considérons la combustion d'une essence (C_7H_{17}) avec l'oxygène (O_2) sous une pression de 20.7 bars et un rapport de mélange de 2.5.

Le tableau suivant donne la composition à une température de 3288 k.

ESPECES	FRACTION MOLAIRES		ECART %
	PROGRAMME	DOCUMENTATION	
H	0.02701322511	0.028	3.5
O	0.0044320455	0.006	2.6
H ₂	0.1227013610	0.105	16.8
OH	0.0337318122	0.061	44
CO	0.3105792400	0.322	3.5
O ₂	0.0053775590	0.008	32
H ₂ O	0.3732778420	0.330	13
CO ₂	0.1228868810	0.137	10

TABLEAU (4-6) : comparaison des résultats des fractions molaires (programme/ documentation)

Nous pouvons remarquer que les valeurs calculées par le programme et celle fournie par la documentation sont relativement proches, Sauf peut être pour le cas du OH et O₂ ou les écarts relatifs sont respectivement 44% , 32% qui paraissent assez grand, ceci dû probablement à la méthode de calcul utilisée.

EXEMPLE N°03

Pour le calcul de la composition à la température de 2450 K, nous aurons le tableau suivant :

ESPECES	FRACTIONS MOLAIRE		ECART %
	PROGRAMME	DOCUMENTATION	
H	0.0020910492	-	-
O	0.0000031544	-	-
N	0.0000000164	-	-
H ₂	0.2229055910	0.223	2.7
OH	0.0005052126	-	-
NO	0.0000282266	-	-
CO	0.2756776210	0.277	0.47
O ₂	0.0000016240	-	-
H ₂ O	0.2751377820	0.277	0.67
CO ₂	0.057166919	0.057	0.38
N ₂	0.1664330360	0.166	0.26

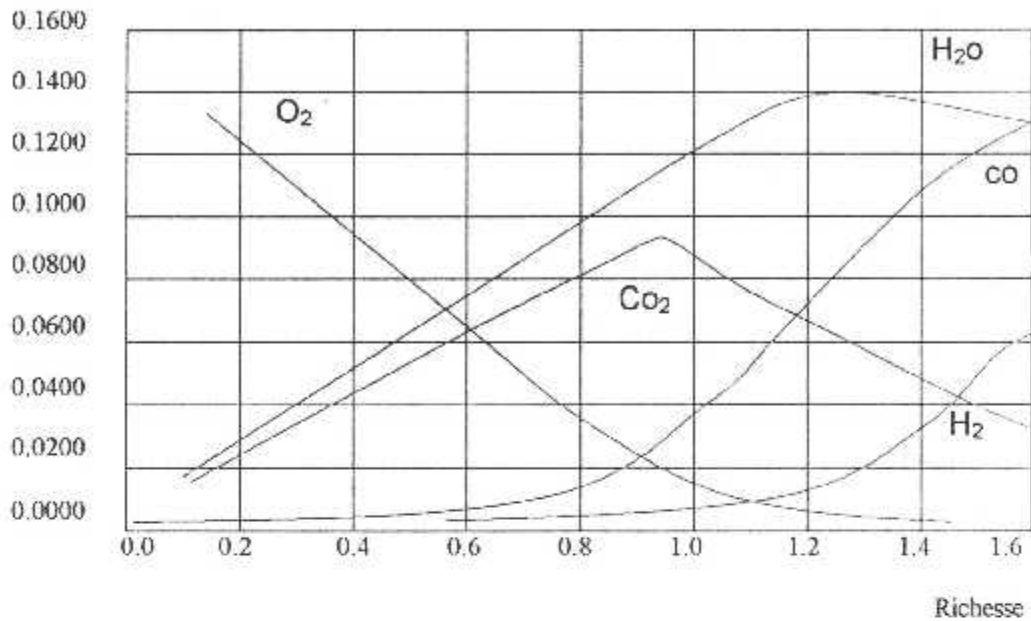
TABLEAU (4-7) : comparaison des résultats des fractions molaires (programme/ documentation)

Soit la combustion du monergol C H₃ Sous une pression de 20.7 bars. Nous avons le tableau suivant :

TEMPERATURE DE FIN DE COMBUSTION		
PROGRAMME	DOCUMENTATION	ECART %
2468	2450	0.72

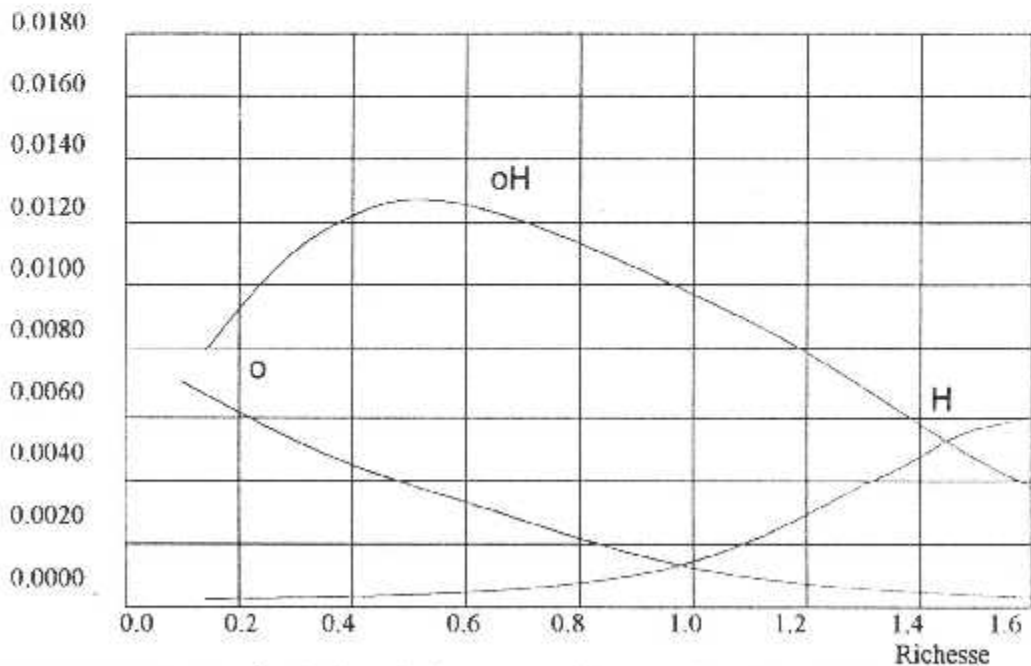
TABLEAU (4-8) : comparaison de la T_{EQUI} du programme avec la documentation.

Fractions
molaires

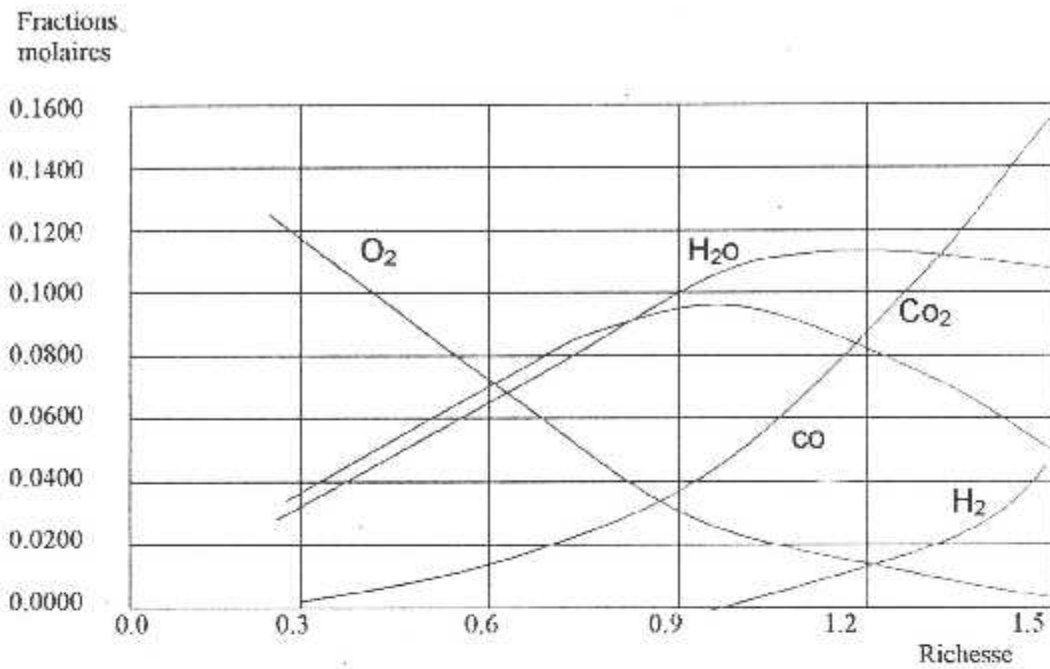


GRAPHE (4.-1) : évolution de la composition en fonction de la richesse
Carburant essence (C7H17)
Pression (P=60 bars), température (T=3000 k)

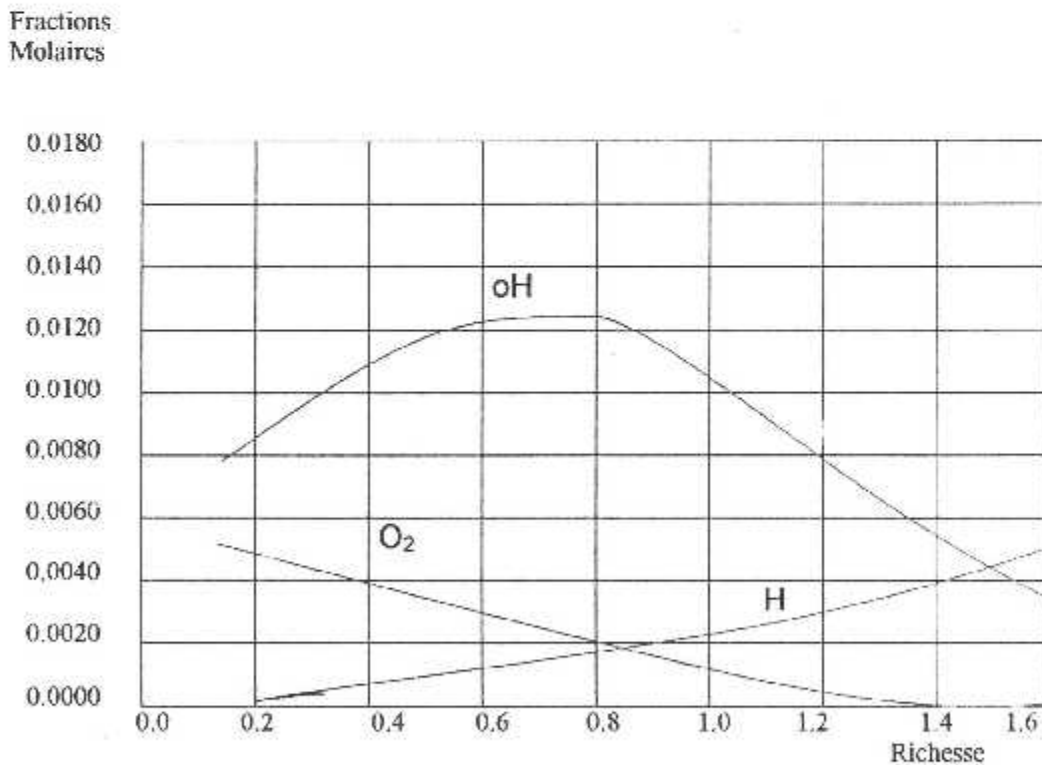
Fractions
molaires



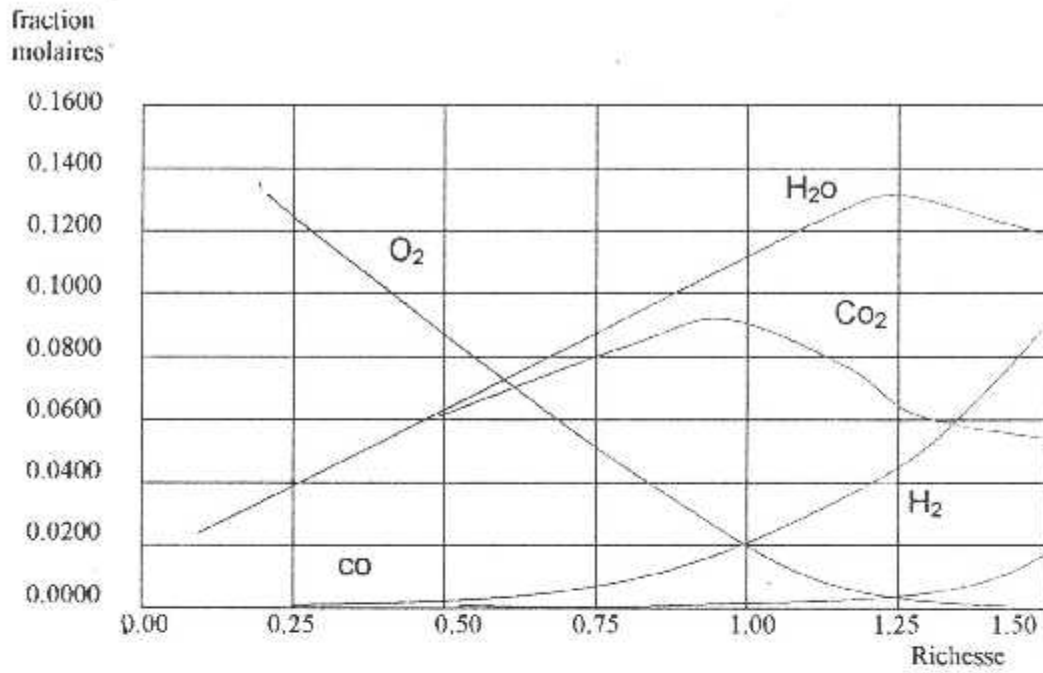
GRAPHE (4.-2) : évolution de la composition en fonction de la richesse
Carburant essence (C7H17)
Pression (P=60 bars), température (T=3000 k)



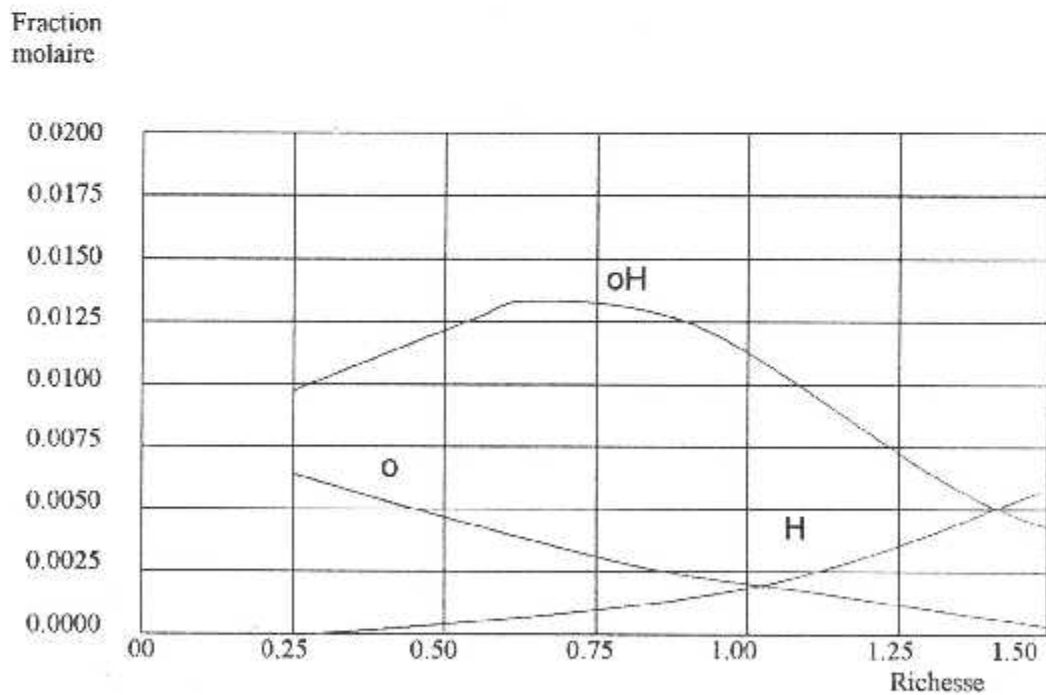
GRAPHE (4.-3) : évolution de la composition en fonction de la richesse
Carburant diesel fuel (C14.4H24.9)
Pression (P=40 bars), température (T=3000)



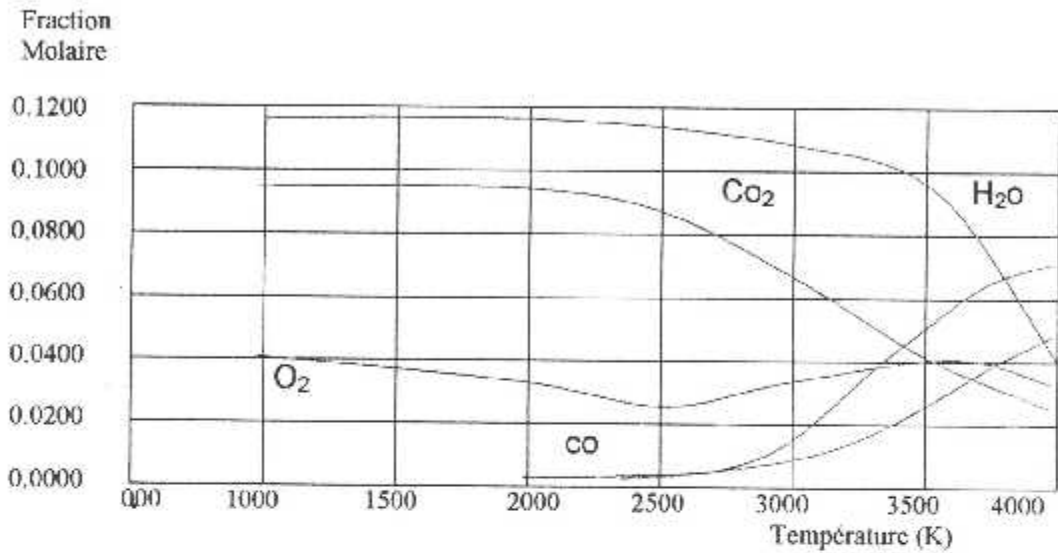
GRAPHE (4.-4) : évolution de la composition en fonction de la richesse
Carburant diesel fuel (C14.4H24.9)
Pression (P=60 bars), température (T=3000 k)



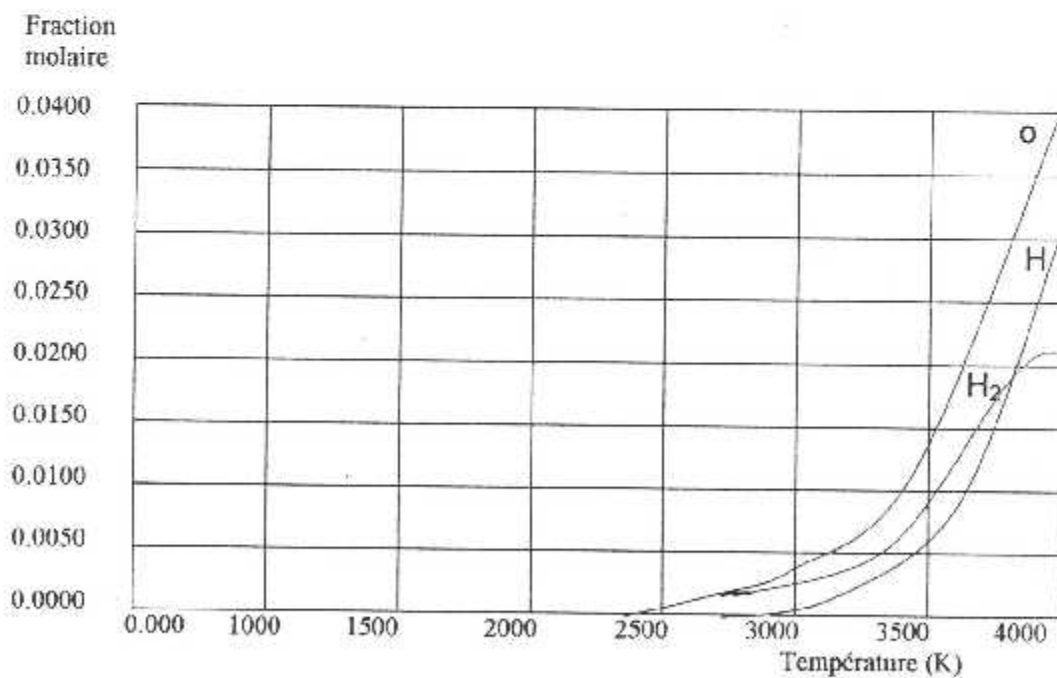
GRAPHE (4.-5) : évolution de la composition en fonction de la richesse
 Carburant kérosène (C_{10.3} H_{20.6})
 Comburant (air)
 Pression (P=50 bars), température (T=3000 k)



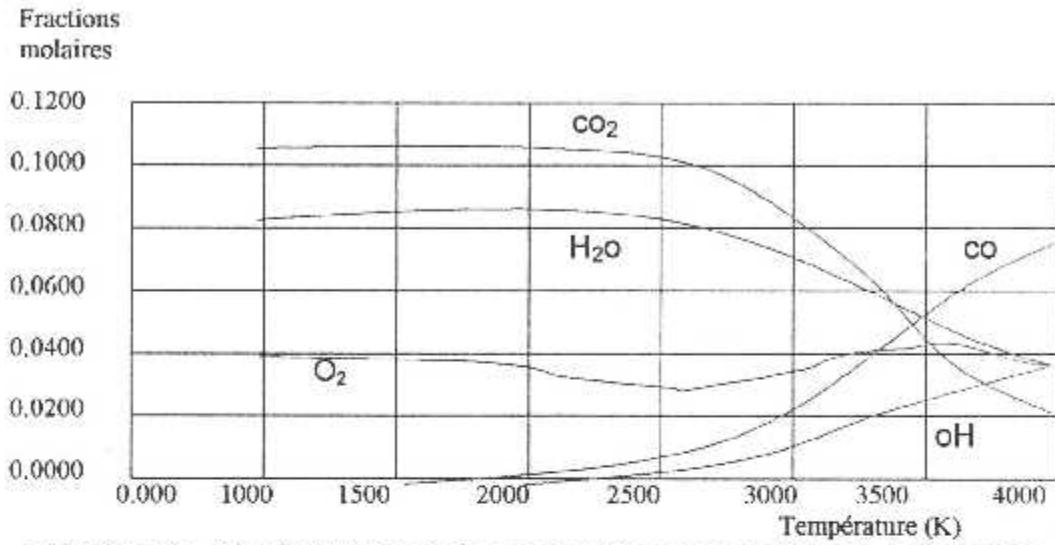
GRAPHE (4.-6) : évolution de la composition en fonction de la richesse
 Carburant kérosène (C_{10.3} H_{20.6})
 Comburant (air)
 Pression (P=50 bars), température (T=3000 k)



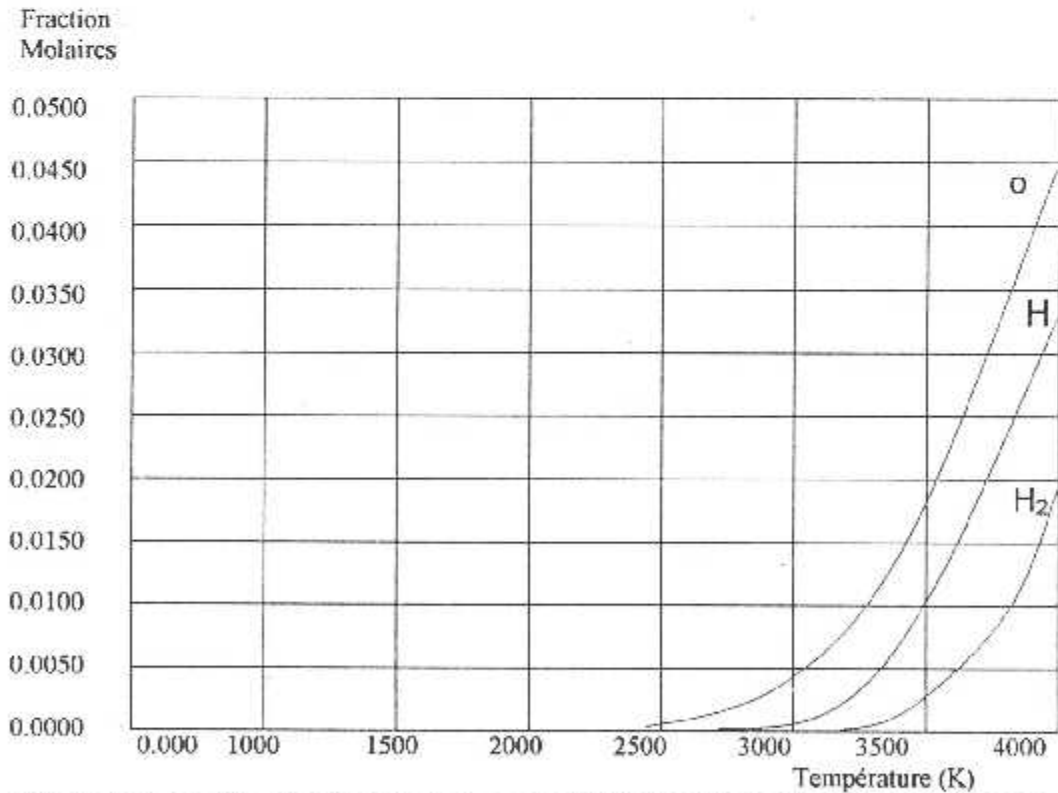
GRAPHE (4.-7) : évolution de la composition en fonction de la température
 Carburant essence (C7H17)
 Pression (P=60 bars),richesse (R=0.8)



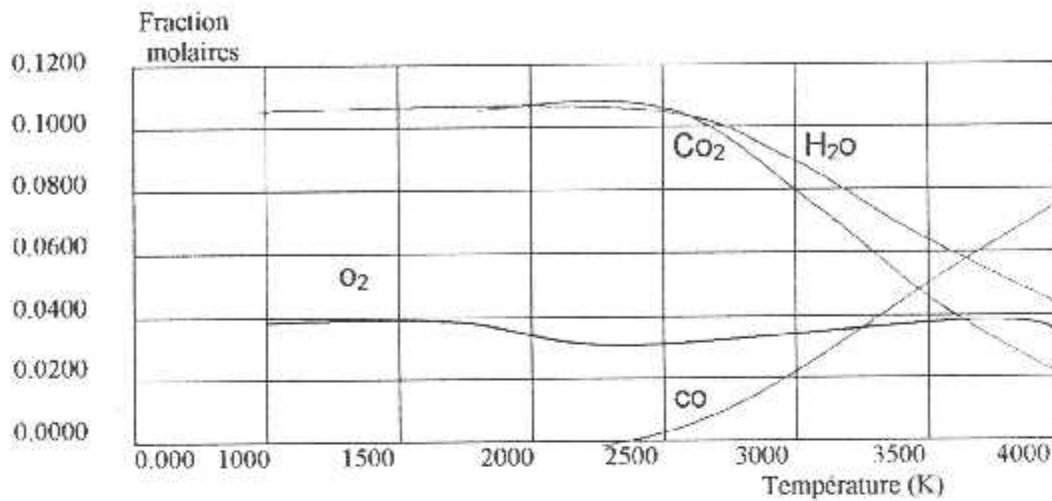
GRAPHE (4.-8) : évolution de la composition en fonction de la température
 Carburant essence (C7H17)
 Pression (P=60 bars),richesse (R=0.8)



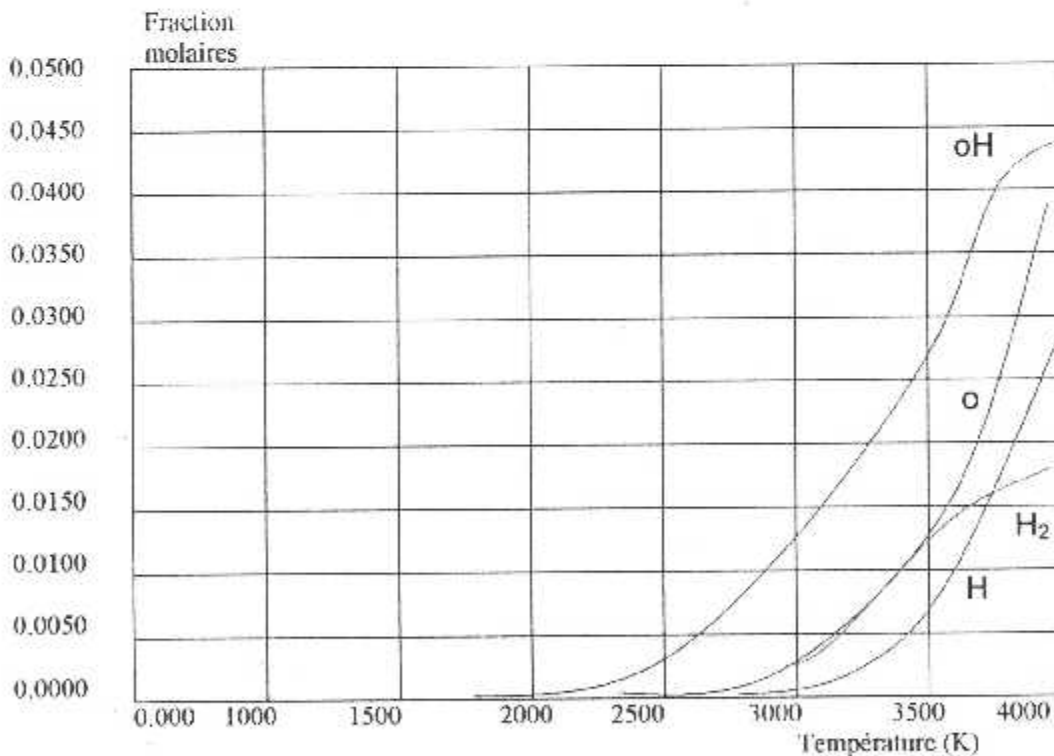
GRAPHE (4.-9) : évolution de la composition en fonction de la richesse
Carburant diesel fuel (C_{14.4}H_{24.9})
Pression (P=60 bars), richesse (R=0.8)



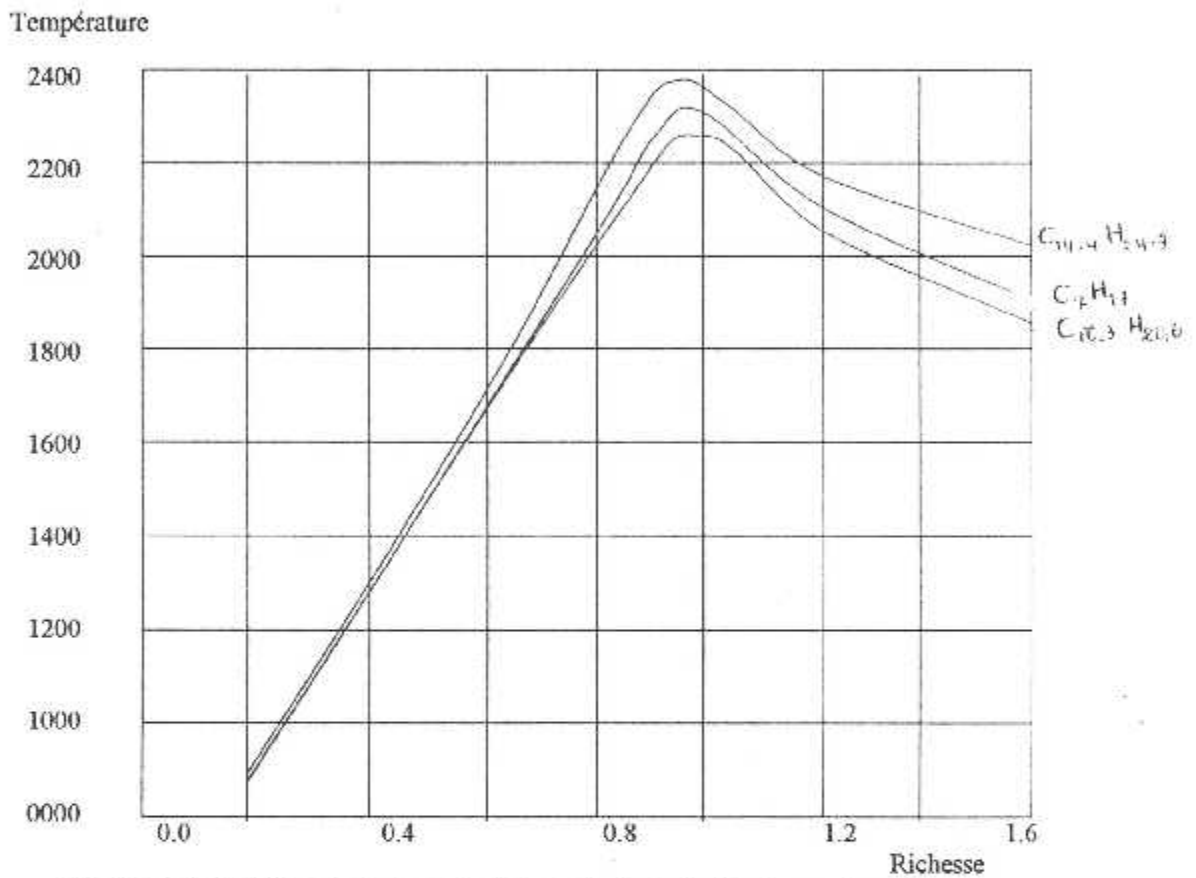
GRAPHE (4.-10) : évolution de la composition en fonction de la richesse
Carburant diesel fuel (C_{14.4}H_{24.9})
Pression (P=60 bars), richesse (R=0.8)



GRAPHE (4.-11) : évolution de la composition en fonction de la richesse
 Carburant kérosène (C10.3 H20.6)
 Comburant (air)
 Pression (P=50 bars), richesse (R=0.8)

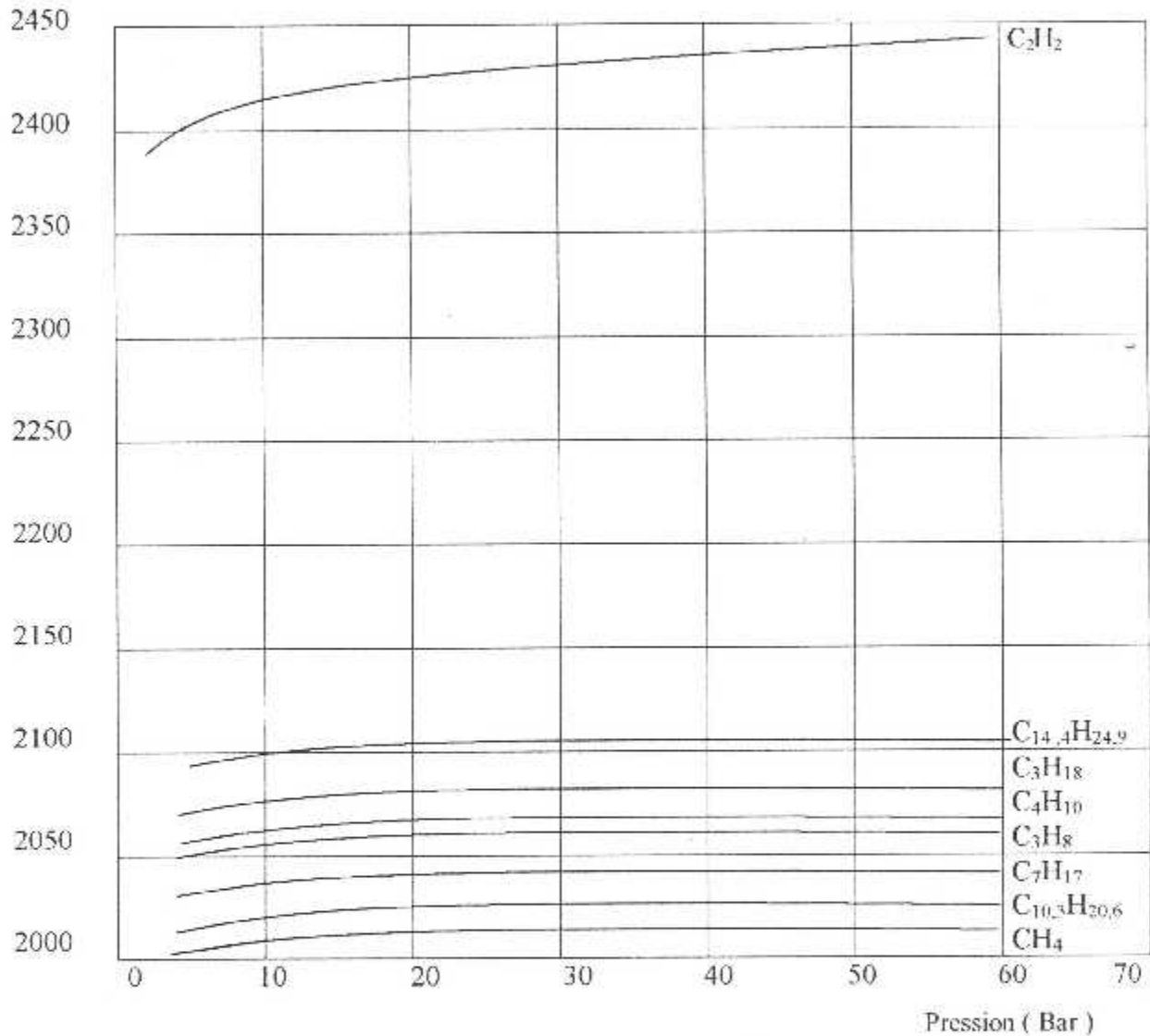


GRAPHE (4.-12) : évolution de la composition en fonction de la richesse
 Carburant kérosène (C10.3 H20.6)
 Comburant (air)
 Pression (P=50 bars), richesse (R=0.8)



GRAPHE (4-13) : évolution de la température de fin de combustion en
Fonction de la richesse pour quelque combustibles
Pression (P=10 bars)

Température de fin de
combustion en (K°)



GRAPHE (4-14) : Evolution de la température de fin de combustion en fonction de la pression pour différents combustibles. Richesse ($r = 0.8$)

VI-5 INTERPRETATIONS DES GRAPHES :VI-5-1 Evolution de la température en fonction de la richesse :

On peut remarquer qu'en dehors de la valeur de la richesse du cas stoechiométrique, on obtient une concentration élevée de l'oxygène (O_2) dans le sens du mélange pauvres et une concentration élevée d'hydrogène (H_2) dans le sens des mélanges riches. Ce qui est comparable avec la nature physique du problème.

VI-5-2 Evolution de la composition en fonction de la température de fin de combustion :

En examinant les courbes des produits de base, par exemple la valeur d'eau H_2O et le dioxyde de carbone CO_2 . A des températures relativement basses, ces produits ont une concentration élevée alors que celle des éléments comme ($H_2O, OH, \dots \dots \dots$ etc.) est faible mais augmente pour des hautes températures tandis que celle des produits de bas diminue.

Ceci est dû à la dissociation qui est importante à haute températures

VI-5-3 Evolution de la température de fin de combustion en fonction de la richesse, pression ($P=10$ bars) :

En examinant l'allure d'une des courbes, nous pouvons remarquer que la température de fin de combustion augmente avec la richesse jusqu'à atteindre une valeur maximale pour une richesse voisine de l'unité «mélange stoechiométrique». Au de là de cette valeur, la température diminue avec la richesse.

Ceci peut être expliqué par le fait que dans un mélange (combustible/ comburant), la quantité de ce dernier doit être suffisante pour brûler la totalité du combustible ; si ce n'est pas le cas c'est tout le schéma réactionnel qui se trouve modifié et qui influe par la suite sur la valeur de l'enthalpie et par conséquent sur la température de fin de combustion.

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

VI-5-4 Evolution de la température de fin de combustion en fonction de la pression ; ($r=0.8$) :

La première remarque l'on peut faire, c'est que pour tous ces combustibles, la température de fin de combustion a pratiquement le même comportement avec la pression ; ce qui fait que les courbes ont presque une même allure ; la température augmente avec la pression .

La deuxième remarque est que l'évolution de température est rapide pour les pression relativement faibles et lente pour les pressions élevées.

Le phénomène de l'augmentation de la température de fin de combustion avec la pression peut être expliquée par le fait que l'augmentation de cette dernière la dissociation des produits de combustion.

CONCLUSION

CONCLUSION

Cette étude nous a permis de comprendre un peu l'importance de la température d'équilibre dans une réaction de combustion. D'évaluer les effets de la température initiale, de la richesse de mélange et la pression sur la composition finale.

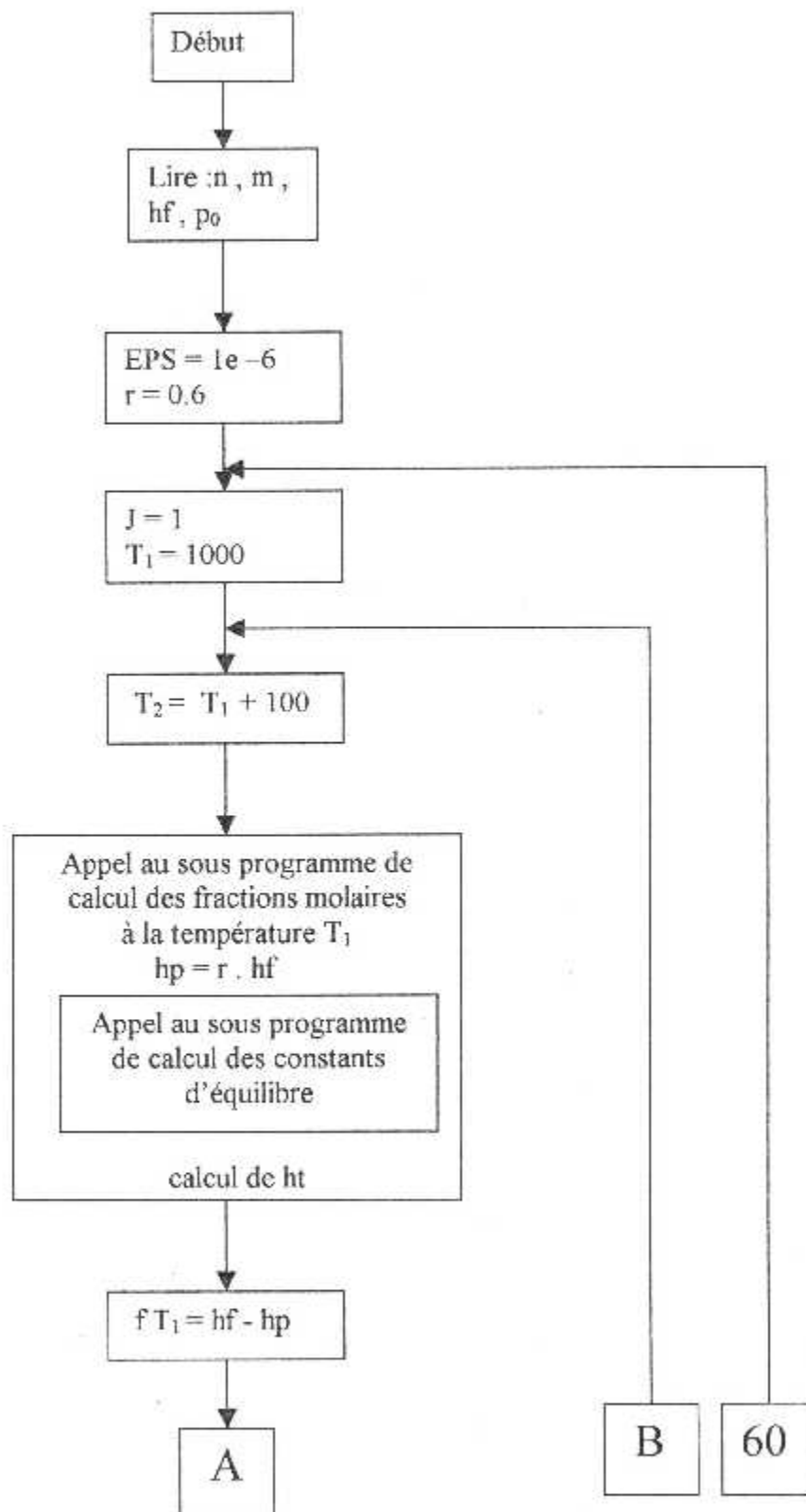
La méthode des ENTHALPIES TOTALES nous a permis d'obtenir des Résultats acceptables car ils sont d'une précision comparable à celle des valeurs fournies par la documentation.

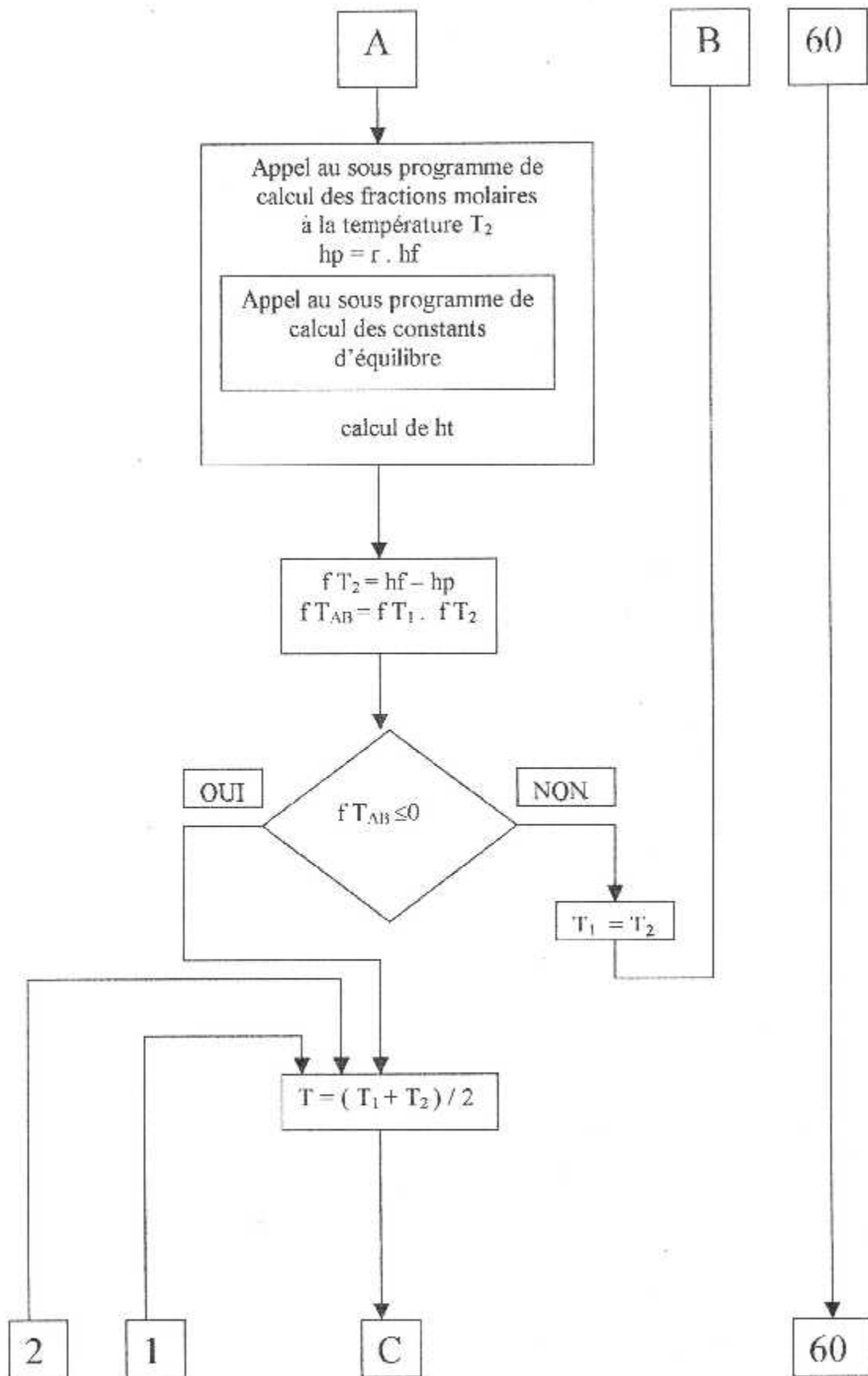
Malgré l'équation d'état des gaz parfaits ne constituent que des lois limites dans des pressions et températures connues, mais les équations mathématiques auxquelles elle conduit sont très simples par rapport à celles données par l'équation d'état des gaz réel.

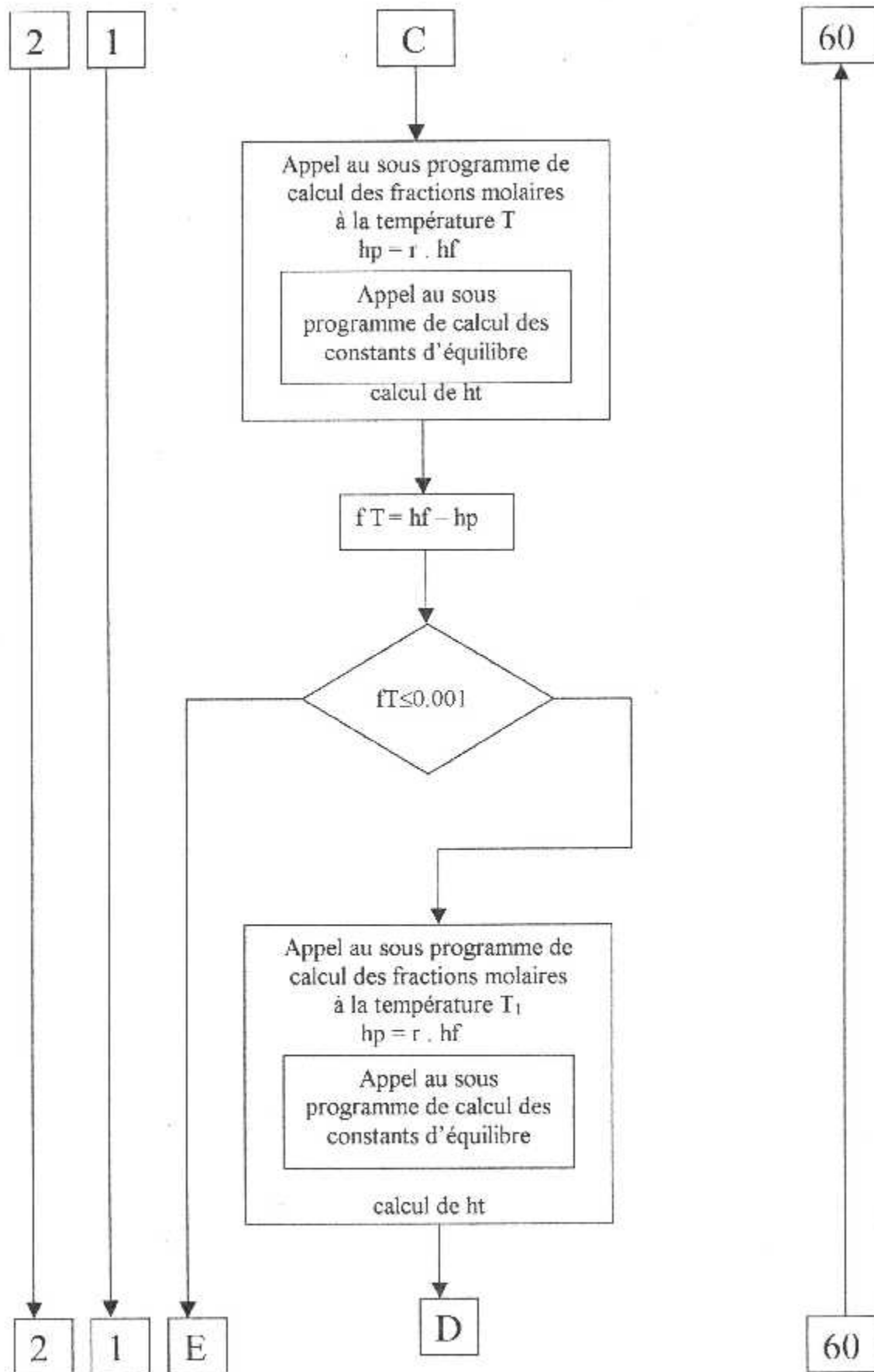
Nos résultats peuvent être améliorés en considérant un plus grand nombre de produits de combustion d'où le choix de la méthode de résolution numérique à prévoir en conséquence.

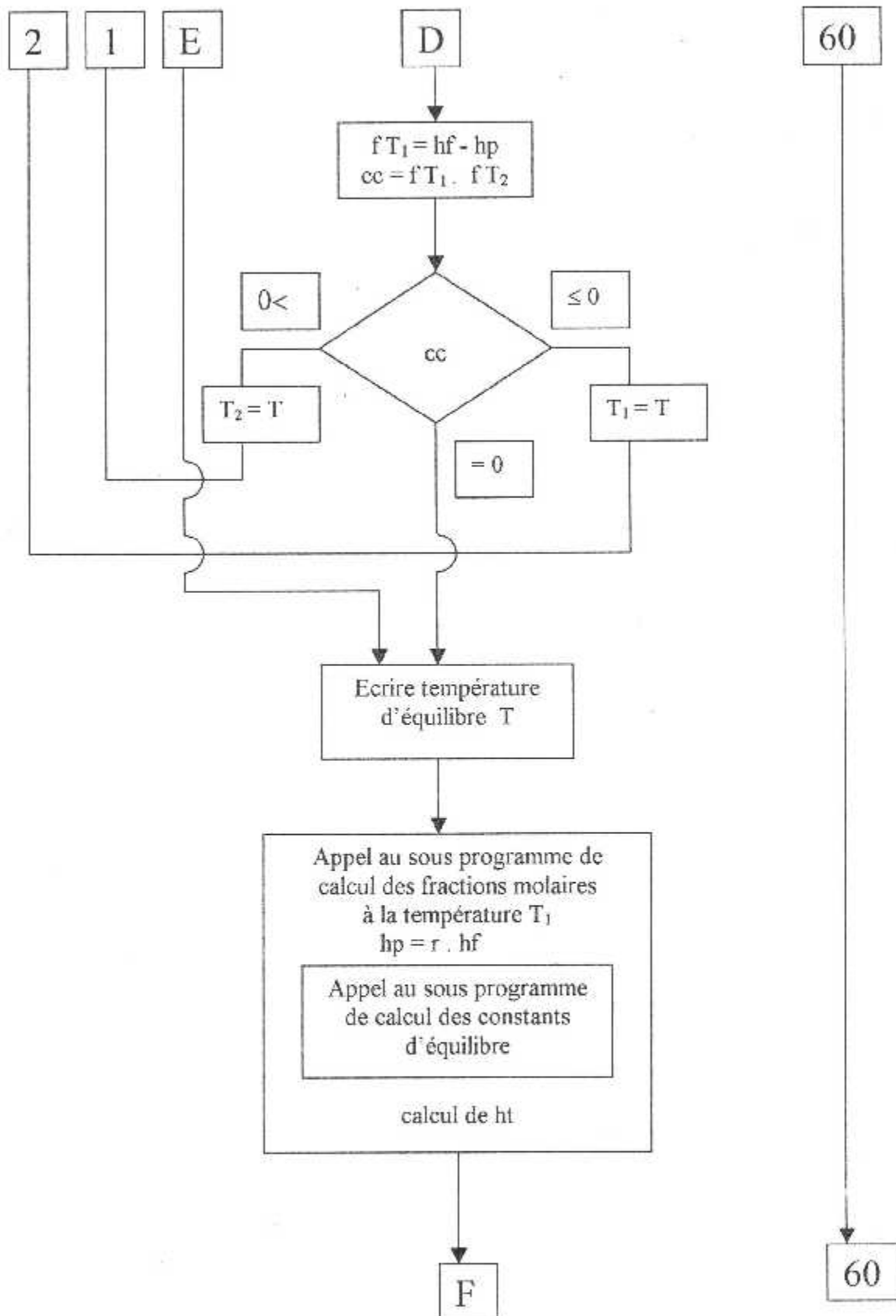
Les combustibles les plus performants sont ceux à haute énergie mais ces derniers présentent un inconvénient majeur à savoir la pollution de l'atmosphère. car ils comprennent les produits de combustion lourds tels que le dioxyde de carbone et le monoxyde de carbone. Pour conseiller l'avantage de la performance et limiter les inconvénients de la pollution, il faut arriver à un compromis.

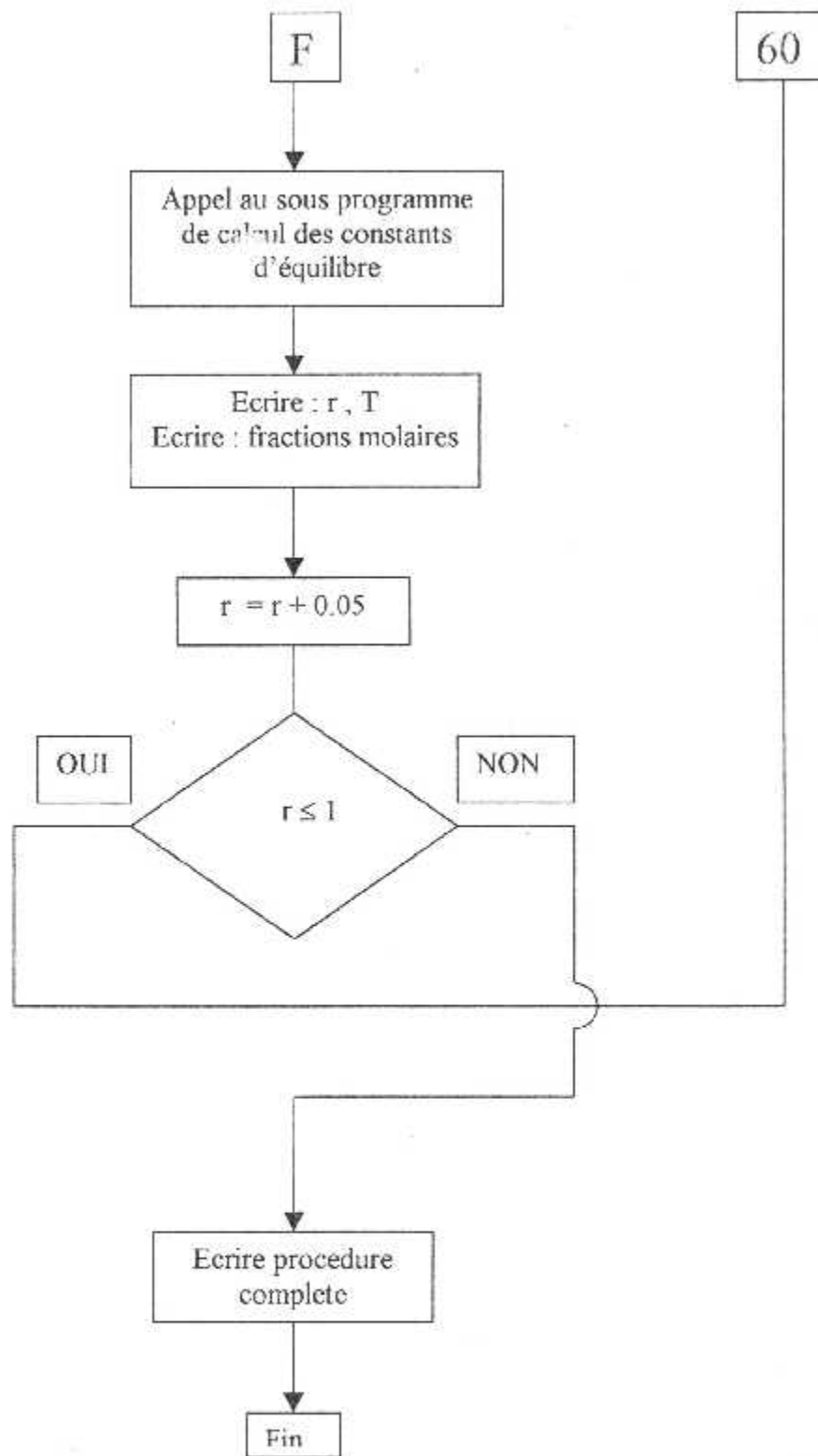
ANNEXES

PROGRAMME DE CALCULE DE LA TEMPERATURE D'EQUILIBRE :ORGANIGRAME :









1 POLYNOMES DE GORDON ET MC BRIDE :

Pour chaque espèce, les fonctions thermodynamique telles que :chaleur spécifique, enthalpie et entropie sont fonction de la température et sont données en utilisant les coefficients des polynômes de GORDON ET MC BRIDE :

$$CP / R = a_1 + a_2 T + a_3 T^2 + a_4 T^3 + a_5 T^4$$

$$H / RT = a_1 + (a_2 / 2) T + (a_3 / 3) T^2 + (a_4 / 4) T^3 + (a_5 / 5) T^4 + a_6 / T$$

$$S / R = a_1 \ln (T) + a_2 T + (a_3 / 2) T^2 + (a_4 / 3) T^3 + (a_5 / 5) T^4 + a_7$$

Les coefficients $a_i(i=1.7)$ sont tablés pour différent éléments chimiques et ne sont valables que pour des températures comprises entre (T=1000K) et (T=6000K)

	H	O	N	H ₂
HF(T=298K)	+52.103	+59.554	+112.975	-0.000
S ₀ (T=298K)	+27.392	+38.468	+36.613	+31.207
a ₁	+2.5000000 E+ 00	+2.5420596 E+00	-2.4502682 E+00	+3.1001901 E+00
a ₂	+0.0000000 E+00	-2.7550619 E-05	+1.0661458 E-04	+5.1119464 E-04
a ₃	+0.0000000 E+00	-3.1028033 E-09	-7.4653373 E-08	+5.2644110 E-08
a ₄	+0.0000000 E+00	+4.5510674 E-12	+1.8796524 E-11	-3.4909973 E-11
a ₅	+0.0000000 E+00	-4.3680515 E-16	-1.0259839 E-15	+3.6945345 E-15
a ₆	+2.5471627 E+04	+2.9230803 E+04	+5.6116040 E+04	-8.7738042 E+02
a ₇	-4.6011763 E-01	+4.9203080 E+00	+4.4487581 E+00	-1.9662421 E+00

	H ₂ O	C O ₂	N ₂	N O ₂
HF(T=298K)	-57.795	-94.054	+0.000	+7.910
S ₀ (T=298K)	-45.106	+51.072	+45.770	+57.340
a ₁	+2.7167633 E+00	+4.4608041 E+00	+2.8963194 E+00	+4.6240771 E+00
a ₂	+2.9451374 E-03	+3.0981719 E-03	+1.5154866 E-03	+2.5260332 E-03
a ₃	-8.0224373 E-07	-1.2392571 E-06	-5.7235277 E-07	-1.0609498 E-06
a ₄	+1.0226668 E-10	+2.2741325 E-10	+9.9807393 E-11	+1.9879239 E-10
a ₅	-4.8472147 E-15	-1.5525954 E-14	-6.5223355 E+15	-1.3799384 E-14
a ₆	-2.9905826 E+04	-4.8961442 E+04	+9.0586184 E+02	+2.2899900 E+03
a ₇	-6.6305671 E+00	-9.8635982 E-01	+6.1615148 E+00	+1.3324138 E+00

	OH	CO	NO	O ₂
HF(T=298K)	+3.318	-26.417	+21.580	+0.000
S ₀ (T=298K)	+43.881	+47.214	+50.347	+49.005
a ₁	+2.9106427 E+00	+2.9840696 E+00	+3.1890000 E+00	+3.6219535 E+00
a ₂	+9.5931650 E-04	+1.4891390 E-03	+1.3382280 E-03	+7.3618264 E-04
a ₃	-1.9441702 E-07	-5.7899684 E-07	-5.2899318 E-07	-1.9652228 E-07
a ₄	+1.3756646 E-11	+9.5919332 E-10	+9.5919332 E-11	+3.6201558 E-11
a ₅	+1.4114542 E-16	-6.9353550 E-15	-6.4847932 E-15	-2.8945627 E-11
a ₆	+3.9353815 E+03	-1.4245228 E+04	+9.8283290 E+03	-1.2019825 E-03
a ₇	+5.4423445 E+00	+6.3479156 E+00	+6.7458126 E+00	+3.6150960 E+00

REMARQUES :

B) pour étudier l'influence du préchauffage . Il est nécessaire d'avoir les coefficients a_i(i=1,7) des espèces chimiques pour T=300K < T<1000K

	O ₂	N ₂	CO ₂	H ₂ O
a ₁	+0.3625598 E+01	+0.3674826 E+01	+0.2400779 E+01	+0.4070127 E+01
a ₂	-0.18782184 E-02	-0.1208150 E-02	+0.8735095 E-02	-0.1108449 E-02
a ₃	+0.7055454 E-05	+0.2324010 E-05	-0.6607087 E-05	+0.4152118 E-05
a ₄	-0.6763513 E-08	-0.6321755 E-09	+0.2002186 E-08	-0.2963740 E-08
a ₅	+0.2155599 E-11	-0.2257725 E-12	+0.6327403 E-15	+0.8070210 E-12
a ₆	-0.1047522 E+04	-0.1061158 E+04	-0.4837752 E+05	-0.3029972 E+05
a ₇	+0.4305277 E+01	+0.2358042 E+01	+0.9695145 E+01	-0.3227004 E+00

B) pour quelques combustibles , les fonctions thermodynamiques (C_p,H,S) , sont fonction de la température et sont donnée sous formes de polynômes comme suit :

$$C_p / R = a_0 + b_0 T + c_0 T^2$$

$$H / RT = a_0 + (b_0 / 2) T + (c_0 / 3) T^2 + d_0 / T$$

$$S / R = a_0 \ln (T) + b_0 T + (c_0 / 2) T^2 + e_0$$

	CH ₄	C ₆ H ₆	C ₇ H ₁₇	C _{14.4} H _{24.9}
a ₀	+1.971324	-2.545087	+4.0652	+7.9710
b ₀	+7.871586 E-03	+4.79554 E-02	+6.0977 E-02	+1.1954 E-01
c ₀	-1.048592 E-06	-2.030765 E-05	-1.8801 E-05	-3.6858 E-05
d ₀	-9.930422 E+03	+8.782234 E+03	-3.5880 E+04	-1.9385 E+04
e ₀	-8.873728	+3.348825 E+01	+1.545 E+01	-1.7879 E+00

II ENTHALPIE SENSIBLE :

$$\int_0^T CP \, dT \text{ (Kcal / Mole)}$$

T°K	O ₂	N ₂	CO ₂	H ₂ O	CO	H ₂	OH	H	O
298.16	2.075	2.072	2.238	2.368	2.073	2.024	2.393	1.481	1.607
2000	16.223	15.490	24.093	19.740	15.635	14.680	15.247	9.936	10.143
2100	17.129	16.351	25.539	20.968	16.503	15.504	16.082	10.433	10.641
2200	18.040	17.217	26.991	22.211	17.375	16.334	16.923	10.930	11.138
2300	18.957	12.035	28.468	23.469	18.249	17.174	17.770	11.426	11.636
2400	19.879	19.957	29.910	24.739	24.739	18.020	18.623	11.923	12.134

III ENTHALPIE DE FORMATION DANS L'ETAT STANDARD A LA TEMPERATURE T=298.16 (Kcal / Mole) :

C ₃ H ₈	O ₂	N ₂	CO ₂	H ₂ O	CO	H ₂	OH	H	O
-24.82	0.00	0.00	-94.04	-57.80	+26.42	0.00	+9.40	+52.09	+59.16

IV CONSTANTES D'EQUILIBRE :

	a	b	c	d	e
	11	12	13	14	15
	H ₂ ↔ 2H	O ₂ ↔ 2O	↔	↔	↔
KP	(PH) ²	(PO) ²	(PCO) ² . PO ₂	(PII) ² . PO ₂	(POH) ² . PH ₂
T°K	PH ₂	PO ₂	(PCO ₂) ²	(PH ₂ O) ²	(PH ₂ O) ²
2000	2.63 E-06	5.30 E-07	1.90 E-07	8.20 E-08	1.90 E-08
2100	9.68 E-06	2.30 E-06	9.00 E-06	3.40 E-07	1.00 E-07
2200	3.16 E-05	8.70 E-06	3.80 E-05	1.30 E-06	4.50 E-07
2300	8.36 E-05	2.90 E-05	1.40 E-04	4.20 E-06	1.80 E-06
2400	2.51 E-04	8.80 E-05	2.40 E-03	1.30 E-05	6.00 E-06

V METHODE DE NEWTON :

V-2 RAPPEL DEL'ALGORITMME DE NEWTON

Une approximation initiale est donnée à la solution finale de l'équation à résoudre :

$$(1) \quad G(i+1) = G(i) - \frac{F(G(i))}{F'(G(i))}$$

- (2) Déterminée si la procédure doit continuée : si oui , aller à (3) , si non , aller à (4)
 (3) $i = i + 1$ et aller à (1)
 (4) la procédure est terminer

Le test dans l'étape (2) est :

$$\left| \frac{G(i+1) - G(i)}{G(i+1)} \right|$$

V- 3 APPLICATION DE LA METHODE DE NEWTON POUR LE CALCUL DE LA TEMPERATURE DE LA FLAMME

Nous avons à résoudre l'équation suivante :

$$H_{\text{brulé}}(T) - H_{\text{frais}}(T) = 0 \quad \text{pour une combustion à pression constant}$$

La méthode de NEWTON propose la relation suivante :

$$T(i+1) = T(i) - \frac{H_{\text{brulé}}(T) - H_{\text{frais}}(T)}{\frac{\partial H}{\partial T}} \quad (i)$$

La méthode démarre avec une première approximation pour ($T = 4000 \text{ K}$), l'itération est arrêtée pour une précision choisie ($\Gamma = 0.009 \text{ K}$).

VI- METHODE DE DICHOTOMIE :**VI-1- BUT:**

Trouver la solution de l'équation $F(T)=0$.
 T : température de fin de combustion.

VI-2- RAPPEL DE L'ALGORITHMME DE DICHOTOMIE :

On démarre avec une valeur choisie de la température T_1

Lire T_1

- ① $T_2 = T_1 + 100$
 $F_a = F(T_1) * F(T_2)$
 Déterminer $F_a > 0$: si oui, aller à ②, si non, aller à ③
- ② $T_1 = T_2$, aller à ①
- ③ $T = (T_2 + T_1) / 2$
 Déterminer $|F_a| \leq 0.001$: si oui, aller à ④, si non, aller à ①
- ④ $F_b = F(T_1) * F(T)$
 Déterminer $F_b > 0$: si oui, aller à ⑤, si non, aller à ⑥
- ⑤ $T_1 = T$, aller à ③
- ⑥ Déterminer $F_b < 0$: si oui, aller à ⑦, si non, aller à ③
- ⑦ $T_2 = T$, aller à ③
- ⑧ La procédure est terminer avec T solution.

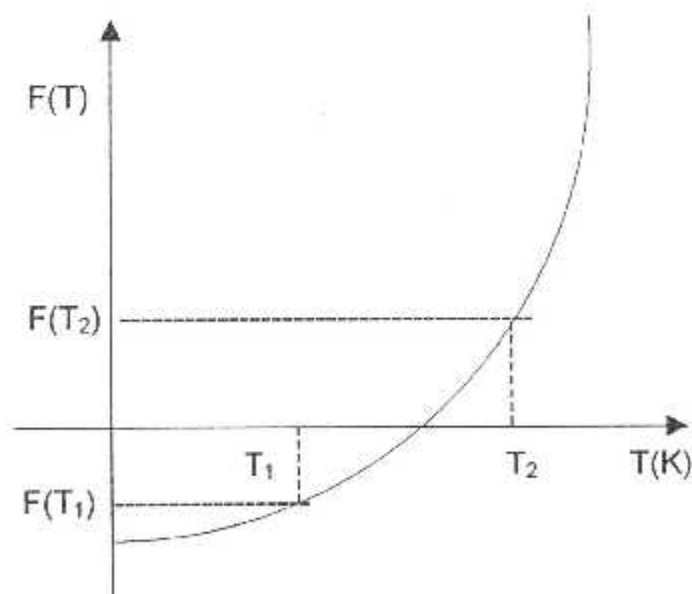
VI-3-EXEMPLE :

TABLE 3 :Diatomique Nitrogène (N_2) :

$$DH_f^{\circ} 298 = 0 \text{ cal / mole}$$

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

T (K)	H - H 298 (co_2) (cal / mole)	Cp_0 (co_2) (cal / mole / K)	S - S 298 (co_2) (cal / mole / K)
1000.000	5129.065	7.81510	8.738
1100.000	5916.771	7.93704	9.488
1200.000	6716.088	8.04744	10.184
1300.000	7525.902	8.14713	10.832
1400.000	8345.184	8.23691	11.439
1500.000	9172.980	8.31755	12.010
1600.000	10008.416	8.38980	12.549
1700.000	10850.684	8.45435	13.060
1800.000	11699.052	8.51189	13.545
1900.000	12552.849	8.56306	14.006
2000.000	13411.471	8.60847	14.447

TABLE 4 :Diatomique Oxygène (O_2) :

$$DH_f^{\circ} 298 = 0 \text{ cal / mole}$$

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

T (K)	H - H 298 (co_2) (cal / mole)	Cp_0 (co_2) (cal / mole / K)	S - S 298 (co_2) (cal / mole / K)
1000.000	5427.069	8.33610	9.188
1100.000	6264.984	8.42153	9.986
1200.000	7111.244	8.50306	10.723
1300.000	7965.475	8.58096	11.406
1400.000	8827.324	8.65549	12.045
1500.000	9696.469	8.72690	12.645
1600.000	10572.606	8.79542	13.210
1700.000	11455.465	8.86127	13.745
1800.000	12344.779	8.92465	14.253
1900.000	13240.318	8.98575	14.738
2000.000	14141.860	9.04475	15.200

TABLE 5 :Carbone Monoxide (CO) :

$$DH_f^{\circ} 298 = -26417 \text{ cal / mole}$$

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

T (K)	H - H 298 (CO ₂) (cal / mole)	Cp ₀ (CO ₂) (cal / mole / K)	S - S 298 (CO ₂) (cal / mole / K)
1000.000	5183.750	7.93072	8.812
1100.000	5982.725	8.04680	9.573
1200.000	6792.728	8.15145	10.278
1300.000	7612.662	8.24554	10.924
1400.000	8441.512	8.32989	11.549
1500.000	9278.342	8.40528	12.126
1600.000	10122.294	8.47247	12.671
1700.000	10972.587	8.53218	13.186
1800.000	11828.503	8.58511	13.675
1900.000	12689.405	8.63191	14.141
2000.000	13554.704	8.67321	14.585

TABLE 6 :Diatomique hydrogène (H₂) :

$$DH_f^{\circ} 298 = 0 \text{ cal / mole}$$

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

T (K)	H - H 298 (CO ₂) (cal / mole)	Cp ₀ (CO ₂) (cal / mole / K)	S - S 298 (CO ₂) (cal / mole / K)
1000.000	4941.126	7.20441	8.492
1100.000	5666.452	7.30159	9.183
1200.000	6401.325	7.39522	9.822
1300.000	7145.357	7.48468	10.418
1400.000	7898.100	7.56932	10.976
1500.000	8659.040	7.64851	11.501
1600.000	9427.598	7.72156	11.997
1700.000	10203.125	7.78778	12.467
1800.000	10984.903	7.84648	12.914
1900.000	11772.145	7.89691	13.339
2000.000	12563.987	7.93835	13.745

TABLE 7 :Monoatomique hydrogène (H) :

$$DHf^{\circ} 298 = 52103 \text{ cal / mole}$$

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

T (K)	H - H 298 (co ₂) (cal / mole)	Cp ₀ (co ₂) (cal / mole / K)	S - S 298 (co ₂) (cal / mole / K)
1000.000	4967.975	4.96797	6.011
1100.000	5464.772	4.96797	6.485
1200.000	5961.569	4.96797	6.917
1300.000	6458.867	4.96797	7.315
1400.000	6955.165	4.96797	7.683
1500.000	7451.962	4.96797	8.026
1600.000	7948.760	4.96797	8.346
1700.000	8445.557	4.96797	8.647
1800.000	8942.355	4.96797	8.931
1900.000	9439.153	4.96797	9.200
2000.000	9935.950	4.96797	9.455

TABLE 8 :Monoatomique Oxygène (O) :

$$DHf^{\circ} 298 = 59554 \text{ cal / mole}$$

$$S^{\circ} = 36468 \text{ cal / mole}$$

T (K)	H - H 298 (co ₂) (cal / mole)	Cp ₀ (co ₂) (cal / mole / K)	S - S 298 (co ₂) (cal / mole / K)
1000.000	69072.943	10.96039	47.331
1100.000	70168.775	10.95621	48.375
1200.000	71264.195	10.95238	49.328
1300.000	72359.257	10.94892	50.205
1400.000	73453.998	10.94587	51.016
1500.000	74548.453	10.94326	51.771
1600.000	75642.663	10.94110	52.477
1700.000	76736.688	10.93942	53.140
1800.000	77830.564	10.93823	53.766
1900.000	78924.351	10.93756	54.357
2000.000	80018.091	10.93743	54.918

TABLE 9 :Hydroxil (OH) :DH^o 298 = 9318 cal / moleS^o = 43881 cal / mole

T (K)	H - H 298 (co ₂) (cal / mole)	Cp ₀ (co ₂) (cal / mole / K)	S - S 298 (co ₂) (cal / mole / K)
1000.000	5117.633	7.33162	8.611
1100.000	5856.779	7.45030	9.315
1200.000	6607.497	7.56310	9.968
1300.000	7369.209	7.67019	10.578
1400.000	8141.351	7.77175	11.150
1500.000	8923.381	7.86794	11.690
1600.000	9714.766	7.95894	12.200
1700.000	10515.000	8.04492	12.685
1800.000	11323.590	8.12606	13.148
1900.000	12140.057	8.20254	13.589
2000.000	12963.947	8.27453	14.012

TABLE 10 :Nitrique (NO) :DH^o 298 = 215800 cal / moleS^o = 50347 cal / mole

T (K)	H - H 298 (co ₂) (cal / mole)	Cp ₀ (co ₂) (cal / mole / K)	S - S 298 (co ₂) (cal / mole / K)
1000.000	5312.234	8.12297	9.028
1100.000	6129.736	8.22526	9.807
1200.000	6956.943	8.31723	10.626
1300.000	7792.865	8.39968	11.196
1400.000	8636.586	8.47334	11.821
1500.000	9487.266	8.53897	12.408
1600.000	10344.135	8.59724	12.961
1700.000	11206.493	8.64882	13.483
1800.000	12073.697	8.69435	13.979
1900.000	12945.181	8.73443	14.450
2000.000	13820.423	8.76963	14.899

TABLE 1 :Carbone dioxyde (CO₂) :

$$DH_f^{\circ} 298 = -94054 \text{ cal / mole}$$

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

T (K)	H - H 298 (CO ₂) (cal / mole)	Cp ₀ (CO ₂) (cal / mole / K)	S - S 298 (CO ₂) (cal / mole / K)
1000.000	7987.024	12.97954	13.270
1100.000	9296.876	13.21332	14.518
1200.000	10628.892	13.42318	15.677
1300.000	11980.774	13.61099	16.759
1400.000	13350.415	13.77854	17.774
1500.000	14735.868	13.92752	18.730
1600.000	16135.360	14.05960	19.633
1700.000	17547.273	14.17632	20.489
1800.000	18970.155	14.27917	21.302
1900.000	20402.695	14.36958	22.066
2000.000	21843.703	14.44888	22.816

TABLE 2 :EAU (H₂O) :

$$DH_f^{\circ} 298 = -57795 \text{ cal / mole}$$

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

T (K)	H - H 298 (CO ₂) (cal / mole)	Cp ₀ (CO ₂) (cal / mole / K)	S - S 298 (CO ₂) (cal / mole / K)
1000.000	6208.914	9.85065	10.484
1100.000	6209.812	10.16392	11.438
1200.000	8241.040	10.45732	12.335
1300.000	9300.649	10.73179	13.183
1400.000	10386.798	10.98828	13.988
1500.000	11497.734	11.22769	14.754
1600.000	12631.794	11.45090	15.486
1700.000	13787.406	11.65877	16.186
1800.000	16157.379	11.85215	16.858
1900.000	14963.068	12.03185	17.504
2000.000	17369.008	12.19865	18.1258

TABLE 1 :

Carbone dioxyde (CO_2) :

$$\text{DHF}^{\circ} 298 = - 94054 \text{ cal / mole}$$

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

T (K)	H - H 298 (CO_2) (cal / mole)	Cp_0 (CO_2) (cal / mole / K)	S - S 298 (CO_2) (cal / mole / K)
1000.000	7987.024	12.97954	13.270
1100.000	9296.876	13.21332	14.518
1200.000	10628.892	13.42318	15.677
1300.000	11980.774	13.61099	16.759
1400.000	13350.415	13.77854	17.774
1500.000	14735.868	13.92752	18.730
1600.000	16135.360	14.05960	19.633
1700.000	17547.273	14.17632	20.489
1800.000	18970.155	14.27917	21.302
1900.000	20402.695	14.36958	22.066
2000.000	21843.703	14.44888	22.816

TABLE 2 :

EAU (H_2O) :

$$\text{DHF}^{\circ} 298 = - 57795 \text{ cal / mole}$$

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

T (K)	H - H 298 (CO_2) (cal / mole)	Cp_0 (CO_2) (cal / mole / K)	S - S 298 (CO_2) (cal / mole / K)
1000.000	6208.914	9.85065	10.484
1100.000	6209.812	10.16392	11.438
1200.000	8241.040	10.45732	12.335
1300.000	9300.649	10.73179	13.183
1400.000	10386.798	10.98828	13.988
1500.000	11497.734	11.22769	14.754
1600.000	12631.794	11.45090	15.486
1700.000	13787.406	11.65877	16.186
1800.000	16157.379	11.85215	16.858
1900.000	14963.068	12.03185	17.504
2000.000	17369.008	12.19865	18.1258

BIBLIOGRAPHIE

BIBLIOGRAPHIE

- Température et composition des gaz brûlés
TECKNIQUE D'INGENIEUR Série A 3
- DJAMIE ISMAIL - Carburants et moteurs.
- G.R FERGUSON.
INTERNAL COMBUSTION ENGINES.
- BUTY - le principe de la conservation de l'énergie
application aux moteurs a combustion interne
- CARBURANTS ET COMBUSTIBLES POUR MOTEUR
A COMBUSTION INTERNE
- THESES :les cotes (18/2000) , (23/1996)
- FORTRAN 77 (exercices corrigés)
- A.CARRERE - thermodynamique générale et applications