

République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de L'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique
université SAAD DAHLEB BLIDA

Département d'Aéronautique



002/07
Ex 2



Mémoire du projet de fin d'études
Pour l'obtention du diplôme d'ingénieur d'état en aéronautique

Option : Propulsion

Sujet :

**Contrôle des paramètres de combustion d'une flamme laminaire prémélangée
en équilibre et en hors équilibre chimique par l'analyse des produits**

Présenté par :

BEKHTI AHMED

Devant le jury :

H.KEBBAB
R.RENANE
N.BEKKA
R.ALLOUCHE
H.BOUDJELLEL

Président
Promoteur
Co-promoteur
Examineur
Examinatrice

Univ.Blida
Univ.Blida
Univ.Blida
Univ.Blida
Univ.Blida

Promotion : 2006/2007

PAS DE CD

REMERCIEMENTS

Je remercie avant tout Dieu d'avoir éclairé notre route et nous avoir donné la force, le courage et la volonté qui ont permis de réaliser ce travail.

Je tiens à exprimer ma profonde gratitude et mes respectueux remerciements à mon promoteur Mr.R.RENANE pour son suivi et ses orientations.

Mes vifs remerciements vont à Monsieur le Président et aux membres du jury d'avoir accepté d'évaluer mon travail.

Je tiens à exprimer mes vifs remerciements à tous ceux qui, par leurs travaux, leurs idées, leurs présentations, leurs collaborations ou leurs relectures, ont participé de près ou de loin à la réalisation de ce mémoire

Dédicace

Je dédie ce modeste ouvrage

A mes très chers parents que j'aime très fort,

*mon père qui s'est privé des caprices de
la vie au profit de mon bonheur,*

*ma mère qui s'est sacrifiée au bien
être de sa famille*

A mes sœurs Nabila et Fatima

Pour n'oublier personne, à ma famille entière.

A tous mes amis et en particulier la promotion 2006/2007 aéronautique

A tous ceux que j'aime et qui m'aiment.

B. Ahmed

Résumé :

Ce travail est une contribution dans l'étude de la flamme laminaire de pré mélange à l'équilibre et à l'hors équilibre chimique et le contrôle de la température et des polluants. Le modèle mathématique est basé sur la conservation d'enthalpie entre deux états (équilibre, couplés avec le premier principe de la thermodynamique pour définir les enthalpies des réactions et la température adiabatique de combustion à pression constante. Pour atteindre cet objectif, nous devons savoir les produits de la combustion complète de l'hydrocarbure et toutes les espèces des produits de combustion après dissociation et leurs fractions molaires et les équations d'équilibre des réactions de dissociations. En outre, nous calculons les enthalpies élémentaires de réactions d'équilibre et l'entropie en utilisant des polynômes empiriques récemment publiés par la NASA (Bonnie J. McBride, Michael J. Zehe, and Sanford Gordon)[2]. Le système des équations obtenu est résolu par la méthode de Newton Raphson.

Ainsi, on étudie la combustion dans son état hors équilibre pour pouvoir déterminer la variation des espèces et de la température dans le front de la flamme en utilisant des équations avec des paramètres réduites, et une formule simplifiée de taux de réaction [16]

Parmi les résultats obtenus, les paramètres assurant une meilleure efficacité avec moins de consommation de fuel et moins de polluants.

Abstract:

This work is a contribution in the study of the laminar premixed flame in chemical equilibrium and non equilibrium, and the control of the temperature and the pollutants. The mathematical model is based on the conservation of enthalpy between two states of equilibrium, coupled with the first principle of thermodynamics to define the enthalpy of the reactions and the adiabatic temperature of combustion in constant pressure. To achieve this goal, we must know the products of the complete combustion of hydrocarbon and all the species of the products of combustion after dissociation and their molar fractions and the equilibrium equations of the reactions of dissociations. Moreover, we calculate the elementary enthalpy of reactions of equilibrium and the entropy by using empirical polynomials recently published by NASA (Bonnie J. McBride, Michael J. Zehe, and Sanford Gordon)[2]. The system of the equations obtained is solved by the method of Newton-Raphson.

Thus, a studies of combustion in his state except equilibrium to be able to determine the variation of the species and the temperature in the face of the flame by using equations with parameters reduced, and a simplified formula of rate of reaction [16]

Among the results obtained, parameters ensuring a better effectiveness with less consumption of fuel and less pollutants.

Sommaire

Introduction	1
---------------------	----------

Chapitre I : généralités sur la combustion et les flammes

1. approche chimique de la combustion	3
--	----------

2. Les conditions de combustion	3
--	----------

3. Les combustibles	4
----------------------------	----------

4. La grande famille des hydrocarbures	6
---	----------

5. Définitions de la thermodynamique	6
---	----------

5.1. Science de la chaleur et des machines thermiques	7
--	----------

5.2. Science des grands systèmes en équilibre	7
--	----------

6. Notion de gaz parfait	7
---------------------------------	----------

6.1. Description d'un gaz parfait	7
--	----------

6.2. Limites du modèle et gaz réel	8
---	----------

7. Lois de la thermodynamique	8
--------------------------------------	----------

7.1. Principe zéro de la thermodynamique	9
---	----------

7.2. Premier principe de la thermodynamique	9
--	----------

7.3. Deuxième principe de la thermodynamique et l'entropie	10
---	-----------

7.3.1. Énoncé de la loi	10
--------------------------------	-----------

7.3.2. Notion de réversibilité	11
---------------------------------------	-----------

7.3.3. Formulations du second principe	11
---	-----------

7.4. Troisième principe de la thermodynamique	13
8. Équation d'état et lois de Joule	13
9. Enthalpie	14
9.1. Propriétés	15
10. Enthalpie libre	16
10.1. Définition	16
10.2. Formule de l'enthalpie libre	17
11. Equilibre thermodynamique	18
11.1. Définition	18
11.2. Constante d'équilibre	18
11.3. Notion d'activité	19
11.4. Lien avec l'enthalpie libre	19
12. Le pouvoir calorifique	20
13. Les types de flammes	20
13.1. Combustion laminaire	21
13.1.1. Flamme laminaire prémélangée	21
13.1.2. Flamme laminaire non prémélange	23
13.2. Combustion Turbulente.	24
13.2.1. Combustion turbulente prémélangée	25
13.2.2. Combustion turbulente non- prémélangée	27

14. Codes de calculs utilisés pour l'étude de la combustion et les flammes 30

Chapitre II : détermination de l'état finale de la combustion

1. Définitions de base	37
1.1. Grandeurs élémentaires	37
1.2. La richesse	38
1.3. La dissociation	40
2. hypothèses	40
3. calcul de l'état final de la combustion	41
3.1. Calcul de l'enthalpie des réactifs	42
3.1.1. L'enthalpie du carburant H_{Rc}	42
3.1.2. L'enthalpie de l'air H_a	43
3.2. Calcul de l'enthalpie des produits	43
3.2.1. Calcul des nombres de moles des produits de combustion	43
3.2.2. Calcul de l'enthalpie des produits	46
3.2.3. Calcul de température de fin de combustion	46
3.3. Organigramme	48

Chapitre III : Méthodes de résolution numérique

1. méthode de NEWTON_RAPHSON	51
1.1. Histoire	51
1.2. Description de la méthode	51
1.3. Les conditions d'arrêt	54
1.4. Convergence de la méthode	54
2. La méthode de GAUSS	54
2.1. Principe	54
2.2. Description de la méthode	54
2.2.1. Première étape	55

2.2.2. Deuxième étape	56
2.2.3. Troisième étape	57
2.3. Algorithme général	57
2.3.1. Première phase	57
2.3.2. Deuxième phase	57
2.3.3. Troisième phase	58
<i><u>Chapitre IV : étude de la flamme laminaire prémélangée</u></i>	
1. Équations de l'onde de combustion	61
1.1. Équation de continuité	61
1.2. Équation de quantité de mouvement	61
1.3. Équation de l'énergie	61
1.4. Équations d'état	61
2. Propagation d'une flamme laminaire	66
2.1 Rappels sur les phénomènes de transport	67
2.2. Les nombres adimensionnelles	68
2.3. Vitesse de flamme laminaire	68
2.3.1. Théorie de Mallard et Le Châtelier	69
2.3.1.1. Interprétation de l'épaisseur de la zone de réaction vive (δ_r)	70
2.3.2. Théorie de Zeldovitch, Franck-Kamenetskii et Semenov (1938)	71
2.3.2.1. Hypothèses simplificatrices	71
2.3.2.2. La vitesse de la flamme	72
2.3.2.3. L'épaisseur de la flamme	73
2.3.3 Théorie diffusionnelle	74
2.3.3.1. Introduction	74
3. Présentation du modèle étudié	76
3.1. Cinétique chimique	76
3.2. Calcul de la vitesse de flamme	79

Chapitre V : résultats et discussions

1. l'effet de la température d'entrée d'air sur la température adiabatique de la flamme pour la combustion du gasoil et du Kérosène pour différentes richesses.	80
2. Effet de la richesse Φ sur la température adiabatique de flamme pour la combustion de méthane	81
3. Effet de la richesse Φ sur l'évolution de la composition molaire des produits de combustion Kérosène-Air	81
4. Effet de la température de préchauffage sur la production des polluants pour différentes richesses.	82
5. Variation de température du gaz en fonction de la plage de réaction	88
5.1. Effet du coefficient de conductivité thermique sur la variation de température	88
5.2. Effet de la température de préchauffage sur la variation de température	88
5.3. Effet de la richesse sur la variation de température	89
6. Variations de la fraction massique du carburant et du comburant en fonction de la plage de réaction	89
7. Variations du taux de réaction le long de la plage de réaction	89
Conclusion et perspectives	92

NOMENCLATURE :

A	Constante pré exponentielle
a_i, b_i	Constantes de GORDON MC BRIDE
C_p, C_v	Chaleur spécifique
d	diamètre du molécule
D_T	diffusivité thermique
ΔG	Fonction de Gibbs
H	Enthalpie
M, W	Masse molaire
n_i	nombre de moles de l'espèce i
N_t	nombre de moles totale
P	Pression
Q	Quantité de chaleur
R	Quantante des gaz parfait
rc	la richesse
S	l'entropie
T	la température
T_a	température d'activation
T_{ad}	température adiabatique
U	énergie interne
u	vitesse d'écoulement
V	volume
X_i	fraction molaire
Y_i	fraction massique
γ	Rapport de chaleurs spécifiques
Δ	Variation
ε	Valeur d'erreur
ϕ	richesse
λ	coefficient de conductivité thermique
ν	coefficient stoechiométrique du fuel ou l'oxygène
θ	température réduite
ρ	masse volumique
τ	temps de la réaction

ω

taux de réaction

ζ

variable de l'espace

FIGURES**PAGES**

Fig I.1 : combustion du méthane dans le dioxygène.....	3
Fig I.2 : le triangle du feu.....	4
Fig I.3 : la molécule de propane et de propène	5
Fig I.4 : Une classification des types de flammes en fonction de leur forme et de leur mélange réactionnel.[23].....	21
Fig I.5 : structure d'une flamme laminaire prémélangée[32].....	22
fig I.6 : profil d'une flamme laminaire prémélangée.....	22
Fig I.7 : structure et profile de la flamme laminaire de Diffusion	23
Fig I.8 : structure d'une triple flamme[7].....	24
Fig I.9 : Effet de turbulences sur l'étirement du front de flamme[w1].....	25
Fig I.10 : diagramme des régimes de la combustion turbulente prémélangée	28
Fig I.11 :flamme de diffusion faiblement turbulente.....	29
Fig I.12: Interaction à grande échelle de flammelettes	29
Fig I.13 : Interaction à petite échelle de flammelettes	30
fig I.14 :Structure de chemkin 2	36

Fig II.1 : structure de la flamme de prémélange [7].....	41
Fig II.2 : Flamme non prémélangée. En haut: configuration de l'écoulement; En bas: longueur de la flamme en fonction de la vitesse de l'écoulement. D'après Hottel & Hawthorne, 1949 .[7].....	41
Fig IV.1 : droite de Rayleigh.....	62
Fig IV.2 : Hyperbole d'Hugoniot.....	65
Fig IV.3 : Zone de déflagration.....	67.
Fig IV. 4 : Propagation de la chaleur suivant la théorie de Mallard et Le Châtelier.....	70
Fig IV.5 : Structure du front de flamme : profils de température, de fraction massique du combustible et de taux de réaction.....	71
Fig IV.6 – Détermination de l'épaisseur de la flamme.....	73
Fig IV. 7 : Propagation de la chaleur suivant la théorie Diffusionnelle.....	74
Fig.V.1 Evolution de la température de combustion du Gasoil avec de l'air en fonction de la température de préchauffage pour différentes richesses.....	83
Fig.V.2 Evolution de la température de combustion du Kerosen avec de l'air en fonction de la température de préchauffage pour différentes richesses.....	83

Fig.V.3 Evolution de la température de combustion en fonction de la richesse.....	84
Fig.V.4 Evolution de la température de combustion en fonction de la richesse.....	84
Fig.V.5. Variation des différentes espèces en fonction de la richesse pour la combustion (Kérosène- Air).....	85
Fig.V.6. Variation des principales espèces en fonction de la richesse pour la combustion (Kérosène- Air).....	85
Fig.V.7. Variation de principales espèces en fonction de la richesse pour la combustion (gasoil- Air).....	86
Fig.V.8 Evolution du monoxyde de carbone (CO) en fonction de la température de préchauffage pour différente richesse.....	86
Fig.V.9 Evolution du (NO) en fonction de la température de préchauffage pour différente richesse.....	87
Fig.V.10 Evolution du bioxyde de carbone (CO2) en fonction de la température de préchauffage pour différente richesse.....	87

Fig. V.11 Variation de température du gaz en fonction de la plage de réaction Pour différents λ (cef de cond)	90
---	----

Fig. V.12 Variation de température du gaz en fonction de la plage de réaction Pour différentes températures de préchauffage.....	90
--	----

Fig. V.13 Variation de température du gaz en fonction de la plage de réaction Pour différentes richesses.....	91
---	----

V.14. Variations du carburant et du comburant et le taux de réaction en fonction de la plage de réaction.....	91
---	----

Introduction

La combustion est un phénomène extrêmement répandu dans la nature, et c'est grâce à elle, en majeure partie, que l'activité humaine a pu se développer et se développer encore, quelquefois trop. Dans l'antiquité et jusqu'au moyen âge, le feu était même considéré comme l'un des quatre éléments de base dont l'univers entier était constitué. C'est dire que l'étude et la compréhension de ce qui concerne la combustion et le feu a un intérêt tout à fait important.

Mais qu'est-ce que le feu, qu'est-ce que la combustion, qu'est-ce qu'une flamme ? Il a fallu assez longtemps, dans l'histoire de la connaissance scientifique, pour le comprendre. A l'heure actuelle, de nombreux dispositifs industriels en tirent parti, mais quelquefois leur maîtrise parfaite fait encore défaut. Ces difficultés de compréhension viennent du fait que plusieurs phénomènes physiques et chimiques assez différents interviennent conjointement, et de façon couplée, dans ce que l'on appelle le feu.

A la base de ces phénomènes, se trouve d'abord un aspect chimique : ce n'est pas d'une seule réaction chimique, mais de nombreuses réactions chimiques qui ont lieu simultanément pendant les processus de combustion. [5]

Donc, la combustion est une réaction chimique, globalement exothermique, relativement lente au début mais pouvant devenir très rapide voire même violente, avec émission de rayonnements et élévation de température. Pour les combustibles usuels, qui sont en général des produits carbonés d'origine organique, la combustion correspond à une réaction chimique avec l'oxygène atmosphérique et conduit à la formation de dioxyde et de monoxyde de carbone, d'eau, ainsi que de composés comme le dioxyde de soufre se formant à partir d'impuretés minoritaires présentes dans le combustible.

De fait, on peut dire que la réaction de combustion est globalement une réaction d'oxydoréduction, où l'oxydant est appelé comburant et le réducteur combustible. Cette réaction comprend en réalité un grand nombre de réactions dites élémentaires, les unes consommant de la chaleur, les autres dégageant de la chaleur — le dégagement prenant finalement le pas sur la consommation.

La combustion comprend trois phases : l'inflammation, la propagation de la flamme et l'extinction. C'est pendant la première phase que se développe la combustion. [1],[4],[5],[22]

Le potentiel chimique emmagasiné dans les combustibles naturels est converti en énergie thermique puis en énergie mécanique dans les installations traditionnelles (chaudières thermiques, turboréacteur, turbines à gaz, etc.), en faisant parcourir aux produits de combustion un cycle thermodynamique propre à chaque système de conversion. Il est donc indispensable de pouvoir calculer pour chaque état du système après réaction chimique, les grandeurs thermodynamiques

qui lui correspondent [1]. La connaissance des propriétés thermodynamiques des produits de combustion et la détermination de leur état immédiatement après la réaction chimique au terme d'évolutions données, revêtent une importance essentielle dans l'étude des machines thermiques, la réduction de la consommation des combustibles et le contrôle des émissions de polluants [3]. La thermodynamique permet de déterminer l'état, et d'une façon générale les propriétés des gaz brûlés, en admettant que les conditions des équilibres mécanique et thermo-chimique sont réalisées.

Ce travail (contribution dans l'étude de la flamme laminaire de prémélange à l'équilibre et à l'hors équilibre chimique), est présenté en cinq chapitres :

Le premier chapitre est consacré pour des définitions de base (combustibles, types de flammes....) et de quelques grandeurs utilisées dans notre étude, avec un rappel des principes de la thermodynamique.

Le deuxième chapitre est une explication des différentes démarches suivies pour l'élaboration d'un programme qui nous permet de déterminer l'état final de la combustion.

Dans le troisième chapitre, les deux méthodes numériques sont expliquées en détail (Newton-Raphson) pour la résolution des systèmes d'équations non linéaires, et la méthode de (Gauss) pour la résolution des systèmes d'équations linéaires.[1] [28]

Dans le chapitre 4, on étudie l'état hors équilibre de la combustion, et les différentes théories des flammes laminaires prémélangées.

Et enfin, le chapitre 5 est une interprétation des résultats obtenus par notre étude.

CHAPITRE I

Généralités sur la combustion et les flammes

1. Approche chimique de la combustion

La réaction de combustion, comme toutes les réactions, est la rupture des liaisons entre les molécules de deux corps, et la création de nouvelles molécules plus stables chimiquement.

Exemple : combustion du méthane dans le dioxygène

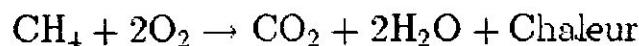
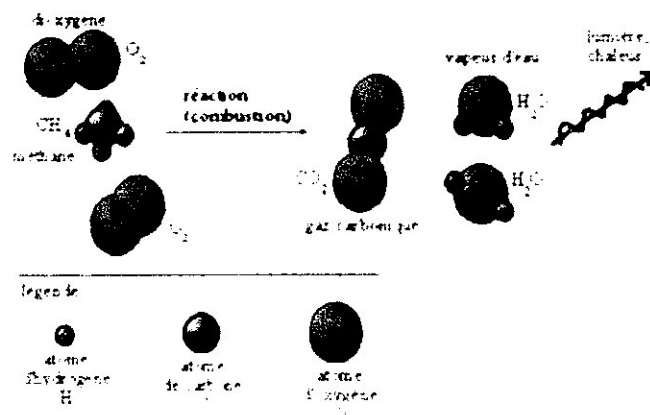


Fig I.1 : combustion du méthane dans le dioxygène

La combustion est une réaction d'oxydo-réduction, en l'occurrence l'oxydation d'un combustible par un comburant ;

- le combustible est le corps qui est oxydé durant la combustion ; c'est un réducteur, il perd des électrons ;
- le comburant est le corps qui est réduit ; c'est un oxydant, il gagne des électrons. [w2]

2. Les conditions de combustion :

Pour obtenir et entretenir une combustion il faut :

- ✓ - Un combustible sous forme gazeuse (pour les liquides : ils seront pulvérisés ou vaporisés et pour les solides, ils seront chauffés très fortement pour en extraire les gaz).

- ✳) Un comburant en suffisance

- Combustible et comburant seront mélangés dans les limites de l'inflammabilité.
- Un point chaud d'amorçage, arc électrique, matière en ignition, flamme...
- Une vitesse d'écoulement stable et suffisante (10 à 40 m/s) généralement en régime turbulent.

On définit ainsi classiquement le triangle du feu : [w2],[22]

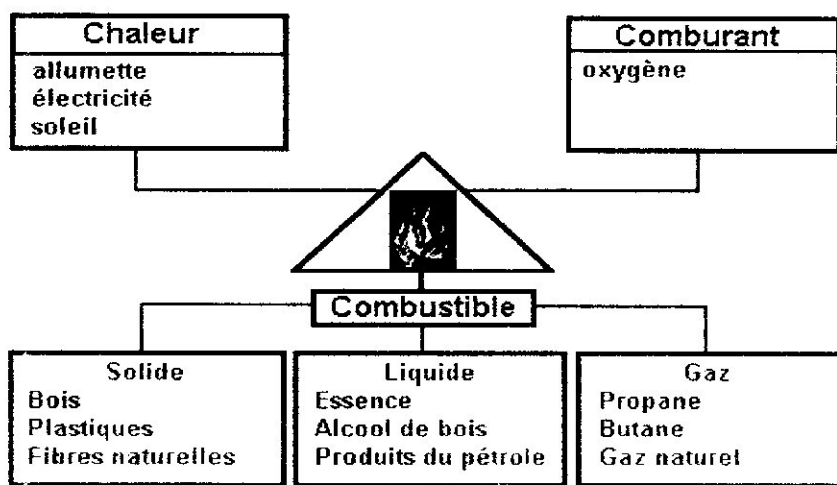
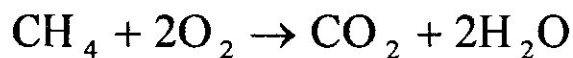


Fig 1.2 : le triangle du feu

La complexité du système réactif réside dans le fait que la combustion ne se déroule pas en une seule étape amenant aux produits finaux (typiquement le dioxyde de carbone et l'eau).

En réalité, de nombreux composés intermédiaires entrent en jeu, comme le monoxyde de carbone, des aldéhydes, des cétones, des alcènes et des espèces oxygénées. L'équation générale présentée ci-dessous montre uniquement la réaction globale mais ne contient aucune information sur les différentes étapes guidant réellement la transformation des réactifs en produits :



3. Les combustibles :

Un **combustible** est une matière qui, en présence d'oxygène et d'énergie, peut se combiner à l'oxygène (qui sert de comburant) dans une réaction chimique générant de la chaleur : la combustion.

La plupart des matériaux d'origine organique sont des combustibles. Par exemple, le bois, le charbon, le pétrole sont des combustibles.

On distingue:

- les combustibles *fossiles* (pétrole, charbon, gaz...), issus de matières organiques préhistoriques fossilisées. Leur combustion rejette dans l'atmosphère du dioxyde de carbone (CO_2) qui provient de la combinaison d'atomes de carbone issus du sous-sol et d'oxygène atmosphérique. Ces rejets de CO_2 participent à l'effet de serre et aux changements climatiques actuels.
- les *biocombustibles* (biocarburants liquides, copeaux ou granulés de bois, céréales et autres aspects de la biomasse), issus de plantes vivantes. Leur combustion présente un bilan CO_2 beaucoup plus faible (pour autant qu'on replante ce qui a été coupé) puisqu'elle rejette le CO_2 atmosphérique qu'ils ont accumulé au cours de leur croissance par photosynthèse. C'est donc une énergie renouvelable, mais pas non-polluante.

On parle aussi de combustible nucléaire pour désigner les matières utilisées pour produire de l'énergie par fission dans les centrales nucléaires, bien qu'il ne s'agisse pas d'une réaction de combustion.

Le combustible peut être:

- un gaz (butane, propane, gaz de ville, dihydrogène...),
- un liquide (essence, gasoil, huile, kérosène...),
- un solide (bois, papier, carton, tissu, plastique...).

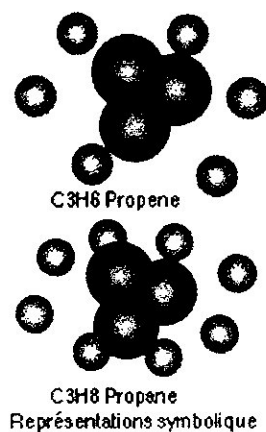


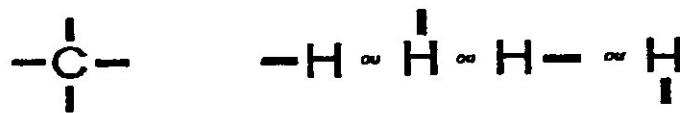
Fig 1.3 : la molécule de propène et de propane

4. La grande famille des hydrocarbures

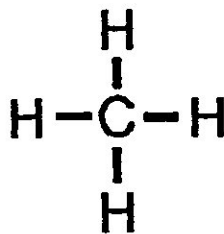
Un hydrocarbure, est une matière constituée de 2 types d'atomes : l'hydrogène (que l'on représente par le symbole H) et le carbone (symbole C), d'où le nom "hydro-carbures".

Le carbone est un corps solide plus lourd que l'air (il tombe au sol) tandis que l'hydrogène est un gaz plus léger que l'air (il monte dans les couches supérieures de l'atmosphère).

Pour illustrer les choses d'une façon simple, nous dirons que l'assemblage des atomes de carbone et des atomes d'hydrogène est rendu possible grâce à des liaisons dont sont munis les atomes.



Représentation de l'atome de carbone et de l'atome d'hydrogène



Le méthane est le plus simple des hydrocarbures. Sa formule s'écrit : C_1H_4 . Il est plus léger que l'air car la proportion d'hydrogène y est très importante.[w3]

En parlant de la combustion et des combustibles, on doit définir quelques notions de la thermodynamique.

5. Définitions de la thermodynamique :

On peut définir la thermodynamique de deux façons simples : la science de la chaleur et des machines thermiques ou la science des grands systèmes en équilibre. La première définition est aussi la première dans l'histoire. La seconde est venue ensuite, grâce aux travaux pionniers de Ludwig Boltzmann.

Avec la physique statistique dont elle est désormais une partie, la thermodynamique est l'une des grandes théories sur lesquelles se fonde la compréhension actuelle de la matière

5.1. Science de la chaleur et des machines thermiques

Les notions de chaleur et de température sont les plus fondamentales de la thermodynamique. On peut définir la thermodynamique comme la science de tous les phénomènes qui dépendent de la température et de ses changements.

5.2. Science des grands systèmes en équilibre

Définir la thermodynamique comme la science de l'équilibre des grands systèmes est une approche à la fois très rigoureuse et très générale.

6. Notion de gaz parfait :

Le gaz parfait est un modèle thermodynamique décrivant le comportement de tous les gaz réels à basse pression p .

Ce modèle a été développé au XIX^e siècle en constatant que tous les gaz tendent vers ce même comportement à pression suffisamment basse, quelle que soit la nature chimique du gaz ce qu'exprime la loi d'Avogadro, découverte en 1811 : la relation entre la pression, le volume et la température est, dans ces conditions, indépendante de la nature du gaz. Ceci paraissait tellement extraordinaire qu'il fallut du temps pour y croire.

Cette propriété s'explique par le fait que lorsque la pression est faible, les particules de gaz sont suffisamment éloignées les unes des autres pour pouvoir négliger les interactions d'ordre électrostatique qui dépendent, elles, de la nature physico-chimique du gaz (molécules plus ou moins polaires). De nombreux gaz réels vérifient avec une excellente approximation le modèle du gaz parfait, dans les conditions normales. C'est le cas des gaz principaux de l'air, le diazote et le dioxygène.

6.1. Description d'un gaz parfait

Sur les plans macroscopiques, on appelle gaz parfait tout gaz vérifiant simultanément les lois de Boyle-Mariotte et d'Avogadro :

Chapitre I

Loi de Boyle-Mariotte

À température constante, le produit de la pression p par le volume V : pV est considéré comme constant lorsque la pression est faible.

Loi d'Avogadro

tous les gaz ont le même volume molaire dans les mêmes conditions de pression et de température.

Sur le plan microscopique, la théorie cinétique des gaz permet de retrouver ce comportement de gaz parfait : un gaz parfait est un gaz dont les molécules n'interagissent pas entre elles en dehors des chocs et dont la taille est négligeable par rapport à la distance intermoléculaire moyenne. L'énergie du gaz parfait est donc la somme de l'énergie cinétique du centre de masse des molécules et de l'énergie interne de chaque molécule (rotation, oscillation). Lorsque ces deux énergies sont proportionnelles, on a le Gaz Parfait de Laplace.

6.2. Limites du modèle et gaz réel

À basse pression, tous les gaz peuvent être modélisés par un gaz parfait. Lorsque la pression augmente, on ne peut plus négliger les interactions à courte distance, notamment l'effet de taille des molécules et les interactions de type van der Waals.

Pour caricaturer, si l'on augmente encore la pression, le gaz se liquéfie et, évidemment, un liquide ne peut être considéré comme un gaz parfait...

Un gaz réel a un comportement voisin d'un gaz parfait dans le cas où les distances intermoléculaires sont grandes par rapport à la taille des molécules et à la portée des forces d'interaction. On appelle gaz parfait « associé au gaz réel » le gaz parfait dont la capacité calorifique à pression constante est celle du gaz réel à pression nulle $C_p(p=0, T)$. On dresse les tables thermodynamiques d'un gaz réel à partir des corrections apportées à ce gaz parfait associé.

7. Lois de la thermodynamique

Les deux principes les plus importants sont le premier et le second. On leur en rajoute parfois deux autres (n°0 et n°3).

7.1. Principe zéro de la thermodynamique

Le principe zéro de la thermodynamique énonce que :

Si deux systèmes A et B sont en équilibre thermodynamique et si B et C le sont aussi, alors A et C sont en équilibre thermodynamique; cette propriété est appelée, propriété de transitivité

Un système en équilibre thermodynamique est un système dont les propriétés de pression, température, volume, etc. ne varient pas avec le temps. Une tasse de café chaud dans la cuisine n'est pas en équilibre avec son environnement : parce qu'elle refroidit, sa température diminue. Lorsque sa température atteint la température de la pièce, la tasse de café devient en équilibre avec son environnement.

7.2. Premier principe de la thermodynamique

Le premier principe de la thermodynamique stipule que lors de toute transformation il y a conservation de l'énergie.

Dans le cas des systèmes thermodynamiques fermés, il s'énonce de la manière suivante:

Au cours d'une transformation quelconque d'un système fermé, la variation de son énergie interne est égale à la quantité d'énergie échangée avec le milieu extérieur, sous forme de chaleur et sous forme de travail .

Expression

Ce principe est donc résumé par la formule :

$$\Delta U = W + Q \quad (I.1)$$

- ΔU est la variation de l'énergie interne du système thermodynamique.
- W est la partie de l'énergie qui correspond au travail échangé avec le milieu extérieur. Le travail n'est pas une fonction d'état mais un mode de transfert ordonné d'énergie entre le milieu extérieur et le système.
- Q est la quantité d'énergie mise en jeu sous forme de chaleur. Elle est transmise essentiellement par trois processus d'échange thermique : conduction thermique, convection,

rayonnement. La chaleur n'est pas non plus une fonction d'état mais un mode de transfert d'énergie microscopique désordonné. C'est en quelque sorte un transfert

- d'agitation thermique entre le système et le milieu extérieur, qui est par nature désordonné.

Il existe plusieurs sortes de transfert ordonné d'énergie: travail des forces de pression, travail électrique fourni lors d'une réaction électrochimique de pile, travail dû à des interactions électromagnétiques...

Dans le cas du travail induit par les forces de pression qui correspond à la forme de travail la plus courante, rencontrée en thermodynamique classique, il s'exprime ainsi :

$$\delta W = -p_{ext} dV \quad (I.2)$$

Le signe - tient compte du fait que lors d'une détente il y a augmentation de volume ($dV > 0$) et le système fournit dans ce cas, du travail au milieu extérieur; travail compté négativement d'après la règle des signes.

p_{ext} étant la pression du milieu extérieur,

dV étant une variation infinitésimale de volume qui correspond sur un plan mathématique à la différentielle du volume.

7.3. Deuxième principe de la thermodynamique et l'entropie :

7.3.1. Énoncé de la loi :

Toute transformation d'un système thermodynamique s'effectue avec augmentation du désordre global incluant le désordre du système et le désordre du milieu extérieur. On dit encore qu'il y a création d'entropie car la fonction d'état entropie : S , est une mesure du désordre.

$$\Delta S_{globale} = \Delta S_{création} = \Delta S_{syst} + \Delta S_{ext} > 0 \quad (I.3)$$

Dans le cas d'une transformation réversible, la création d'entropie est nulle.

Remarques

L'entropie d'un système isolé ne peut qu'augmenter ou rester constante puisqu'il n'y a pas d'échange de chaleur avec le milieu extérieur.

L'entropie d'un système peut diminuer mais cela signifie que l'entropie du milieu extérieur augmente de façon plus importante ; le bilan entropique étant positif ou nul si la transformation est réversible.

Le second principe est un principe d'évolution qui stipule que toute transformation réelle s'effectue avec création d'entropie.

7.3.2. Notion de réversibilité

Une transformation réversible est une transformation quasistatique susceptible d'être inversée à la suite d'une modification progressive des contraintes extérieures, en permettant au système de retrouver les états antérieurs successifs. En fait cela revient à passer le film de la transformation à l'envers ! Si ce film paraît ridicule c'est que la transformation n'est pas réversible. En réalité, toutes les transformations réelles sont irréversibles. Une transformation réversible représente en effet, le cas limite d'une transformation réelle, conduite d'une manière infiniment lente, constituée d'une suite d'états d'équilibre infiniment voisins et caractérisée par des phénomènes dissipatifs nuls. C'est donc un modèle idéal de transformation.

On peut recenser plusieurs causes d'irréversibilité (liste non exhaustive) :

Inhomogénéité (source de diffusion) : densité moléculaire, température, pression,...

Phénomène dissipatif : frottements fluides et solides

Réorganisation spontanée de la matière : réaction chimique.

7.3.3. Formulations du second principe

Le second principe introduit la fonction d'état extensive S , appelée **entropie**. La variation d'entropie d'un système, lors d'une transformation quelconque, peut être décrite comme la somme d'un terme d'échange et d'un terme de création :

$$\Delta S_{\text{sys}} = \Delta S_{\text{création}} + \Delta S_{\text{échange}} \quad (1.4)$$

Le terme de création, toujours positif ou nul, impose le sens de l'évolution de la transformation

$\Delta S_{\text{création}} \geq 0$; l'égalité n'a lieu que pour une transformation réversible.

Le terme d'échange dans le cas d'un système fermé échangeant la quantité de chaleur Q avec le

milieu extérieur à la température T est égal à $\Delta S_{\text{échange}} = \frac{Q}{T}$ (1.5)

Une autre formulation est possible, en considérant l'entropie du système et l'entropie du milieu extérieur. Cette formulation est totalement compatible avec la précédente.

$$\Delta S_{\text{globale}} = \Delta S_{\text{création}} = \Delta S_{\text{syst}} + \Delta S_{\text{ext}} \quad (\text{I.6})$$

En effet

$\Delta S_{\text{échange}}$ correspond à l'entropie échangée par le système avec le milieu extérieur. Si l'on se place du côté du milieu extérieur le signe s'inverse et donc:

$$\Delta S_{\text{ext}} = -\Delta S_{\text{échange}} \quad (\text{I.7})$$

Il s'ensuit

$$\Delta S_{\text{syst}} = -\Delta S_{\text{ext}} + \Delta S_{\text{création}} \quad (\text{I.8})$$

D'où

$$\Delta S_{\text{création}} = \Delta S_{\text{syst}} + \Delta S_{\text{ext}} \quad (\text{I.9})$$

La variation d'entropie globale correspond à l'entropie créée et est égale à la somme des variations d'entropie du système et du milieu extérieur. Elle est toujours positive dans le cas des transformations réelles irréversibles. En revanche dans le cas idéal des transformations réversibles elle est nulle.

Considérons une transformation effectuée soit de façon réversible soit de façon irréversible, à la température T . L'entropie étant une fonction d'état sa variation sera la même pour les deux chemins envisagés. En revanche la chaleur dépendra du chemin suivi car elle n'est pas une fonction d'état.

Transformation réversible:

$$\Delta S_{\text{syst}} = \Delta S_{\text{échange}} = \frac{Q(\text{rev})}{T}$$

puisque l'entropie créée est nulle.

Transformation irréversible:

$$\Delta S_{\text{syst}} = \Delta S_{\text{échange}} + \Delta S_{\text{création}} \quad (\text{I.10})$$

$$\Delta S_{\text{syst}} = \frac{Q(\text{irrev})}{T} + \Delta S_{\text{création}} \quad (\text{I.11})$$

$$\text{Il s'ensuit que } \Delta S_{\text{sys}} > \frac{Q(\text{irrev})}{T} \quad (\text{I.12})$$

puisque l'entropie créée est positive.

L'expression ainsi obtenue a été formulée par Clausius. On l'appelle encore inégalité de Clausius. C'est une autre façon d'exprimer le second principe.

7.4. Troisième principe de la thermodynamique

Le troisième principe de la thermodynamique, appelé aussi principe de Nernst (1904) énonce que :
À la limite du zéro absolu, température qui ne saurait être atteinte, l'entropie d'équilibre d'un système tend vers une constante indépendante des autres paramètres intensifs, constante qui est prise nulle, *si possible*.

Cela donne un sens à une valeur déterminée de l'entropie (et non pas « à une constante additive près »).

Ce principe est irréductiblement lié à l'indiscernabilité quantique des particules identiques.

8. Équation d'état et lois de Joule

Comme pour tout gaz, l'état d'équilibre thermodynamique d'un gaz parfait est fixé pour n moles de molécules, par deux paramètres macroscopiques, au choix. Les autres paramètres peuvent se calculer à partir des deux paramètres choisis par une formule appelée « équation d'état ».

L'équation la plus couramment utilisée est l'équation des gaz parfaits, qui est une équation thermoélastique. Celle-ci peut s'écrire sous deux formes, une dont la vision est macroscopique (faisant intervenir le volume V du gaz), l'autre ayant une approche plus microscopique où l'on considère le nombre de molécules contenu dans une unité de volume.

$$pV = nRT \quad \text{ou} \quad pV = NK_B T \quad (\text{I.13})$$

où

- p est la pression (en pascal) ;
- V est le volume occupé par le gaz (en mètre cube) ;
- n est la quantité de matière, en mole

- N est le nombre de particules
- R est la constante des gaz parfaits
 $R = 8,314\,472 \text{ J}\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{mol}^{-1}$
 on a en fait $R = N_A \cdot k_B$ où N_A est le nombre d'Avogadro ($6,022 \times 10^{23}$) et k_B est la constante de Boltzmann ($1,38 \times 10^{-23}$);
- T est la température absolue (en kelvin).

Cette équation dérive en fait d'autres lois trouvées auparavant : la loi de Charles, la loi de Boyle-Mariotte et la loi de Gay-Lussac.

Application numérique :

- pour une pression d'une atmosphère ($p = p_0 = 1,013\,25 \times 10^5 \text{ Pa}$)
- et une température de 0°C ($T = T_0 = 273,15 \text{ K}$, température de la glace fondante sous p_0),

le volume molaire est donc

$$V_0 = 22,413\,996(39) \text{ L/mol}$$

on retient en général la valeur approchée $22,4 \text{ L/mol}$.

9. Enthalpie

Considérons une transformation monobare au cours de laquelle le système passe d'un état A à un état B d'équilibres en échangeant de la chaleur Q_p et du travail uniquement par l'intermédiaire des forces de pression W .

Le premier principe permet d'écrire :

$$\Delta U = U_B - U_A = Q_P + W \quad (\text{I.14})$$

U étant la fonction d'état énergie interne

À pression constante le travail des forces de pression est égal à :

$$W = -P\Delta V = -P(V_B - V_A) \quad (\text{I.15})$$

$$U_B - U_A = Q_P = P(V_B - V_A) \quad (I.16)$$

D'où :

$$Q_P = (U_B + PV_B) - (U_A + PV_A) \quad (I.17)$$

On définit ainsi une nouvelle fonction d'état, la fonction **enthalpie** $H(U,P,V)$

$$H = U + PV \quad (I.18)$$

Il s'ensuit que :

$$Q_P = H_B - H_A = \Delta H \quad (I.19)$$

Par conséquent, à pression constante, la chaleur mise en jeu, qui n'est pas une fonction d'état, devient égale à la variation de la fonction d'état enthalpie H . La variation de cette fonction ne dépend que de l'état final et de l'état initial du système et est indépendante du chemin suivi par la transformation.

C'est l'intérêt de l'application de la fonction enthalpie dans les cas très courants de transformations effectuées à l'air libre, à pression atmosphérique constante.

Cette propriété est à la base de la calorimétrie à pression constante. Par abus de langage on confond souvent les termes chaleur et enthalpie.

9.1. Propriétés

L'enthalpie a la dimension d'une énergie, et s'exprime en joules.

La propriété mathématique induite pour toute fonction d'état implique que sa différentielle est totale exacte c'est-à-dire qu'elle est égale à la somme des différentielles partielles par rapport à chaque variable.

La capacité calorifique à volume constant d'un gaz parfait vaut

$$C_V \equiv N \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V \quad (I.20)$$

et est donc indépendante du volume.

De même la capacité calorifique à pression constante d'un gaz parfait vaut :

$$C_P = N \left(\frac{\partial H}{\partial T} \right)_P \quad (I.21)$$

et est donc indépendante de la pression.

D'après la relation (17) $H=U+PV$, on obtient la relation de Mayer :

$$C_P - C_V = R \quad (I.22)$$

pour une mole.

Il y a une quantité qui reviendra et qui nous sera utile. C'est le rapport C_P/C_V . On lui donne un nom et un symbole assez standard

$$\gamma = \frac{C_P}{C_V} \xrightarrow{\text{gaz parfait}} 1 + \frac{R}{C_V} \quad (I.23)$$

10. Enthalpie libre

10.1. Définition

La fonction enthalpie libre G a été introduite par Willard Gibbs. Elle est associée au second principe de la thermodynamique, principe d'évolution des systèmes physico-chimique.

Le second principe stipule que toute transformation réelle s'effectue avec création d'entropie, c'est-à-dire que le bilan entropique $\Delta S(\text{système}) + \Delta S(\text{extérieur}) > 0$.

La fonction entropie peut être utilisée pour l'étude de l'évolution d'un système thermodynamique. En effet pour un système isolé l'entropie passe par un maximum à l'équilibre donc toute évolution doit aller dans ce sens.

En général, intuitivement on pense qu'un équilibre est atteint lorsque l'énergie est minimale. C'est le cas de l'énergie potentielle (gravitation, électromagnétisme...). De plus dans le cas de l'entropie il faut étudier en plus du système, l'évolution de l'entropie du milieu extérieur.

Gibbs a défini une nouvelle fonction qui prend en compte ces deux remarques.

L'enthalpie libre G se comporte en effet comme une fonction potentielle : elle intègre le comportement du milieu extérieur. De plus elle est la fonction d'état la plus appropriée pour étudier les équilibres chimiques réalisés à la température T et à pression constante ce qui est le cas de nombreuses réactions effectuées à l'air libre, à la pression atmosphérique.

10.2. Formule de l'enthalpie libre

Considérons une réaction chimique effectuée à la température T et à pression constante p . Le travail n'est dû qu'aux forces de pression (pas de montage électrochimique donc pas de travail électrique). Soit Q_P la chaleur mise en jeu par le système réactionnel. Comme p est constante, la chaleur mise en jeu est égale à la variation d'enthalpie du système : $\Delta H(\text{syst}) = Q_P$.

Appliquons le second principe :

$$\Delta S(\text{créée}) = \Delta S(\text{syst}) + \Delta S(\text{ext}) > 0$$

Or la chaleur fournie par le système est reçue par le milieu extérieur, donc son signe change

$$\text{(règle des signes)} : - Q_P = - \Delta H(\text{syst}). \quad (\text{I.24})$$

La variation d'entropie du milieu extérieur devient : $\Delta S(\text{ext}) = - Q_P / T = - \Delta H(\text{syst}) / T$.

$$\text{Le bilan entropique s'écrit : } \Delta S(\text{syst}) - \Delta H(\text{syst}) / T > 0 \quad (\text{I.25})$$

Multiplions les deux membres de cette inégalité par $(-T)$, on obtient :

$$\bullet \quad \Delta H(\text{syst}) - T\Delta S(\text{syst}) < 0 \quad (\text{I.26})$$

On obtient la nouvelle fonction d'état

$$G = H - TS \quad (I.27)$$

$$\text{A température et pression constante } \Delta G_{T,P}(\text{syst}) = \Delta H(\text{syst}) - T\Delta S(\text{syst}) < 0 \quad (I.28)$$

La réaction ne peut se produire que dans le sens correspondant à la diminution de la fonction $G_{T,P}(\text{syst})$; l'équilibre étant atteint pour le minimum de $G_{T,P}(\text{syst})$.

11. Equilibre thermodynamique

11.1. Définition

En thermodynamique, un système thermodynamique est en équilibre thermodynamique quand il est à la fois en équilibre thermique, mécanique et chimique. L'état local d'un système en équilibre thermodynamique est déterminé par les valeurs de ses paramètres intensifs, comme la pression ou la température.

11.2. Constante d'équilibre

En considérant l'équation chimique suivante :

$$0 = \sum_{i=1}^n \nu_i A_i ; \text{ où} \quad (I.29)$$

- A_i est une espèce chimique
- ν_i est le coefficient stoechiométrique de l'espèce A_i (ν est positif pour les produits de la réaction et négatif pour les réactifs)

la constante d'équilibre est définie par la relation :

$$K = \prod_{i=1}^n \alpha_{ieq}^{\nu_i} ; \text{ où} \quad (I.30)$$

- $\alpha_{i,eq}$ est l'activité chimique de l'espèce i à l'équilibre
- \prod est l'opérateur produit.

La constante d'équilibre K est une grandeur sans unité.

11.3. Notion d'activité

L'activité chimique d'une espèce est l'influence de la quantité d'une espèce sur l'énergie libre du système. De manière simplifiée, l'activité d'une espèce est :

- égale à 1 si l'espèce est un solvant, ou si l'espèce est un solide ou une phase condensée,
- égale à la concentration molaire de l'espèce rapportée à concentration de référence C^0 que l'on choisie égale à 1 mol.L^{-1} si l'espèce est un soluté,
- égale au rapport de la pression partielle (en bar) de l'espèce rapportée à une pression de référence p^0 que l'on choisie égale à 1 bar si l'espèce un gaz.

Remarque : pour le cas où l'espèce est un solvant, un résultat plus précis peut être obtenu en prenant la fraction molaire x_i du solvant pour activité de celui-ci.

11.4. Lien avec l'enthalpie libre

L'enthalpie libre ΔG^0 d'une réaction (enthalpie molaire) est reliée à sa constante d'équilibre par la relation :

$$\Delta G^0 = -RT \ln(K) \quad (I.31)$$

où R est la constante des gaz parfaits et T est la température absolue (en kelvin) On a donc à l'inverse :

$$K = \exp\left(-\frac{\Delta G^0}{RT}\right) \quad (I.32)$$

C'est la loi d'action de masses.

La constante d'équilibre est donc une grandeur thermodynamique (elle caractérise l'équilibre du système), et n'est pas liée avec la cinétique (vitesse de réaction) de ce système.

[21],[24],[w2]

12. Le pouvoir calorifique

Les combustions d'hydrocarbures dégagent de l'eau sous forme de vapeur. Cette vapeur l'eau contient une grande quantité d'énergie. Ce paramètre est donc pris en compte de manière spécifique pour l'évaluation du pouvoir calorifique, et l'on définit :

- le **pouvoir calorifique supérieur (PCS)** : « Quantité d'énergie dégagée par la combustion complète d'une unité de combustible, la vapeur d'eau étant supposée condensée et la chaleur récupérée »
- le **pouvoir calorifique inférieur (PCI)** : « Quantité de chaleur dégagée par la combustion complète d'une unité de combustible, la vapeur d'eau étant supposée non condensée et la chaleur non récupérée ».

La différence entre le PCI et le PCS est la chaleur latente de vaporisation de l'eau (L_v) multipliée par la quantité de vapeur produite (m), qui vaut à peu-près $2\,250 \text{ kJ}\cdot\text{kg}^{-1}$ (cette dernière valeur dépend de la pression et de la température).

On a la relation $PCS = PCI + m \cdot L_v$. 1.33)

13. Les types de flammes

Les flammes nous fascinent par leur côté mystérieux et magique. Colorées, lumineuses et variées, elles sont à la fois puissantes et fragiles, capables de détruire des villes entières et de s'éteindre par simple manque d'oxygène. Les caractéristiques des flammes sont nombreuses et complexes, c'est pourquoi cet article traitera seulement d'une de leurs principales caractéristiques ; leur forme. Il existe plusieurs modèles de classification des flammes, qui sont étudiés dans des domaines tels que la thermodynamique et la mécanique des fluides.

Nous nous limiterons ici à une classification en fonction de la forme et du mélange réactionnel des flammes. Les flammes qui brûlent à l'air libre et dont le mélange oxydant-combustible se fait pendant la combustion sont appelées flammes de diffusion et celles dont le mélange oxydant-combustible est réalisé avant la combustion sont appelées flammes de prémélange (ou pré-mixées).

Dans ces deux types de flammes, l'écoulement peut être turbulent ou laminaire, dans un incendie, les flammes naturelles que l'on voit sont habituellement turbulentes, c'est pourquoi nous nous y attarderons davantage.[23]

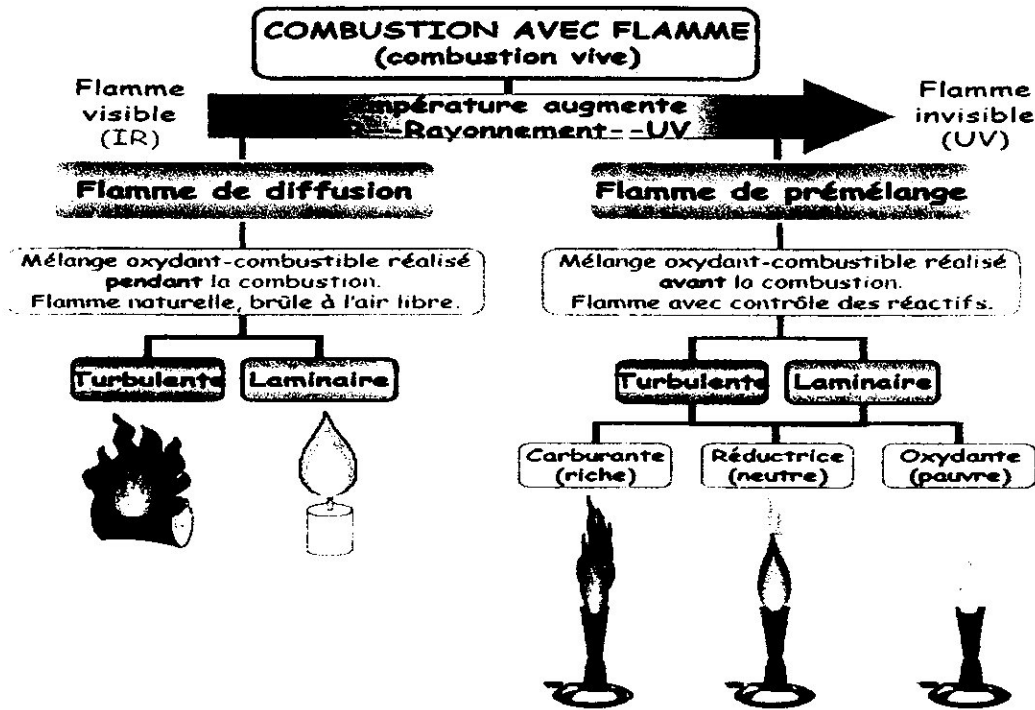


Fig I.4 : Une classification des types de flammes en fonction de leur forme et de leur mélange réactionnel.[23]

13.1. Combustion laminaire

On considère les flammes en milieu laminaire, c'est à dire en milieu où les échanges par diffusion turbulente sont pratiquement inexistantes. Si les flammes laminaires semblent n'intervenir que dans quelques applications plutôt anecdotiques (bougies et flamme de briquet) la compréhension de la structure de ces flammes est cependant fondamentale pour la description et la modélisation de nombreuses situations industrielles.[18]

13.1.1. Flamme laminaire prémélangée

Le combustible et le comburant sont mélangés à l'avance, la propagation de la flamme est le résultat d'une opération composée de deux phénomènes.

- Un préchauffage qui se fait sur une épaisseur δ_p où les réactions chimiques sont inexistantes et où les phénomènes convectifs et diffusion de masse et de chaleur sont prépondérants.

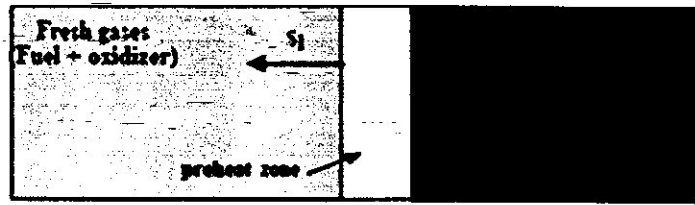


Fig I.5 : structure d'une flamme laminaire prémélangée[32]

• Arrivant à un certain niveau de température, les gaz réagissent en dégageant de la chaleur, c'est la zone de réaction qui se déroule sur une épaisseur δ_r . Cet échauffement se fait sur une épaisseur S_L qu'on appelle épaisseur de la flamme laminaire et qui peut être assimilée à la distance parcourue par la chaleur libérée par réaction pendant le temps τ_c , que dure cette réaction. Ainsi, en faisant intervenir le coefficient de diffusion thermique D_T

L'épaisseur de la flamme s'exprime sous la forme
$$\delta_L \approx (D_T \tau_c)^{0.5} \tag{.34}$$

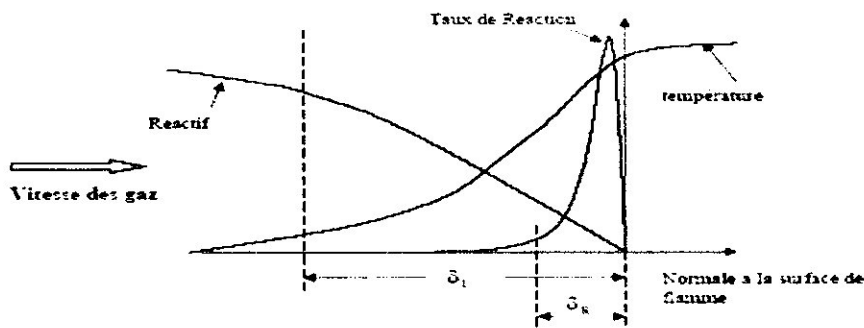


fig I.6 : profil d'une flamme laminaire prémélangée

Ces zones se déplacent dans le milieu à une vitesse de propagation perpendiculaire au front de flamme que l'on appelle vitesse de flamme laminaire et que l'on note U_L . Cette vitesse dépend de différents paramètres (nature des réactifs, richesse des mélanges et température des gaz frais) et est de l'ordre de 0.1 à 1 m/s.

Le raisonnement précédent nous montre que le front de flamme progresse de δ_L pendant le temps

τ_c , U_L peut être définie par la relation:
$$U_L \approx \frac{\delta_L}{\tau_c} \approx \left(\frac{D_{th}}{\tau_c} \right)^{0.5} \tag{I.35}$$

13.1.2. Flamme laminaire non prémélange

La caractéristique principale dite de diffusion qui consiste à présenter une zone de réaction séparant les réactifs (combustible et oxydant). Les profils des fractions massiques et de température sont présentés sur la figure 7.

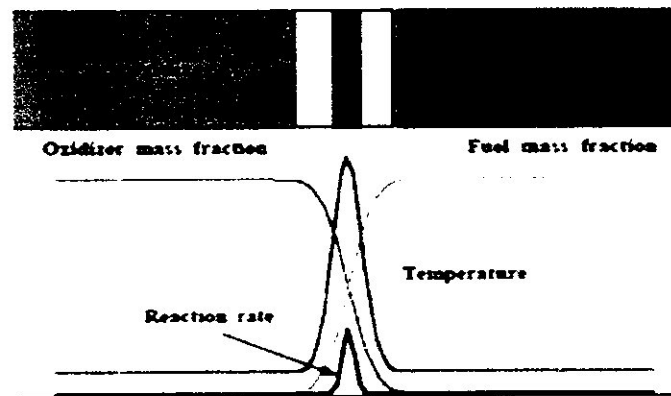


Fig I.7 : structure et profil de la flamme laminaire de diffusion

Comme les flammes de prémélange, les flammes de diffusion se développent grâce au concours des phénomènes de réaction ainsi que des phénomènes de diffusion de chaleur et de masse qui se produisent de part et d'autre de la zone réactive. Les phénomènes de convection jouent cependant un rôle plus important en amenant les réactifs et en emportant les produits de façon plus efficace que la seule diffusion. Pour que la flamme reste laminaire, il faut que les vitesses d'écoulement ne soient pas trop grandes. [18]

Ces deux genres de flammes ont fait l'objet d'un grand nombre d'études aussi bien analytiques que numériques et expérimentales.

Pour les flammes de diffusion, on se réfère aux études de Fendell (1965), Tsuji et Yamaoka (1967), Linan (1974), Tsuji (1982), Peters et al. (1987), Rohn et al (1987), Axelbaum et al (1988), Dixon-Lewis et al (1988), Rogg (1988), Seshadri et Peters (1988), Rolon et al (1989) et Darabiha (1992).

Alors que pour les flammes de prémélange on trouve Zeldovitch (1938), Fendell (1972), Mizuka et Law (1982), Bruckmaster (1982), Clavin et al (1982), Libby et Williams (1982), (1983), (1984), Clavin (1985), Giovangigli et al (1986), Thien et Matalon (1991) et Sennoun (1994). [9]

On définit la flamme triple, elle est constituée de trois parties (fig.I.8). La flamme prémélangée à deux branches, une branche riche en combustible (du côté de l'écoulement de combustible), et une branche pauvre (coté oxydant), en aval se développe la flamme de diffusion.

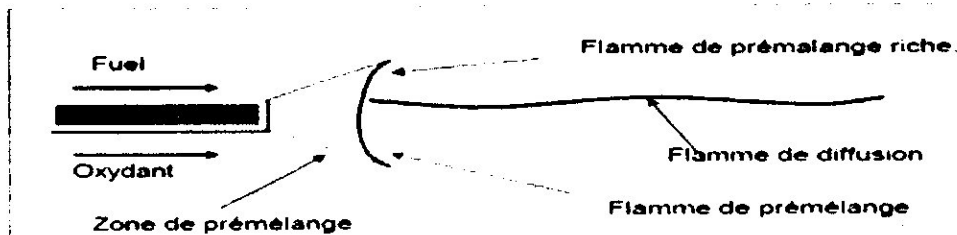


Fig I.8 : structure d'une triple flamme[7]

13.2. Combustion Turbulente. [18],[w1]

Dans un foyer, l'écoulement est turbulent, c'est-à-dire que la vitesse des gaz mesurée en un point, fluctue continuellement de façon apparemment aléatoire, même en régime parfaitement établi: cela est vrai aussi pour la température et toute autre caractéristique du milieu. Cette turbulence est due à une forte vitesse de l'écoulement entrant.

Le taux de dégagement de chaleur et la structure de la flamme, selon des temps caractéristiques, qui sont souvent le temps de la réaction chimique τ_c et le temps de fluctuation de l'écoulement τ_t

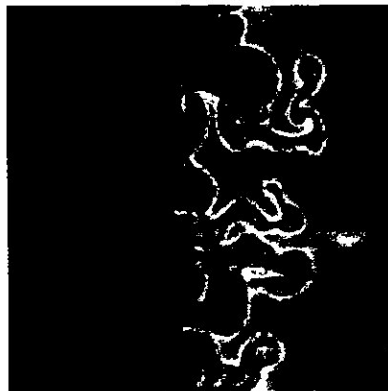


Fig I.9 : Effet de turbulences sur l'étirement du front de flamme[w1],

Ce n'est que dans les années 40 qu'on a commencé à étudier sérieusement les flammes turbulentes avec des travaux théoriques et expérimentaux. Damkôhler par exemple a montré l'influence du nombre de Reynolds sur la vitesse de la flamme en le régime turbulent et l'effet de la géométrie a été exploré.

Hoteli et Hawthorne, en 1949 ont montré que la longueur d'une flamme de diffusion turbulente ne dépend pas de la vitesse d'arrivée des gaz alors que celle d'une flamme de diffusion laminaire est proportionnelle à celle-ci.

Kuo et al. ont considéré dans leur approche que l'échelle temporelle associée à la flamme turbulente est différente de celle de la flamme laminaire. [18]

13.2.1. Combustion turbulente prémélangée

La classification des régimes de combustion turbulente des flammes de prémélange remonte à Damkohler (1947) qui adopta l'idée qu'une turbulence à grande échelle ne fait que plisser la flamme laminaire sans modification significative de sa structure interne: alors qu'une turbulence à petite échelle affecte les processus de transfert dans la structure interne de la flamme laminaire. D'après Damkohler, les frontières des régimes de combustion turbulente sont identifiables: l'aide, par exemple, de comparaisons entre les échelles spatiales de la turbulence et l'épaisseur de la flamme laminaire.

Pour bien définir la structure des flammes turbulentes de prémélange, nous commencerons par définir les différents paramètres utilisés à cet effet. L'énergie cinétique de la turbulence k , et l'échelle intégrale spatiale de la turbulence l_t , qui caractérisent toutes les deux l'état de la turbulence dans les gaz frais et qui donnent un nombre de Reynolds turbulent $Re_R = k l_t / \nu$.

$$Re_R = \left(K^2 \cdot \frac{l_t}{\nu} \right) \quad (I.36)$$

où ν est la viscosité cinématique.

L'échelle intégrale temporelle τ_t , correspond au temps caractéristique des gros tourbillons est

$$\text{estimé par } \tau_t = \frac{l_t}{K} \quad (I.37)$$

L'échelle spatiale de Kolmogorov, représentative de la dimension caractéristique des plus petites

$$\text{structures turbulentes est estimée par } \eta_k = \left(\frac{\nu^3}{\varepsilon} \right)^{\frac{1}{4}} \quad (I.38)$$

et l'échelle temporelle correspondante par $\tau_k = \left(\frac{\nu}{\varepsilon} \right)^{1/2}$ (I.39)

où $\varepsilon = \left(\frac{k^{3/2}}{l_t} \right)$ (I.40)

représente le taux de dissipation de la turbulence (Tennkes et Lumley, 1983).

Plusieurs types de classifications des régimes de combustion turbulente des flammes de prémélange peuvent être envisagés. La classification la plus générale est celle de Barré (197) reprise et développée par Borghi (1984) et Peters (1988) et qui fait apparaître les différents régimes dans le

plan défini par $\frac{k^{1/2}}{u_L}$ et $\frac{l_t}{\delta_L}$ voir figure (10). Elle permet de distinguer les régimes suivants:

Régime I : Dans ce régime, on a $Re_{ft} < 1$ et l'on se situe dans le cas où les fluctuations turbulentes sont très petites devant la vitesse de propagation laminaire de la flamme ($u_L \gg k^{1/2}$). Par conséquent la turbulence ne produit aucun effet sur la flamme qui reste laminaire.

Régime II: Ce régime est limité par $Re_{ft} = 1$ et par $\tau_c = \tau_k$.

A l'intérieur de ces limites on peut distinguer deux sous-régimes. Le premier est limité par $k^{1/2} < u_L$, le front de flamme laminaire y subit les contraintes de la turbulence dont l'échelle spatiale de Kolmogorov η_k est très grande devant δ_L . Pour un rapport $\frac{K^{1/2}}{u_L} < 1$, le front de flamme est seulement déformé sans être déchiré: c'est le régime des flammes laminaires plissées. Par contre,

lorsque $k^{1/2}$ augmente, le rapport $k^{1/2}/u_L$ devient supérieur à l'unité et les plissements ont tendance à se déformer de plus en plus. Dans ce régime, appelé régime des fronts de flamme corrugués, la condition $Re_{ft} > Da \gg 1$ est vérifiée.

L'ensemble de ces deux régimes est aujourd'hui communément appelé: Régime des flammelettes

Régime III: Ce régime est limité par $\tau_c = \tau_k$, et par la droite $Da = 1$. L'échelle de Kolmogorov η_k est donc petite devant l'épaisseur de la flamme laminaire δ_L .

Dans ce cas les contraintes dues aux petites structures de la turbulence peuvent influencer la structure interne du front de flamme instantané et donner lieu à son étirement qui peut modifier son épaisseur et sa vitesse de propagation laminaire. Ce régime est appelé : le régime des **flammes plissées-épaissies**.

Régime IV: Ce régime est l'extension du régime précédent dans le sens où la réaction est encore plus distribuée dans l'espace. Il se caractérise par un nombre de Damköhler inférieur à 1. Dans ce régime, aucune ondulation ou plissement de la flamme ne peut exister, et il est préférable de parler de "zone de réaction" que de flamme avec une épaisseur définie. Ce régime est appelé : le régime des **flammes épaissies**.

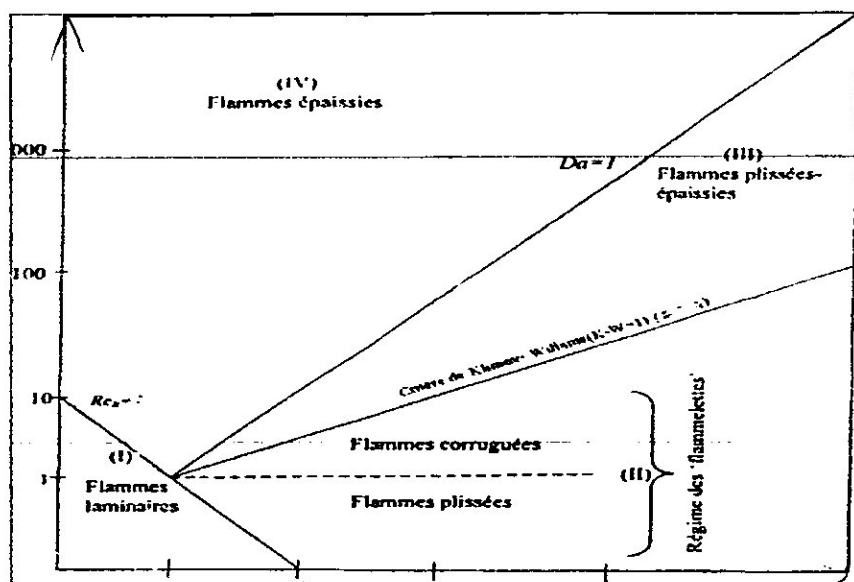


Fig 1.10 : diagramme des régimes de la combustion turbulente prémélangée

13.2.2. Combustion turbulente non- prémélangée

Nous avons vu dans le paragraphe précédent que deux nombres sans dimensions (un rapport de vitesse et un rapport de longueur) sont suffisants pour caractériser un régime de combustion turbulente pour les flammes prémélangées. Le problème est plus délicat pour les flammes non-prémélangées essentiellement parce qu'il est difficile de définir une échelle de longueur pour ces flammes.

On peut résumer les classifications pour la combustion turbulente non-prémélangée disponibles dans la littérature en deux groupes : celles qui utilisent les paramètres (Reynolds, Damköhler).

(Libby et Williams 1994) et celles travaillant avec le couple (Fluctuations, fraction de mélange, Damkôhler). (Bray et Peters, 1994). Nous proposons ici une classification (Reynolds, Damkôhler).

• Lorsque la turbulence n'est pas trop forte, la structure de la flamme de diffusion est celle d'une flamme plissée, elle est alors constituée d'une longue flammelette continuellement plissée, étirée et comprimée alternativement par les mouvements turbulents figure (11)

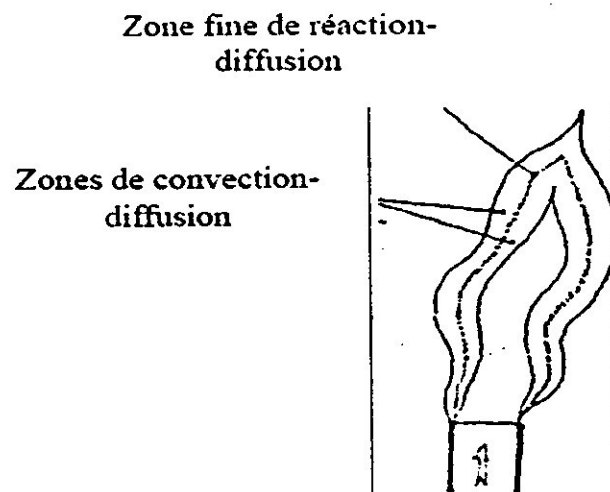


Fig I.11 : flamme de diffusion faiblement turbulente

• lorsque la turbulence devient assez forte, d'autres phénomènes peuvent se produire

*D'une part la turbulence peut étirer la flammelette de telle façon que celle-ci s'éteigne à l'endroit où elle est suffisamment étirée d'où on rencontre plusieurs flammelette séparées par la zone de d'extinction et celle-ci apparaît lorsque :

$$\frac{\tau_c}{\tau_k} > 1 \text{ figure (11).}$$

*D'autre part, une turbulence trop forte va provoquer aussi des interactions entre deux portions de flammelette. Les grandes échelles feront interagir deux portions assez éloignées et cela formera des boucles de flammelette figure (12).

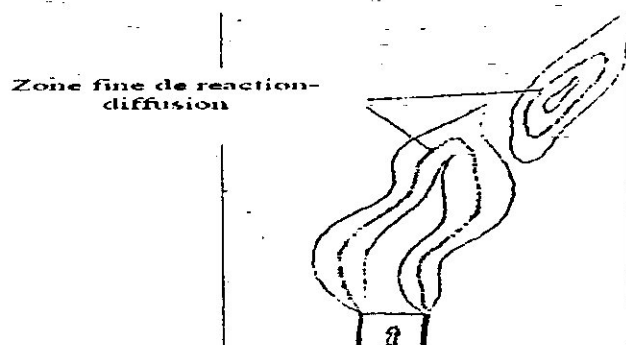


Fig I.12: Interaction à grande échelle de flammelettes

*Les petites échelles spatiales proches de l'épaisseur de la flammelette entraîneront un épaissement local de celle-ci. La zone de réaction referme sur elle-même figure (13) les petites échelles de taille η sont semblables à l'épaisseur de la flammelette de diffusion.

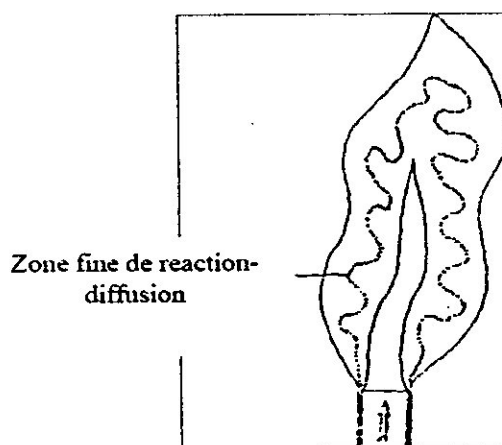


Fig I.13 : Interaction à petite échelle de flammelettes

*Lorsque ces interactions deviennent trop nombreuses, on ne peut plus considérer la flamme comme composée d'une ou de plusieurs flammelette plissées ; ces dernières sont modifiées par la turbulence et l'estimation proposée est telle que l'épaisseur de la zone de réaction est inférieure à l'échelle de kolmogorove.

14. Codes de calculs utilisés pour l'étude de la combustion et les flammes :

Actuellement les études et les traitements concernant la combustion et les flammes se font par modélisation numérique en utilisant différents codes de calcul, on cite parmi ces codes :

FEMLAB - qui signifie Finite Elements Modeling Laboratory-, est un logiciel avancé pour la modélisation et la simulation de tout processus physique décrit par des équations aux dérivées partielles. La dernière version, FEMLAB 3.1, offre des solveurs d'un très haut niveau de performance capables de traiter des problèmes de taille très importante avec des temps de résolution optimaux. Travaillant à partir de l'interface graphique conviviale ou à partir d'une fenêtre de ligne de commandes, l'utilisateur choisit de décrire de plusieurs façons ses problèmes en 1D, 2D ou 3D. Un des principaux avantages du logiciel est sa capacité de coupler et de résoudre arbitrairement des équations dans des domaines aussi variés que la mécanique des structures, l'électromagnétisme, la dynamique des fluides et la chimie, tout ceci dans le même modèle et simultanément. Ceci et d'autres caractéristiques font de FEMLAB 3 un environnement inégalé de modélisation pour la recherche, la conception et l'éducation.[27].

SIMTHERM2D permet de calculer l'évolution au cours du temps d'un champ de température en 2D, en coordonnées cartésiennes ou cylindriques, par une méthode d'éléments finis. Les problèmes traités peuvent être non linéaires. [W4]

PLATEK permet de calculer les facteurs de forme et de transfert dans une enceinte 3D composée de facettes planes. Les compétences acquises par le Centre dans ce domaine ont permis de mettre en oeuvre des techniques de résolution spécifiques optimisant la fiabilité, la précision et le temps d'exécution des calculs. [W4]

Fluent est un logiciel de modélisation en mécanique des fluides.[w4]

Ce logiciel est juste le solveur, il ne maille pas le système. Le maillage doit être réalisé avec un mailleur, (Gambit) par exemple qui est réalisé par le même éditeur. Le paramétrage se fait par une interface graphique. Ce logiciel permet la mise en place de script pour automatiser les processus de calcul.

Fluent est sans doute le logiciel de simulation numérique de mécanique des fluides le plus abouti du marché. Il est même depuis peu intégré dans la fameuse suite de logiciel de simulation ANSYS.

Sa force vient du très grand nombre de modèles disponibles, pouvant faire face à de très nombreux aspects de la mécanique des fluides : Ecoulement diphasique (miscible, non miscible), cavitation, solidification), turbulence (LES, KE, Kw, SA, Reynolds stress ...), combustion (pré mélangé et non pré mélangé), transport de particules, écoulement en milieux poreux, maillage mobiles et dynamiques avec reconstruction du maillage... Les schémas temporels et spatiaux peuvent de plus être modifiés pour améliorer la convergence.

Il est de plus parallélisé et permet donc de tirer parti de systèmes multiprocesseurs aussi bien au sein d'une seule machine qu'en réseau (cluster, dualcore, plateforme multi CPU).

THERMETTE est un logiciel développé au Centre d'Energétique de l'Ecole des Mines de Paris par Khalil El Khoury et qui résulte du savoir-faire acquis pour la résolution d'une grande variété de problèmes de Thermique industrielle.

THERMETTE permet notamment : [w4]

- d'accéder aux principales propriétés thermophysiques (k , C_p , ρ ...) de fluides et de solides (bibliothèque de données) et de les réutiliser par la suite lors d'un calcul ;
- de déterminer les ordres de grandeur des flux thermiques d'un système en menant des calculs préliminaires simplifiés, en utilisant des relations analytiques pour les transferts conductif et radiatif, en permettant le choix des corrélations pour les transferts convectifs ;
- de construire et de prévoir l'évolution spatio-temporelle d'un système thermique modélisé sous forme de réseau, composé de volumes (corps isothermes) et de branches (variation de la température dans une dimension de l'espace). Cette modélisation permet d'obtenir le champ de température spatial en régime dynamique en fonction des propriétés thermophysiques et des sollicitations. Le logiciel permet par ailleurs de prendre en compte les débits massiques et enthalpiques dans les branches du réseau (advection, bilans thermiques, calcul d'échangeurs...).

De par sa conception, THERMETTE peut être utilisé dans la plupart des applications nécessitant l'analyse thermique d'un système. A titre d'exemple :

- les fours (fusion, trempe...)
- le génie des procédés (contrôle par régulation, bilan thermique d'une installation...)
- le froid (givrage, échangeur...)

- l'automobile (thermique sous capot, circuit de refroidissement moteur, habitacle,...)
- l'aérospatial (chocs thermiques, chambres de propulsion, contrôle thermique...)
- l'électronique (refroidissement de composants, dimensionnement d'ailettes...)
- le bâtiment (boucles de chauffage, déperditions...).[25]

CHEMKIN est un outil de logiciel pour résoudre des problèmes chimiques complexes de cinétique. Il est employé dans le monde entier dans la microélectronique, des véhicules moteur, la combustion, et les industries de transformation chimiques. Il a été à l'origine développé aux laboratoires nationaux de Sandia et est maintenant développé à la conception de réaction.

CHEMKIN résout des milliers de combinaisons de réaction pour développer un arrangement complet d'un processus particulier, qui pourrait impliquer des espèces chimiques multiples, des gammes de concentration, et des températures de gaz. Les possibilités informatiques de CHEMKIN tiennent compte pour qu'une réaction chimique complexe soit étudiée en détail, y compris les composés intermédiaires et les composés de trace.

Employer CHEMKIN tient compte d'une recherche temps-efficace sur un nouveau processus potentiel comparé à la recherche directe de laboratoire.

Un conducteur important pour le développement et l'usage de CHEMKIN est la réduction de polluants tels que NOx. Pendant que ces polluants deviennent plus étroitement réglés par des accords par des agences telles que l'agence de protection de l'environnement des Etats-Unis et le comité des ressources de l'air de la Californie (CARB), les chercheurs font l'utilisation croissante de la technologie de simulation telle que CHEMKIN.

Une limitation de CHEMKIN est qu'elle suppose que le navire de réaction a une géométrie relativement simple, tandis que parfois ce n'est pas le cas. Pour cette raison, un programme relatif appelé KINETICS est employé souvent en même temps que les outils liquides informatiques de dynamique. Les programmes de CFD peuvent mieux expliquer la complexité géométrique, aux dépens davantage de l' limitation dans leur traitement de la chimie fondamentale du processus réactif étant étudié.

La dernière version est : Chemkin-II

C'est une collection de bases de données et de sous-programmes écrits dans des dossiers des textes et en code de Fortran pour résoudre des problèmes impliquant les propriétés en phase gazeuse de cinétique, d'équilibre et de transport. Il y a beaucoup de différents types de problèmes qui peuvent être résolus en utilisant les sous-programmes de Chemkin. Des programmes de conducteur (programmes qui dirigent les sous-programmes et commandent les dossiers d'entrée sortie) ont été écrits pour les types suivants de problèmes :

1. Les températures adiabatiques de flamme.
2. Concentrations d'équilibre pour des mélanges d'un gaz.
3. Fractions de taupe d'espèces en fonction de temps dans l'état d'équilibre laminaire et, flammes pré-mélangées quand profil de température dans connu.
4. Vitesse de flamme, fractions de taupe d'espèces et profil de température en fonction de temps en flammes laminares, équilibrées, pré-mélangées.
5. Fractions de taupe et température de jet de produit d'un réacteur parfaitement remué.
6. Détermination des propriétés de transport des mélanges de gaz en fonction de la composition, de la température et de la pression.

C'est juste un petit prélèvement des nombreux programmes de conducteur qui ont été écrits. Le nombre et le type de programmes machine qui incorporent des sous-programmes de Chemkin increaseing constamment.

Pour employer ces programmes, l'utilisateur doit modifier plusieurs dossiers d'entrée. Comme sera expliqué en détail ci-dessous, chacun des dossiers d'entrée est dans un dossier d'Unix-coquille et l'utilisateur devra seulement modifier le dossier de coquille. Afin les sous-programmes à travailler, l'utilisateur doivent indiquer Chemkin au sujet du mélange de gaz et des réactions de phase gazeuse. Ceci est fait dans le dossier appelé *mech*. L'utilisateur doit appeler chacun des éléments et chacun des espèces qui sont dans le mélange de gaz. L'utilisateur doit également écrire les étapes élémentaires des réactions chimiques étant considérées avec leurs coefficients respectifs de taux d'Arrhenius pour l'équation :

$$K_f = AT^\beta \exp\left(\frac{E}{RT}\right) \quad (I.41)$$

L'utilisateur doit également indiquer le problème en modifiant le dossier d'INP. Ce dossier contient généralement l'information telle que la température initiale du mélange de gaz, des fractions de masse des réactifs, et de la pression initiale. Dépendre du programme et la nature du problème, l'utilisateur devront inclure d'autres mots-clés qui commandent le programme. Car ce sont spécifiques à chacun des programmes, elles seront discutées séparément ci-dessous. Une fois l'INP et les dossiers *mech* ont été correctement modifiés, le programme peuvent être couru : en exécutant le dossier de coquille.

Pour chacun des types de problèmes discutés ici, le code d'application a été déjà écrit. L'utilisateur doit seulement assurer la description de réaction et l'entrée d'application. L'entrée d'application change de l'application à l'application et chacun sera discuté individuellement ci-dessous. Les applications de Chemkin ont été installées et modifiées pour diriger les postes de travail de HP appelés les ÉTATS situés dans des CB de la pièce 308. Une introduction à ces machines sera discutée avant la discussion des applications. [10],[15], [6],[14]

AVBP Le code AVBP, développé au CERFACS, permet de résoudre les équations de Navier Stokes compressibles laminaires et turbulentes sur des maillages structurés, non structurés et hybrides. Il a été essentiellement développé dans l'optique de résoudre des champs instationnaires grâce à la méthode LES. Depuis 1996, le développement s'est orienté vers la modélisation d'écoulements turbulents réactifs. AVBP est écrit en FORTRAN 77. Il est basé sur deux bibliothèques : une chargée de la simulation numérique des équations de la mécanique des fluides (AVBPLIB) et l'autre qui gère les aspects calcul à haute performance, notamment le parallélisme (COUPL). Du point de vue numérique. AVBP possède deux principaux schémas de discrétisation:

- un schéma Lax-Wendroff, de type méthode des volumes finis avec une formulation 'cell-vertex' (les inconnues sont stockées aux noeuds),
- un schéma Taylor-Galerkin modifié, de type éléments finis. Ce dernier schéma est du troisième ordre en espace et en temps, et a été développé pour les calculs de LES qui nécessitent une très grande précision tant du point de vue dispersif que dissipatif. L'intégration temporelle de tous ces schémas est assurée par un schéma de Runge-Kutta explicite à plusieurs étapes. Finalement, les

conditions aux limites utilisées sont les conditions NSCBC connues pour leurs excellentes qualités acoustiques. [10],[15],[6],[14]

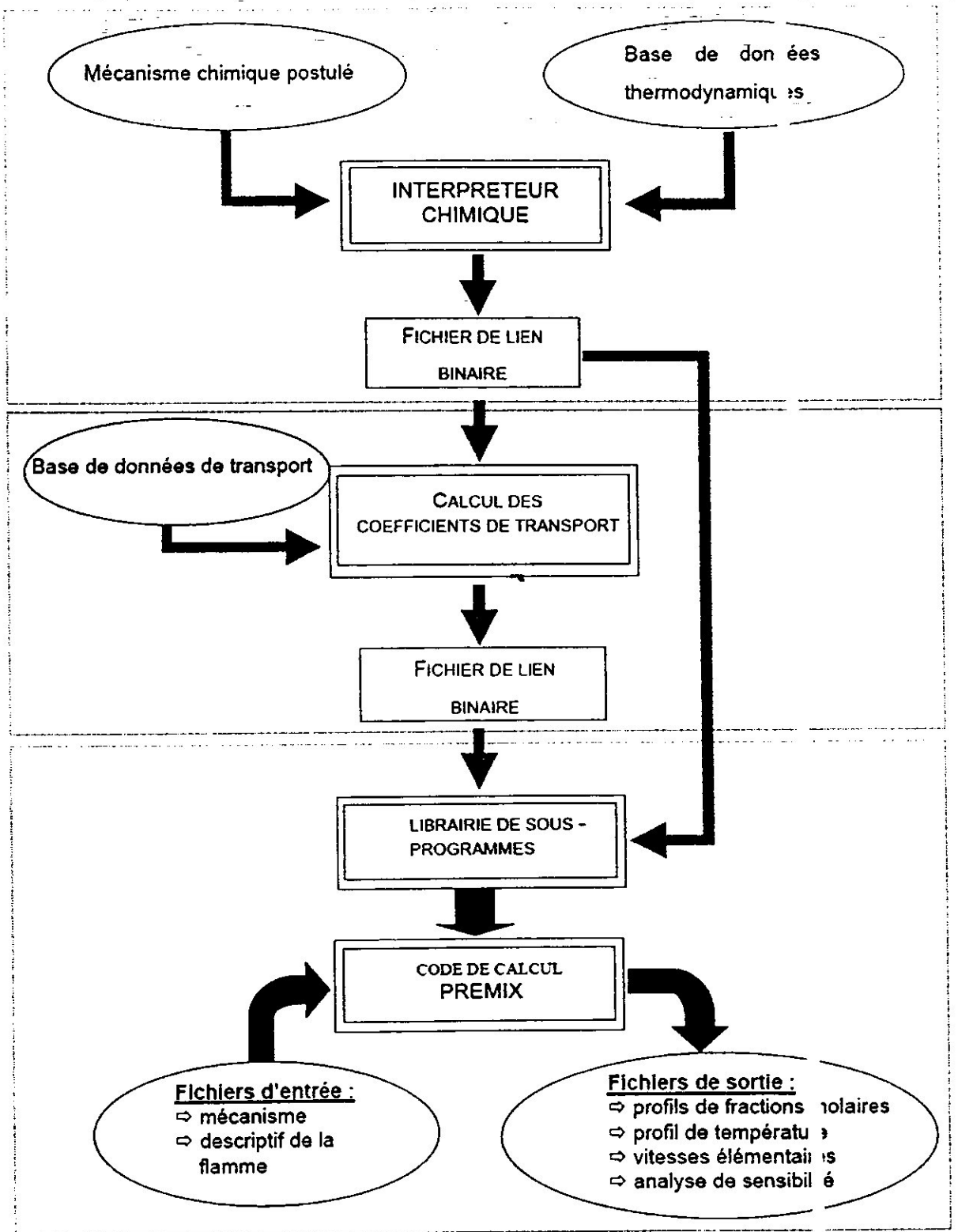


fig 1.14 :Structure de chemkin 2

CHAPITRE II

Détermination de l'état finale de la combustion

1. Définitions de base [6],[9],[13],[19],[33]

Dans un écoulement avec réactions chimiques, il est nécessaire de définir, en plus des variables d'état classiques (pression, température, vitesse) des variables caractérisant la composition du milieu.

1.1. Grandeurs élémentaires

Pour cela, chaque substance est repérée par l'indice j . On peut ainsi définir la masse de l'espèce j comme suit :

$$m_j = n_j M_j \quad (\text{II.1})$$

M_j est la masse molaire et n_j son nombre de moles.

Il en résulte que la masse totale m_t est :

$$m_t = \sum_{j=1}^N m_j \quad (\text{II.2})$$

N est le nombre d'espèces composant la masse m_t . De même, le nombre de moles total Nt est égal à :

$$Nt = \sum_{j=1}^N n_j \quad (\text{II.3})$$

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

$$M = \frac{1}{Nt} \sum_{j=1}^N n_j M_j \quad (\text{II.4})$$

La quantité relative de l'espèce j dans le mélange est donnée soit par la fraction molaire (II.5), soit par la fraction massique (II.6) :

$$X_j = \frac{n_j}{Nt} \quad (\text{II.5})$$

$$Y_j = \frac{m_j}{m_t} \quad (\text{II.6})$$

Les deux relations (II.5) et (II.6) vérifient automatiquement l'expression (II.7) :

$$\sum_{j=1}^N X_j = \sum_{j=1}^N Y_j = 1 \quad (\text{II.7})$$

Le passage d'un paramètre à l'autre se fait par l'intermédiaire de la relation suivante :

$$Y_j = \frac{M_j}{M} X_j \quad (\text{II.8})$$

Les chimistes préfèrent utiliser la concentration molaire, qui fait rapporter la composition au volume :

$$C_j = \frac{n_j}{V_t} \quad (\text{II.9})$$

Ou encore la masse volumique :

$$\rho_j = \frac{m_j}{V_t} \quad (\text{II.10})$$

V_t est le volume total du mélange. La concentration molaire globale C et la masse volumique totale ρ sont déduites des deux relations précédentes :

$$C = \sum_{j=1}^N C_j \quad (\text{II.11})$$

$$\rho = \sum_{j=1}^N \rho_j \quad (\text{II.12})$$

1.2. La richesse

Pour définir la richesse on prend un exemple : la combustion du méthane avec l'oxygène.

Le méthane est un hydrocarbure de formule brute CH_4 qui, lorsqu'il brûle complètement avec l'oxygène, fournit du dioxyde de carbone et de la vapeur d'eau comme gaz brûlés. La combustion du CH_4 se fait suivant la réaction :



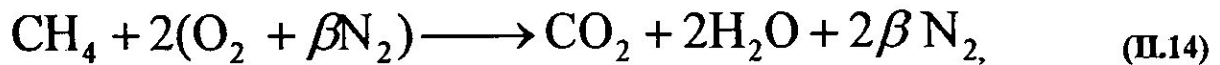
En adoptant comme masse molaire :

$M_o=16$, $M_c=12.01$, $M_H=1.008$, $M_N=14.001$,

La réaction (II.13) indique que la combustion complète d'un gramme de méthane exige une masse d'oxygène égale à 3,989 g.

Lorsque la combustion s'effectue dans de l'air, il y a lieu de considérer que ce dernier contient 21% en volume ou 23% en poids d'oxygène, le reste étant pratiquement de l'azote qui

n'intervient pas dans la combustion. Dans ce qui précède, une molécule d'air peut être représentée par le couple fictif $(O_{0,42}, N_{1,58})$, de telle sorte que la réaction chimique du méthane avec l'air s'écrit :



$$\beta = 3,76$$

La connaissance du débit massique du combustible m_f , et du comburant m_a , nous permet de définir la richesse du mélange ϕ :

$$\Phi = \frac{\alpha}{\alpha_s} = \frac{\frac{m_f}{m_a}}{\left(\frac{m_f}{m_a}\right)_s} \quad (II.15)$$

Dans cette expression, l'indice s correspond aux conditions stoechiométriques. C'est-à-dire qu'on suppose que la combustion du méthane est complète et se fait suivant la réaction (II.14).

Dans ce cas, la richesse stoechiométrique α_s , est donnée par :

$$\alpha_s = \left(\frac{m_f}{m_a}\right)_s = \frac{M_f}{2M_a(1 + \beta)} = 0,0526 \quad (II.16)$$

où M_f et M_a correspondent aux masses molaires du méthane et de l'air.

Si la richesse du mélange est égale à 1, on dit que le mélange est respectivement stoechiométrique, par contre, si la richesse est inférieure à 1, le mélange est pauvre en combustible alors que s'il est supérieur à 1, le mélange est dit riche en combustible.

Pour les combustions avec l'air, on travaille souvent avec un mélange pauvre, c'est seulement ainsi que l'on peut espérer obtenir une combustion complète puisque le mélange (combustible, comburant) ne peut jamais être parfaitement homogène.

Il est clair que l'élévation de la température de fin de combustion est très importante lorsque cette dernière est complète et que les gaz sont moins dilués, c'est à dire pour un mélange homogène dont la richesse est égale à 1.

1.3. La dissociation

À températures élevées, les produits principaux de la combustion se décomposent ou dissocient en autres espèces. Par exemple, la combustion complète des hydrocarbures avec de l'air donne le CO_2 , H_2O , N_2 (et O_2 si la combustion est pauvre) comme produits. Mais la dissociation de ces produits et des réactions entre les espèces résultantes de la dissociation peut mener à beaucoup d'autres espèces, par exemple O , H , OH , N , NO , et d'autres. Les réactions importantes de dissociation sont : (II.32), (II.33), (II.34), (II.35), (II.36), (II.37), (II.38).

La dissociation d'une molécule se produit à températures élevées parce que et seulement que les nombres significatifs des molécules ont assez d'énergie cinétique pendant une collision pour casser un ou plusieurs liens internes. Aux températures typiques de combustion, la dissociation affecte la plupart du temps le CO_2 et le H_2O , bien que les autres espèces également soient affectées à températures élevées. La présence du CO et du H_2 dans les produits signifie que l'oxydation n'est pas complète et par conséquent que la température finale est moins que la température adiabatique de flamme basée sur les produits de la combustion complète. [25]

2. hypothèses

On va décrire les procédures suivies pour la détermination de la température de fin de combustion et les fractions molaires des produits de combustion d'un hydrocarbure avec l'air, pour cela, on se base sur les hypothèses suivantes :

- Tous les éléments gazeux sont assimilés à des gaz parfaits.
- La composition de l'air est : 79% de N_2 et 21% de O_2 .
- Combustion isobare, adiabatique.
- L'équilibre thermodynamique est atteint après la combustion.
- Le nombre de Mach de l'écoulement est petit, de telle sorte que l'énergie cinétique et la dissipation visqueuse peuvent être négligées [4].
- Flammes de prémélange et non prémélangée (de diffusion), cette hypothèse dépend de la manière par laquelle on introduit les réactifs dans la zone de combustion, qui est un paramètre principal pour le contrôle du régime de combustion. Le combustible et l'oxydant peuvent être mélangés avant que la réaction prend place (flamme de pré mélange, Fig 1), ou bien ils rentrent séparément la zone de réaction (flamme non prémélangée ou de diffusion, Fig 2).

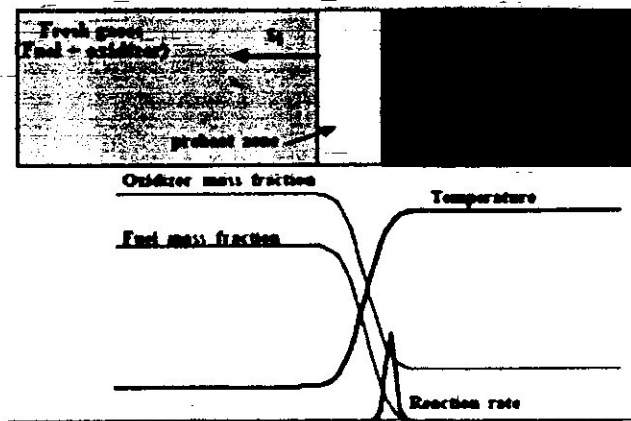


Fig II.1 : structure de la flamme de prémélange[7].

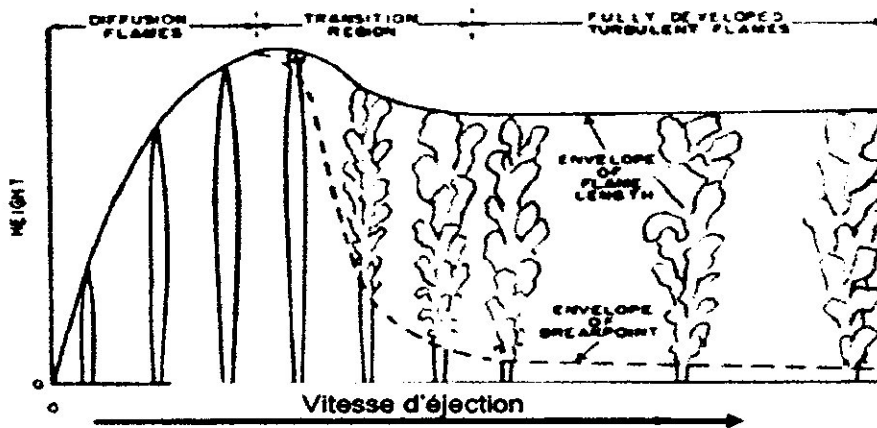
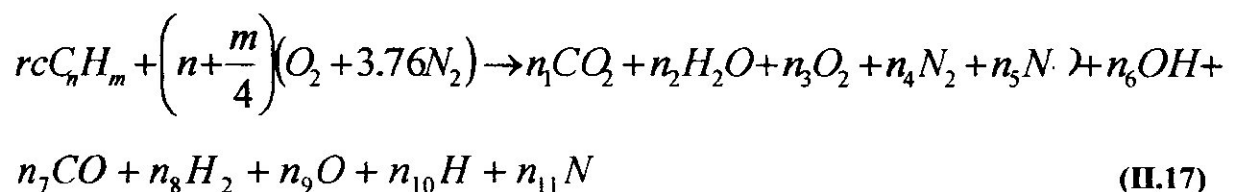


Fig.II.2 : Flamme non prémélangée. En haut: configuration de l'écoulement; En bas: longueur de la flamme en fonction de la vitesse de l'écoulement.

D'après Hottel & Hawthorne, 1949 .[7].

3. calcul de l'état final de la combustion

L'équation globale de la combustion est :



D'après le premier principe, on a :

$$\text{Pour un système ouvert : } W+Q=\Delta H \quad (\text{II.18})$$

Puisque la combustion est isobare on n'aura pas de travail : $W=0$

Et puisque on a une transformation adiabatique : donc $Q=0$

$$\text{Ce qui donne : } \Delta H=0 \quad (\text{II.19})$$

Ou bien :

$$H_r(T_e)=H_p(T_{ad}) \quad (\text{II.20})$$

$$\text{Soit } f(T)=H_p(T_{ad})-H_r(T_i)=0 \quad (\text{II.21})$$

Et c'est la relation de base, après la résolution de cette équation, on peut déterminer T_{ad} , qui est la température finale de la combustion.

3.1. Calcul de l'enthalpie des réactifs

$$H_r = r_c(H_{RC}) + \left(n + \frac{m}{4}\right)H_a \quad (\text{II.22})$$

3.1.1. L'enthalpie du carburant H_{RC}

Il existe deux méthodes :

a) en utilisant l'enthalpie de formation de l'hydrocarbure :

$$H_{RC} = \left(\Delta H_F^0\right)_C + H_C^S(T) \quad (\text{II.23})$$

Avec :

$\left(\Delta H_F^0\right)_C$ est l'enthalpie de formation de l'hydrocarbure, donnée par des tableaux.

$$H_C^S(T) = \frac{((0.403 * T) + (0.000405 * T^2))}{\sqrt{((0.9952 * d_4^{20}) + 0.00806)}} * (12n + m) [cal / mole] \quad (\text{II.24})$$

Est la variation de l'enthalpie sensible.

b) en utilisant la formule globale obtenue par intégration du C_p en fonction de T .

$$C_p(T)/R = a_1 T^{-2} + a_2 T^{-1} + a_3 + a_4 T + a_5 T^2 + a_6 T^3 + a_7 T^4 \quad (\text{II.25})$$

Ce qui donne :

$$H(T) = \left(-a_1 T^{-2} + \frac{a_2 \ln T}{T} + a_3 + \frac{a_4 T}{2} + \frac{a_5 T^2}{3} + \frac{a_6 T^3}{4} + \frac{a_7 T^4}{5} + \frac{b_1}{T}\right) \cdot R T \quad (\text{II.26})$$

Avec : les a_i, b_i sont les constantes de GORDAN_MC BRIDE

3.1.2. L'enthalpie de l'air H_a :

On a (1 mole de O_2 + 3,76 mole de N_2) ce qui correspond à 4,76 moles d'air.

Donc on utilise la formule (7) avec les coefficients de l'air.

3.2. Calcul de l'enthalpie des produits

Nous avons comme produits 11 espèces de nombres de moles inconnus

*4 produits de base : CO_2 , H_2O , O_2 , N_2 .

*7 produits de dissociation : NO , OH , CO , H_2 , O , H , N

et on a la relation de l'enthalpie :
$$H_p = \sum_{i=1}^{11} n_i H_i \quad (\text{II.27})$$

Donc calculer l'enthalpie des produits revient à calculer les nombres de moles de chaque espèce des produits.

3.2.1. Calcul des nombres de moles des produits de combustion :

Pour cela on utilise les équations suivantes :

1) la conservation des espèces :

De l'équation du bilan globale de la combustion on peut obtenir :

1-1) conservation du Carbone

$$n \times r_c = n_1 + n_7 \quad (\text{II.28})$$

1-2) conservation d'hydrogène

$$m \times r_c = 2n_2 + n_6 + 2n_8 + n_{10} \quad (\text{II.29})$$

1-3) conservation d'oxygène

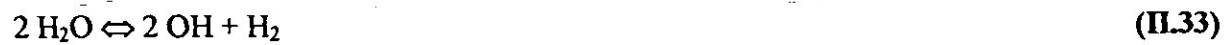
$$2 \times \left(n + \frac{m}{4} \right) = 2n_1 + n_2 + 2n_3 + n_5 + n_6 + n_7 + n_9 \quad (\text{II.30})$$

1-3) conservation de l'azote :

$$7,52 \times \left(n + \frac{m}{4} \right) = 2n_4 + n_5 + n_{11} \quad (\text{II.31})$$

2) les équations d'équilibre des réactions de dissociation :

Il y a 7 équations de bilan: [1]



Pour ces équations de bilan la constante d'équilibre sera :

$$k_p(13) = \frac{P_{\text{co}}^2 \times P_{\text{o}_2}}{P_{\text{co}_2}^2} \quad \text{et on a les pressions partielles pour chaque espèce } i$$

$$P_i = \frac{n_i}{\sum_p n_i} \times P \quad (\text{II.39})$$

ou P est la pression totale.

$$\text{Avec : } \sum n_i = Nt \quad (\text{II.40})$$

En combinant avec l'équation globale, on aura :

$$k_p(13) = \frac{n_7^2 \times n_3}{n_1^2} \times \frac{P}{Nt} \quad (\text{II.41})$$

P est connu (transformation isobare), est égale à P initial, et le Kp est calculé par la formule :

$$K_{p_k} = \exp\left(-\frac{\Delta H_K^0}{RT} + \frac{\Delta S_K^0}{R}\right) \quad (\text{II.42})$$

Donc pour les 6 équations précédentes, on aura :

$$k_p(14) = \frac{n_6^2 \times n_8}{n_2^2} \times \frac{P}{Nt} \quad (\text{II.43})$$

$$k_p(15) = \frac{n_8^2 \times n_3}{n_2^2} \times \frac{P}{Nt} \quad (\text{II.44})$$

$$kp(16) = \frac{n_{10}^2}{n_8} \times \frac{P}{Nt} \quad (\text{II.45})$$

$$kp(17) = \frac{n_9^2}{n_3} \times \frac{P}{Nt} \quad (\text{II.46})$$

$$kp(18) = \frac{n_{11}^2}{n_4} \times \frac{P}{Nt} \quad (\text{II.47})$$

$$kp(19) = \frac{n_5^2}{n_3 \times n_4} \quad (\text{II.48})$$

On se fixe pour une valeur de T. nous avons 12 équations, avec 12 inconnus :

$$f1 = n_1 + n_7 - (n \times r_c) \quad (\text{II.49})$$

$$f2 = 2n_2 + n_6 + 2n_8 + n_{10} - (m \times r_c) \quad (\text{II.50})$$

$$f3 = 2n_1 + n_2 + 2n_3 + n_5 + n_6 + n_7 + n_9 - \left(2 \times \left(n + \frac{m}{4}\right)\right) \quad (\text{II.51})$$

$$f4 = 2n_4 + n_5 + n_{11} - \left(7,52 \times \left(n + \frac{m}{4}\right)\right) \quad (\text{II.52})$$

$$f5 = (n_7^2 \times n_3) - \left(\frac{kp(13)}{P} \times Nt \times n_1^2\right) \quad (\text{II.53})$$

$$f6 = (n_6^2 \times n_8) - \left(\frac{kp(14)}{P} \times n_2^2 \times Nt\right) \quad (\text{II.54})$$

$$f7 = (n_8^2 \times n_3) \left(\frac{kp(15)}{P} \times n_2^2 \times Nt\right) \quad (\text{II.55})$$

$$f8 = n_{10}^2 - \left(\frac{kp(16)}{P} \times n_8 \times Nt\right) \quad (\text{II.56})$$

$$f9 = n_9^2 - \left(\frac{kp(17)}{P} \times n_3 \times Nt\right) \quad (\text{II.57})$$

$$f_{10} = n_9^2 - \left(\frac{kp(17)}{P} \times n_3 \times Nt \right) \quad (II.58)$$

$$f_{11} = n_{11}^2 - \left(\frac{kp(18)}{P} \times n_4 \times Nt \right) \quad (II.59)$$

$$f_{12} = n_5^2 - \left(\frac{kp(19)}{P} \times n_3 \times n_4 \right) \quad (II.60)$$

Pour la résolution de tel système, on utilise des méthodes numériques convenables:
 Ex : la méthode de NEWTON RAPHSON pour la résolution des systèmes non linéaires,
 Cette méthode fait appel à une méthode de résolution des systèmes linéaire.

3.2.2. Calcul de l'enthalpie des produits :

Une fois les nombres de moles n_i trouvés, l'enthalpie peut être calculée par la formule suivante :

$$H_p = n_1 \times H_{CO_2} + n_2 \times H_{H_2O} + n_3 \times H_{O_2} + n_4 \times H_{N_2} + n_5 \times H_{NO} + n_6 \times H_{CO} + n_7 \times H_{CO} + n_8 \times H_{H_2} + n_9 \times H_O + n_{10} \times H_H + n_{11} \times H_N \quad (II.61)$$

Avec les H_i sont calculés par la formule (26) en utilisant les a_i correspondant à l'espèce i et à la température T .

3.2.3. Calcul de température de fin de combustion :

Ce calcul nécessite l'application d'une méthode numérique, la DICHOTOMIE par exemple.

Application de la méthode de dichotomie :

L'enthalpie des réactifs étant calculée par la relation (26).

Pour T_{ad} , on choisit un intervalle de température $[T_1, T_2]$, et on remplace chaque valeur dans (21), on aura :

$$\begin{cases} f(T_1) = H_p(T_1) - H_r(T_i) \\ f(T_2) = H_p(T_2) - H_r(T_i) \end{cases} \quad (II.62)$$

Si la condition $f(T_1) \times f(T_2) > 0$ est vérifiée, il faut changer l'intervalle $[T_1, T_2]$

Si $f(T_1) \times f(T_2) < 0$ donc la température cherchée est incluse dans cet intervalle.

Pour cela, on calcule :

$$T_{ad}^0 = \frac{T_1 + T_2}{2} \quad (II.63)$$

Avec $f(T_{ad}^0) = H_p(T_{ad}^0) - H_r(T_i)$

Si $f(T_{ad}^0) \times f(T_1) < 0$ donc : T_{ad}^1 est dans l'intervalle $[T_1, T_{ad}^0]$

$$\text{Soit } T_{ad}^1 = \frac{T_{ad}^0 + T_1}{2} \quad (\text{II.64})$$

Sinon T_{ad}^1 appartient à l'intervalle $[T_{ad}^0, T_2]$

$$\text{Soit } T_{ad}^1 = \frac{T_{ad}^0 + T_2}{2} \quad (\text{II.65})$$

$$\text{Et on répète les calculs jusqu'à avoir } |T_{ad}^i - T_{ad}^{i-1}| \leq \varepsilon \quad (\text{II.66})$$

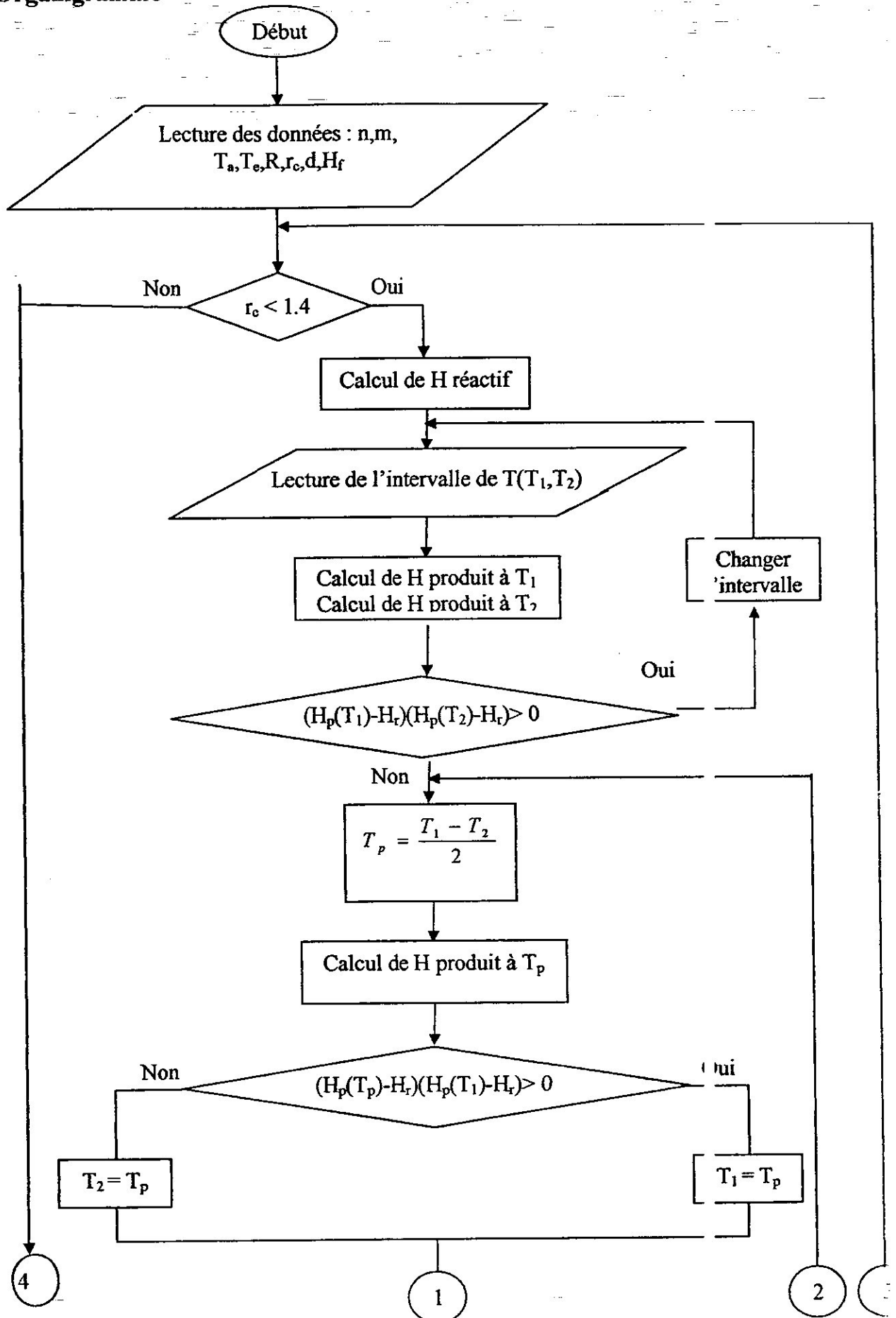
ε exprime la valeur d'erreur.

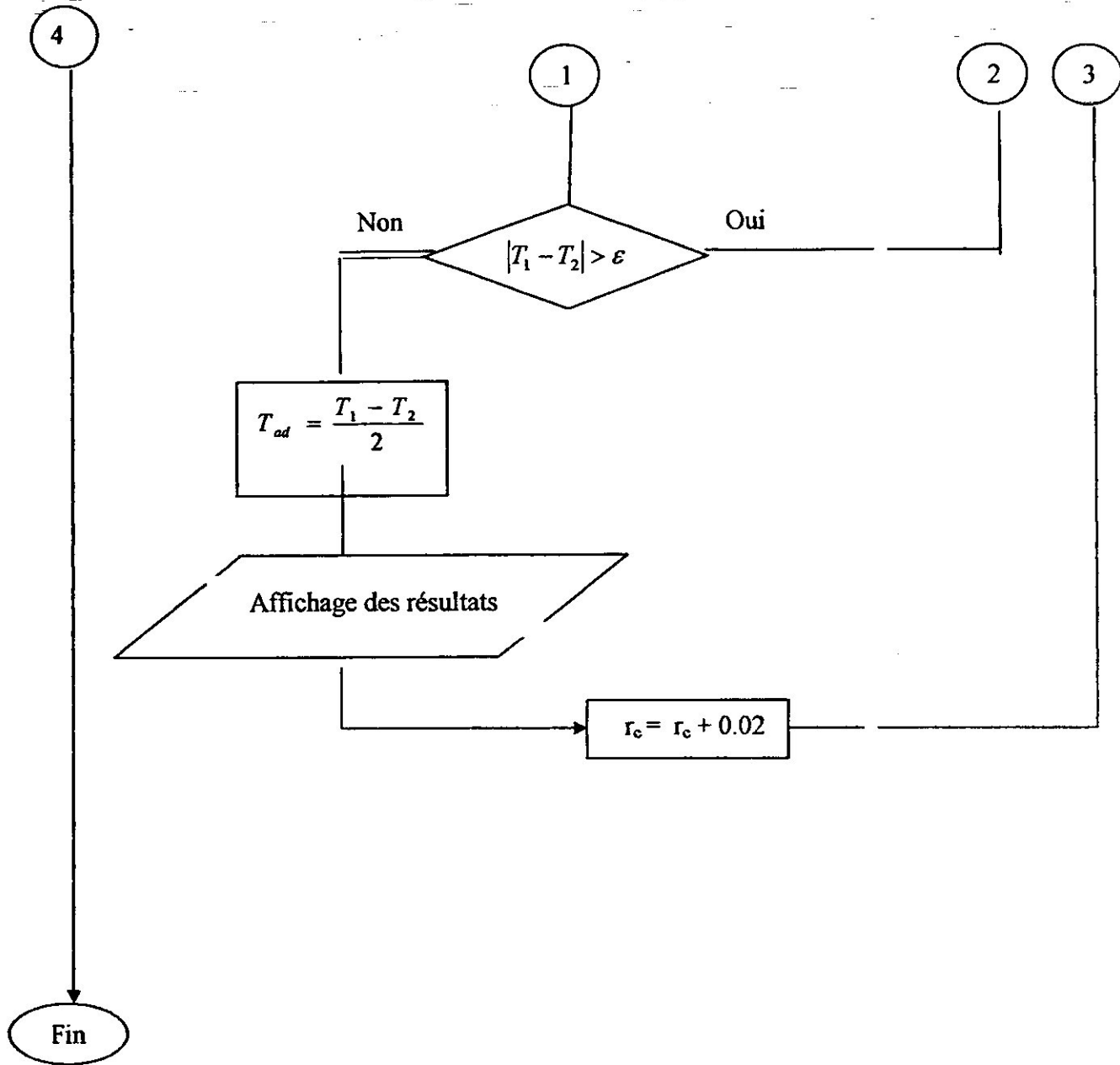
Finalement, on aura :

$$\text{La température finale de combustion } T_{ad} \approx T_{ad}^i \quad (\text{II.67})$$

Les étapes précédentes sont schématisées dans l'organigramme suivant :

3.3. Organigramme





Organigramme pour la détermination de la température et les fractions molaires des produits de combustion

Pour le calcul des enthalpie on a utilisé des sous programme :

Enthalpie des réactifs :

Subroutine calcul Hr (T,H) pour l'enthalpie de l'air [2]

Subroutine calcul Hc (T,H) pour l'enthalpie combustible

Subroutine calcul $H_f(T,H)$ pour l'enthalpie combustible [2]

Enthalpie des produits :

Pour cela , on a utilisé un sous programme « subroutine fractions (t,n,m,re,p,xi) » qui permet de déterminer les fraction molaire des différents produits ,ce sous programme fait appelle à d'autre subroutine'

calcul $K_p(T, K_p)$ pour les constantes d'équilibre

algèbres (n, a, b, x) :c'est une méthode numérique pour la résolution des systèmes d'équation linéaires [28].

Le sous programme « calcul K_p »fait appelle à son tour à deux autres sous programmes :

Calcul $H_p(T,H_p)$ pour la détermination de l' enthalpie des espèces produites [2]

Calcul $S_p(T,B_p)$ pour la détermination de l' entropie des espèces produites [2]

CHAPITRE III

Méthodes de résolution numérique

On va décrire la méthode de NEWTON_RAPHSON pour la résolution des systèmes d'équations non linéaires, cette méthode fait appel à une autre méthode pour la résolution des systèmes linéaires, on a choisit la méthode de gauss avec pivot partiel.

1. méthode de NEWTON_RAPHSON :[1] ,[28]

1.1. Histoire

La méthode de Newton a été découverte par Isaac Newton et publiée dans « Method of Fluxions » en 1736. Bien que la méthode soit décrite par Joseph Raphson dans « Analysis Aequationum » en 1690, les sections d'intérêt de « Method of Fluxions » avaient déjà été écrites, en 1671.

En analyse numérique, la méthode de Newton, ou méthode de Newton-Raphson, est un algorithme efficace pour trouver des approximations du zéro (ou racine) d'une fonction à valeurs réelles, ou des systèmes d'équations non linéaires.

1.2. Description de la méthode

On s'intéresse à la résolution du système d'équations suivant :

$$\begin{cases} f_1(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \\ f_2(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \\ \dots \\ f_n(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \end{cases} \tag{III.1}$$

Où les f_i sont des fonctions non linéaires des variables réelles x_i .

Dans notre cas, les f_i sont les suivantes :

$$f1 = n_1 + n_7 - (n \times r_c) \tag{III.2}$$

$$f2 = 2n_2 + n_6 + 2n_8 + n_{10} - (m \times r_c) \tag{III.3}$$

$$f3 = 2n_1 + n_2 + 2n_3 + n_5 + n_6 + n_7 + n_9 - \left(2 \times \left(n + \frac{m}{4} \right) \right) \tag{III.4}$$

$$f4 = 2n_4 + n_5 + n_{11} - \left(7,52 \times \left(n + \frac{m}{4}\right)\right) \quad (\text{III.5})$$

$$f5 = (n_7^2 \times n_3) - \left(\frac{kp(13)}{p} \times Nt \times n_1^2\right) \quad (\text{III.6})$$

$$f6 = (n_6^2 \times n_8) - \left(\frac{kp(14)}{p} \times n_2^2 \times Nt\right) \quad (\text{III.7})$$

$$f7 = (n_8^2 \times n_3) \left(\frac{kp(15)}{p} \times n_2^2 \times Nt\right) \quad (\text{III.8})$$

$$f8 = n_{10}^2 - \left(\frac{kp(16)}{p} \times n_8 \times Nt\right) \quad (\text{III.9})$$

$$f9 = n_9^2 - \left(\frac{kp(17)}{p} \times n_3 \times Nt\right) \quad (\text{III.10})$$

$$f10 = n_9^2 - \left(\frac{kp(17)}{p} \times n_3 \times Nt\right) \quad (\text{III.11})$$

$$f11 = n_{11}^2 - \left(\frac{kp(18)}{p} \times n_4 \times Nt\right) \quad (\text{III.12})$$

$$f12 = n_5^2 - \left(\frac{kp(19)}{p} \times n_3 \times n_4\right) \quad (\text{III.13})$$

Avec n_1, \dots, n_{11}, Nt représentent les x_i .

La relation utilisée est : $x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)}$ pour chaque itération i . (III.14)

Si chaque fonction f_i est continue et continûment différentiable, alors, par développement en séries de TAYLOR on obtient :

$$f_i(\tilde{x} + \delta) = f_i(\tilde{x}) + \frac{\partial f_i}{\partial x_1} \delta_1 + \dots + \frac{\partial f_i}{\partial x_n} \delta_n \quad (\text{III.15})$$

Lorsque $f(\tilde{x} + \delta) \rightarrow 0$, on aura donc à résoudre un système linéaire de n équations avec n inconnus :

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_n}{\partial x_1} & \frac{\partial f_n}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_n}{\partial x_n} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \delta_1 \\ \vdots \\ \delta_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -f_1 \\ \vdots \\ -f_n \end{bmatrix} \quad \text{III.16)}$$

On peut résoudre ce système en utilisant une des méthodes numériques pour la résolution des systèmes d'équations linéaires, par exemple la méthode de GAUSS.

Cette résolution permet de déterminer les δ_i , et par suite, on peut avoir les x_i par la relation :

$$x_{i+1} = x_i + \delta_i \quad \text{(III.17)}$$

Remarque : le vecteur initial est donné comme première approximation :

$$\begin{pmatrix} x_1^0 \\ x_2^0 \\ \vdots \\ x_n^0 \end{pmatrix}, \text{ c'est nécessaire pour avoir des itérations par suite.}$$

Le processus suivant doit être répété jusqu'à ce que les critères d'arrêt soient vérifiés :

- 1-Former le Jacobéen (côté gauche de « (4) »),
- 2-Résoudre le système,
- 3-Le calcul de nouvelles valeurs des x_i

Dans notre cas, le jacobéen est une matrice carrée (12x12) :

1.3. Les conditions d'arrêt :

$$\left\{ \begin{array}{l} \left| \frac{\delta_j}{x_j} \right| \leq 10^{-7} \dots \text{si} \dots |x_j| \geq 10^{-7} \\ \text{ou} \\ |\delta_j| \leq 10^{-7} \dots \text{si} \dots |x_j| \leq 10^{-7} \end{array} \right. \quad \text{(III.18)}$$

1.4. Convergence de la méthode :

Pour assurer une bonne convergence on doit suivre les étapes suivantes :

1-comparer la norme de la nouvelle fonction trouver $f_i(x_1, x_2, \dots, x_n)$ avec celle de la fonction précédant $f_{i-1}(x_1, x_2, \dots, x_n)$, avec

$$norm = \sum_{i=1}^n |f_i(\bar{x})| \quad \text{(III.19)}$$

2-si la nouvelle norme est plus grande que la norme de l'ancien vecteur, il faut diviser δ par un constant arbitraire, sinon ne rien faire.

2. La méthode de GAUSS : [28]

2.1. Principe : La méthode de gauss consiste à transformer le système $Ax=b$ en un système équivalent où A' est une matrice triangulaire supérieure.

2.2. Description de la méthode : soit le système suivant :

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix} \quad \text{(III.20)}$$

Sachant que les mêmes transformations seront opérées sur A et sur b afin de ne pas modifier le système, on simplifie l'algorithme en formant la matrice augmentée $[A, b]$ où le vecteur b devient la $(n+1)$ ème colonne, le système s'écrit donc :

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{1,n+1} \\ a_{2,n+1} \\ \vdots \\ a_{n,n+1} \end{bmatrix} \tag{III.21}$$

2.2.1. Première étape :

On transforme [A,b] en une matrice dont les termes sous diagonaux de la première colonne sont nuls : $a_{21}^{(1)} = a_{31}^{(1)} = \dots = a_{n1}^{(1)} = 0$

Prémultiplications [A,b] par E_{21} ($-a_{21}/a_{11}$). Seule la seconde ligne est modifiée et ses termes deviennent :

$$\begin{bmatrix} a_{21}^{(1)} = a_{21} - (a_{21}/a_{11})a_{11} = 0 \\ a_{22}^{(1)} = a_{22} - (a_{21}/a_{11})a_{12} \\ \dots \\ a_{2,n+1}^{(1)} = a_{2,n+1} - (a_{21}/a_{11})a_{1,n+1} \end{bmatrix} \tag{III.22}$$

Prémultiplications [A,b] par E_{31} ($-a_{31}/a_{11}$). Nous modifions la troisième ligne :

$$\begin{bmatrix} a_{31}^{(1)} = a_{31} - (a_{31}/a_{11})a_{11} = 0 \\ a_{32}^{(1)} = a_{32} - (a_{31}/a_{11})a_{12} \\ \dots \\ a_{3,n+1}^{(1)} = a_{3,n+1} - (a_{31}/a_{11})a_{1,n+1} \end{bmatrix} \tag{III.23}$$

D'une manière générale, pour annuler les termes a_{i1} , on utilise la transformation E_{i1} ($-a_{i1}/a_{11}$), ce qui donne les nouveaux termes de la ième ligne :

$$\begin{bmatrix} a_{i1}^{(1)} = a_{i1} - (a_{i1}/a_{11})a_{11} = 0 \\ a_{i2}^{(1)} = a_{i2} - (a_{i1}/a_{11})a_{12} \\ \dots \\ a_{i,n+1}^{(1)} = a_{i,n+1} - (a_{i1}/a_{11})a_{1,n+1} \end{bmatrix} \tag{III.24}$$

Donc la première étape s'écrit sous forme générale :

$$a_y^{(1)} = a_y - (a_n / a_{11}) \times a_{1j} \quad \begin{cases} i = 2, \dots, n \\ j = 2, \dots, n+1 \end{cases} \quad (\text{II.25})$$

Après la première étape, le système $[A,b]^{(1)}$ s'écrit :

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ 0 & a_{22}^{(1)} & \dots & a_{2n}^{(1)} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & a_{n2}^{(1)} & \dots & a_{nn}^{(1)} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{1,n+1}^{(1)} \\ a_{2,n+1}^{(1)} \\ \vdots \\ a_{n,n+1}^{(1)} \end{bmatrix} \quad (\text{III.26})$$

2.2.2. Deuxième étape :

Au cours de cette phase , on doit annuler les termes sous diagonaux de la seconde colonne :

$$a_{23}^{(2)} = a_{42}^{(2)} = \dots = a_{n2}^{(2)} = 0 \quad (\text{III.27})$$

Prémultiplications $[A,b]^{(1)}$ par $E_{i2} (-a_{i2}^{(1)} / a_{22}^{(1)})$ pour modifier la ième ligne comme suite :

$$\begin{cases} a_{i2}^{(2)} = a_{i2}^{(1)} - (a_{i2}^{(1)} / a_{22}^{(1)}) \cdot a_{22}^{(1)} = 0 \\ a_{i3}^{(2)} = a_{i3}^{(1)} - (a_{i2}^{(1)} / a_{22}^{(1)}) \cdot a_{23}^{(1)} \\ \dots \\ a_{i,n+1}^{(2)} = a_{i,n+1}^{(1)} - (a_{i2}^{(1)} / a_{22}^{(1)}) \cdot a_{2,n+1}^{(1)} \end{cases} \quad (\text{III.28})$$

La deuxième étape s'écrit donc :

$$a_y^{(2)} = a_y^{(1)} - (a_{i2}^{(1)} / a_{22}^{(1)}) \times a_{2j}^{(1)} \quad \begin{cases} i = 3, \dots, n \\ j = 3, \dots, n+1 \end{cases} \quad (\text{III.29})$$

A la fin de cette étape, le système $[A,b]^{(2)}$ s'écrit :

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \dots & a_{1n} \\ 0 & a_{22}^{(1)} & a_{23}^{(1)} & \dots & a_{2n}^{(1)} \\ 0 & 0 & a_{33}^{(2)} & \dots & a_{3n}^{(2)} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & a_{n3}^{(2)} & \dots & a_{nn}^{(2)} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{1,n+1}^{(1)} \\ a_{2,n+1}^{(1)} \\ a_{3,n+1}^{(2)} \\ \vdots \\ a_{n,n+1}^{(2)} \end{bmatrix} \tag{III.30}$$

2.2.3. K ième étape :

Nous pouvons donc condenser les transformation à la k ième étape par :

$$a_{ij}^{(k)} = a_{ij}^{(k-1)} - (a_{ik}^{(k-1)} / a_{kk}^{(k-1)}) \times a_{kj}^{(k-1)} \quad \begin{cases} i = k + 1, \dots, n \\ j = k + 1, \dots, n + 1 \end{cases} \tag{III.31}$$

On remarque que toutes ces transformations supposent que les termes a_{kk} appelés p vots sont non nuls .il faudra donc ajouter une phase de vérification de la non nullité du pivot, ain si dans la pratique, afin de minimiser l'erreur d'arrondi, on évite le plus possible la division pa de petits pivots.

2.3. Algorithme général

2.3.1. Première phase :

Procédé du pivot partiel :

On choisit comme pivot l'élément $a_{rk}^{(k-1)}$ tel que :

$$a_{rk}^{(k-1)} = \max |a_{ik}^{(k-1)}| \quad i = k, \dots, n \tag{III.32}$$

Et on permute les lignes k et r.

2.3.2. Deuxième phase :

La matrice $[A,b]^{(k-1)}$ étant éventuellement modifiée par la première phase ,on opè e les calculs des éléments non nuls qui correspondent à :

$$a_{ij}^{(k)} = a_{ij}^{(k-1)} - (a_{ik}^{(k-1)} / a_{kk}^{(k-1)}) \times a_{kj}^{(k-1)} \quad \begin{cases} k = 1, \dots, n-1 \\ i = k+1, \dots, n \\ j = k+1, \dots, n+1 \end{cases} \quad (\text{III.33})$$

2.3.3. Troisième phase :

Après l'obtention du système triangulaire $A^{(n-1)}x = b^{(n-1)}$, on le résout suivant cette formule :

$$x_i = \frac{1}{a_{ii}} \left[b_i - \sum_{j=i+1}^n a_{ij}^{(n-1)} x_j \right] \quad i = n, n-1, \dots, 1 \quad (\text{III.34})$$

Remarque :

Dans notre cas, on a à résoudre un système d'équations non linéaires (de 12 équations), et le jacobéen obtenu est :

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial f_n}{\partial x_1} & \frac{\partial f_n}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_n}{\partial x_n} \end{bmatrix}$$

On le représente dans la matrice suivante :

	$\frac{\partial f_i}{\partial x_1}$	$\frac{\partial f_i}{\partial x_2}$	$\frac{\partial f_i}{\partial x_3}$	$\frac{\partial f_i}{\partial x_4}$	$\frac{\partial f_i}{\partial x_5}$	$\frac{\partial f_i}{\partial x_6}$	$\frac{\partial f_i}{\partial x_7}$	$\frac{\partial f_i}{\partial x_8}$	$\frac{\partial f_i}{\partial x_9}$	$\frac{\partial f_i}{\partial x_{10}}$	$\frac{\partial f_i}{\partial x_{11}}$	$\frac{\partial f_i}{\partial x_{12}}$
f_1	1	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0
f_2	0	2	0	0	0	1	0	2	0	1	0	0
f_3	2	1	2	0	1	1	1	0	1	0	0	0
f_4	0	0	0	2	1	0	0	0	0	0	1	0
f_5	0	0	a	b	c	0	0	0	0	0	0	0
f_6	0	d	0	0	0	e	0	f	0	0	0	g
f_7	h	0	i	0	0	0	j	0	0	0	0	k
f_8	0	l	m	0	0	0	0	n	0	0	0	o
f_9	0	0	p	0	0	0	0	0	q	0	0	r
f_{10}	0	0	0	0	0	0	0	s	0	t	0	u
f_{11}	0	0	0	v	0	0	0	0	0	0	w	x
f_{12}	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	-1

f_1	$\frac{\partial f_1}{\partial x_1}$	$\frac{\partial f_1}{\partial x_2}$	$\frac{\partial f_1}{\partial x_3}$	$\frac{\partial f_1}{\partial x_4}$	$\frac{\partial f_1}{\partial x_5}$	$\frac{\partial f_1}{\partial x_6}$	$\frac{\partial f_1}{\partial x_7}$	$\frac{\partial f_1}{\partial u_8}$	$\frac{\partial f_1}{\partial u_9}$	$\frac{\partial f_1}{\partial u_{10}}$	$\frac{\partial f_1}{\partial u_{11}}$	$\frac{\partial f_1}{\partial u_{12}}$
f_2	0	2	0	0	0	1	0	2	0	1	0	0
f_3	2	1	2	0	1	1	1	0	1	0	0	0
f_4	0	0	0	2	1	0	0	0	0	0	1	0
f_5	0	0	a	b	c	0	0	0	0	0	0	0
f_6	0	d	0	0	0	e	0	f	0	0	0	g
f_7	h	0	i	0	0	0	j	0	0	0	0	k
f_8	0	l	m	0	0	0	0	n	0	0	0	o
f_9	0	0	p	0	0	0	0	0	q	0	0	r
f_{10}	0	0	0	0	0	0	0	s	0	t	0	u
f_{11}	0	0	0	v	0	0	0	0	0	0	w	x
f_{12}	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	-1

$$a = -\frac{Kp(19)}{P}n_4$$

$$b = -\frac{Kp(19)}{P}n_3$$

$$c = 2n_5$$

$$d = -2\frac{Kp(14)}{P}n_2Nt$$

$$e = 2n_8n_6$$

$$f = n_6^2$$

$$g = -\frac{Kp(14)}{P}n_2^2$$

$$h = -2\frac{Kp(13)}{P}n_1Nt$$

$$i = n_7^2$$

$$j = 2n_3n_7$$

$$k = -\frac{Kp(13)}{P}n_1^2$$

$$l = -2\frac{Kp(15)}{P}n_2Nt$$

$$m = n_8^2$$

$$n = 2n_3n_8$$

$$o = -\frac{Kp(15)}{P}n_2^2$$

$$p = -\frac{Kp(17)}{P}Nt$$

$$q = 2n_9$$

$$r = -\frac{Kp(17)}{P}n_3$$

$$s = -\frac{Kp(16)}{P}Nt$$

$$t = 2n_{10}$$

$$u = -\frac{Kp(16)}{P}n_8$$

$$v = -\frac{Kp(18)}{P}Nt$$

$$w = 2n_{11}$$

$$x = -\frac{Kp(18)}{P}n_4$$

CHAPITRE IV

Étude de la flamme laminaire prémélangée

1. Équations de l'onde de combustion [17],[20]

Nous allons écrire les équations de conservation, dans une hypothèse de gaz parfaits ($c_p = Cte$; $cp = Cte$), de part et d'autre de l'onde de combustion, l'indice 1 désignant les gaz frais l'indice 2 les gaz brûlés.

1.1. Équation de continuité :

$$m = \rho_1 u_1 = \rho_2 u_2 \quad (\text{IV.1})$$

1.2. Équation de quantité de mouvement (dynamique) :

$$p_1 + \rho_1 u_1^2 = p_2 + \rho_2 u_2^2 \quad (\text{IV.2})$$

1.3. Équation de l'énergie :

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

soit, avec $h = cpT + h^0$

où h^0 est l'enthalpie massique de formation dans l'état standard :

$$CpT_1 + h_1^0 + \frac{u_1^2}{2} = CpT_2 + h_2^0 + \frac{u_2^2}{2} \quad (\text{IV.4})$$

$$\Delta h^0 = h_1^0 - h_2^0 \quad (\text{IV.5})$$

$$CpT_1 + \frac{u_1^2}{2} + \Delta h^0 = CpT_2 + \frac{u_2^2}{2} \quad (\text{IV.6})$$

où Δh^0 est l'enthalpie massique de la réaction de combustion.

1.4. Équations d'état

$$p_1 = \rho_1 RT_1 \quad (\text{IV.7})$$

$$p_2 = \rho_2 RT_2 \quad (\text{IV.8})$$

Dans un bec Bunsen, u_1 est la vitesse de l'onde de combustion.

$$\rho_1^2 u_1^2 - \left(\frac{1}{\rho_1} - \frac{1}{\rho_2} \right) = p_2 - p_1 \quad (\text{IV.13})$$

$$\text{Donc : } u_1^2 = \frac{1}{\rho_1^2} \frac{p_2 - p_1}{(1/\rho_1) - (1/\rho_2)} \quad (\text{IV.14})$$

Soit, en introduisant la vitesse du son :

$$c_1^2 = \gamma RT_1 = \gamma p_1 (1/\rho_1) \quad (\text{IV.15})$$

et le nombre de Mach :

$$Ma_1 = \frac{u_1}{c_1} \quad (\text{IV.16})$$

On aura :

$$Ma_1^2 \gamma p_1 (1/\rho_1) = (1/\rho_1^2) \frac{p_2 - p_1}{(1/\rho_1) - (1/\rho_2)} \quad (\text{IV.17})$$

$$\Rightarrow \gamma Ma_1^2 = \left(\frac{p_2 - p_1}{p_1} \right) \frac{1/\rho_1}{(1/\rho_1) - (1/\rho_2)}$$

$$\text{Donc : } \gamma Ma_1^2 = \left(\frac{p_2}{p_1} - 1 \right) / \left(1 - \frac{(1/\rho_2)}{(1/\rho_1)} \right) \quad (\text{IV.18})$$

et de même :

$$\gamma Ma_2^2 = \left(1 - \frac{p_2}{p_1} \right) / \left(\frac{(1/\rho_1)}{(1/\rho_2)} - 1 \right) \quad (\text{IV.19})$$

Relations liant les nombres de Mach de l'onde de combustion par rapport aux gaz frais et aux gaz brûlés aux valeurs des paramètres des états (1) et (2).

Cherchons un lieu pour le point (2) dans le diagramme $[p, (1/\rho)]$ de la figure 1. Pour cela, utilisons l'équation de l'énergie (3) :

$$h_2 - h_1 = \frac{1}{2} (u_1^2 - u_2^2) \quad (\text{IV.20})$$

Comme d'après (1) :

$$u_1^2 - u_2^2 = m \left(\frac{1}{\rho_1^2} - \frac{1}{\rho_2^2} \right) \quad (\text{IV.21})$$

et d'après (2) :

$$m^2 = \frac{p_2 - p_1}{(1/\rho_1) - (1/\rho_2)} \quad (\text{IV.22})$$

on obtient l'équation d'Hugoniot :

$$h_2 - h_1 = \frac{1}{2}(p_2 - p_1) \left(\frac{1}{\rho_1} + \frac{1}{\rho_2} \right) \quad (\text{IV.23})$$

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

$$h_2 - h_1 = cp(T_2 - T_1) - \Delta h^0 \quad (\text{IV.24})$$

Cette équation s'exprime (à $C_p = Cte$) en fonction de l'enthalpie de réaction Δh^0 et des caractéristiques ($p_2, 1/\rho_2$) des produits ; qui suppose l'hypothèse

$\gamma = Cte$, vérifiée pour la combustion dans l'air, et :

$$T_2 - T_1 = \frac{1}{R} \left(\frac{p_2}{\rho_2} - \frac{p_1}{\rho_1} \right) \quad (\text{IV.25})$$

on obtient la relation :

$$\frac{\gamma}{\gamma - 1} \left(\frac{p_2}{\rho_2} - \frac{p_1}{\rho_1} \right) - \frac{1}{2} (p_2 - p_1) \left(\frac{1}{\rho_1} + \frac{1}{\rho_2} \right) = \Delta h^0 \quad (\text{IV.26})$$

Le lieu des solutions est donc, dans le plan $[p, (1/\rho)]$, une courbe dont l'équation, en transformant (26), s'écrit :

$$p_2 = \frac{\alpha + \beta (1/\rho_2)}{\gamma + \delta (1/\rho_2)} \quad (\text{IV.27})$$

avec :

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

$$\gamma = -\frac{1}{2\rho_1}, \quad \delta = \frac{\gamma + 1}{2(\gamma - 1)}$$

La courbe d'Hugoniot des produits est donc une hyperbole (figure 2). Pour $\Delta h^0 = 0$ (pas de réaction chimique), la courbe passe par le point (1). La courbe, reportée dans le plan $(p, 1/\rho)$, peut être décomposée en trois régions auxquelles correspondent les différentes solutions possibles (intersections de la droite de Rayleigh avec l'hyperbole d'Hugoniot des produits).

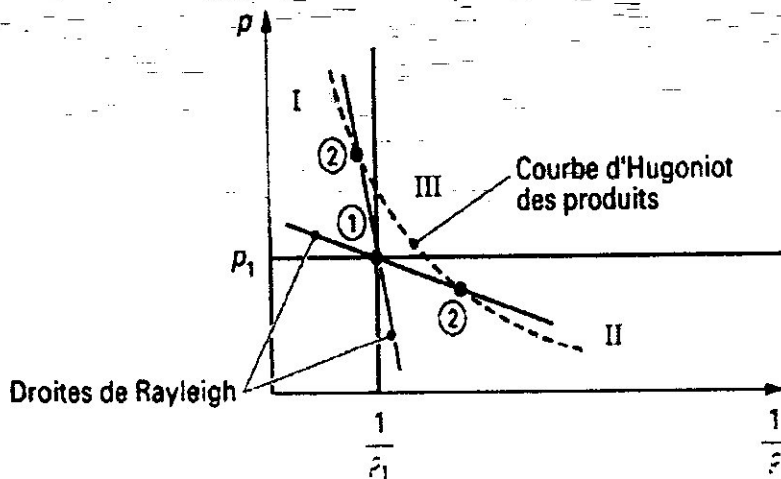


Fig IV.2 : Hyperbole d'Hugoniot

**Dans la région I, $p_2 \gg p_1$; en revanche, $(1/\rho_2) < (1/\rho_1)$ mais le rapport $(1/\rho_2) / (1/\rho_1)$ est très proche de 1. D'où :

$$\gamma Ma_1^2 \gg 1$$

Et comme $\gamma = 1,4$, on aura : $Ma_1 > 1$

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

**Dans la région II, $p_2 < p_1$ (mais très proche) et $(1/\rho_2) \gg (1/\rho_1)$.

Dans l'équation (7), le numérateur est donc négatif et grand devant 1.

On a donc :

$$\gamma Ma_1^2 \ll 1 \quad \text{et} \quad Ma_1 \ll 1$$

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

**Dans la région III, il n'y a pas de solution possible. On voit d'ailleurs que, d'après l'équation (7), cette région correspond à $p_2 > p_1$ et $(1/\rho_2) > (1/\rho_1)$ et conduit à un nombre de Mach complexe $Ma_1^2 < 0$

2. Propagation d'une flamme laminaire

La déflagration est donc représentée, dans le diagramme de Clapeyron, par la région II de la courbe d'Hugoniot des produits (figure 3) :

$$\begin{aligned} p_2 &= p_1 \\ (1/\rho_2) &\gg (1/\rho_1) \\ \left(u_2 = \frac{m}{\rho_2} \right) &\gg \left(u_1 = \frac{m}{\rho_1} \right) \end{aligned}$$

La solution $(p_2, 1/\rho_2)$ étant donnée par l'intersection de la courbe d'Hugoniot des produits avec la droite de Rayleigh de pente m , on voit que deux solutions sont théoriquement possibles jusqu'à un débit limite conduisant au point où la droite de Rayleigh est tangente à celle d'Hugoniot des produits (point C-J ou de Chapman-Jouguet).

On montre que ce régime limite correspond à une vitesse finale exactement sonique et que, dans le cas général, correspond à un écoulement subsonique et à un écoulement supersonique.

Partant d'un état initial $M_1(p_1, 1/\rho_1)$, l'état subsonique est possible.

En revanche, l'état supersonique est impossible : sont bien compatibles entre eux par l'intermédiaire d'un choc droit, mais le passage de subsonique à supersonique est interdit par le théorème de Carnot. On démontre aussi (phénomène du blocage thermique) qu'il est impossible, à section constante, d'apporter à un écoulement subsonique une quantité de chaleur supérieure à celle qui l'accélère, par suite de la variation de ρ , jusqu'à la valeur limite

$Ma = 1$. En effet, si on tente d'apporter une énergie supplémentaire, la courbe d'Hugoniot se déplace et ne permet plus de solution (plus d'intersection avec la droite de Rayleigh).

Sous l'effet de l'excès de chaleur, l'écoulement va se trouver bloqué vers l'amont et un train d'ondes de compression va se former et remonter vers l'amont pour changer les conditions initiales.

Le raisonnement précédent montre que, pour une enthalpie de réaction donnée, la solution subsonique de l'onde de combustion est située sur la courbe d'Hugoniot (dans la zone II) mais ne permet pas d'obtenir une valeur unique de la vitesse de déflagration. Il faut pour cela utiliser une équation supplémentaire, qui peut être obtenue à partir de l'étude de la structure de l'onde de combustion et de l'expression du taux de production d'énergie par la réaction.

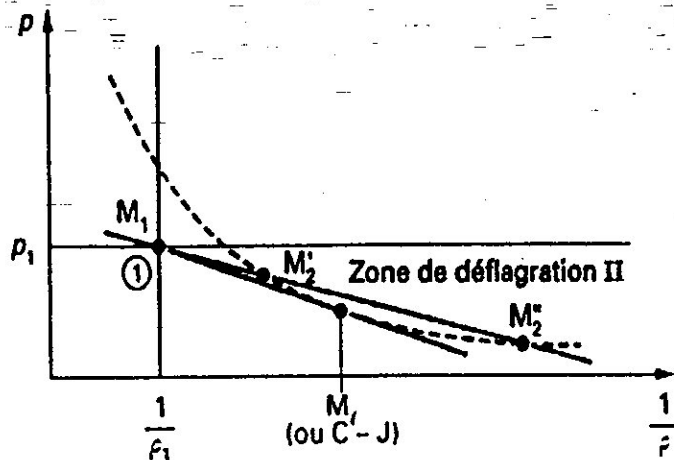


Fig IV.3 : Zone de déflagration

2.1 Rappels sur les phénomènes de transport

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 :

$$G_{D_j} = -\rho D_{ij} \nabla Y_j \tag{IV.28}$$

$$Y_j = \frac{m_j}{m} \tag{IV.29}$$

avec D_{ij} diffusivité massique de l'espèce j par rapport à l'espèce i (dim $D_{ij} = L^2 T^{-1}$),
 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 :

$$G_T = -\lambda \nabla T = -\rho C_p D_T \nabla T \tag{IV.30}$$

Avec λ conductivité thermique,

D_T diffusivité thermique (dim $D_T = L^2 T^{-1}$).

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

$$G_u = -\mu \nabla u = -\nu \rho \nabla u \tag{IV.31}$$

Avec μ viscosité dynamique,

ν viscosité cinématique (dim $\nu = L^2 T^{-1}$)

2.2. Les nombres adimensionnelles :

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

— le nombre de Prandtl

$$Pr = \frac{\nu}{D_T} \quad (IV.32)$$

Qui compare le transport de quantité de mouvement au transport thermique ;

— le nombre de Schmidt

$$Sc = \frac{\nu}{D_{ij}} \quad (IV.33)$$

Qui compare le transport de quantité de mouvement au transport de masse par diffusion ;

— le nombre de Lewis

$$Le = \frac{D_T}{D_{ij}} = \frac{Sc}{Pr} \quad (IV.34)$$

Qui compare le transport de masse par diffusion au transport thermique.

Si, en particulier, $D_T = D_{ij} = \nu$, 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 μ , d'énergie me peuvent également être la conséquence du mouvement de fluide. C'est le transport convectif dont le flux massique est ρu (u étant la vitesse moyenne). Le flux convectif est alors :

$$I = \rho u \frac{F}{m} \quad (IV.35)$$

où $F = m_j$, μ ou me , soit :

$$I_j = \rho u y_j ; I_u = \rho u u ; I_e = \rho u e$$

avec I_j et I_u flux convectif respectivement de l'espèce j et de la quantité de mouvement, $\rho u e$ flux convectif d'énergie par unité de temps et de surface.

2.3. Vitesse de flamme laminaire

C'est la vitesse de déplacement des gaz frais par rapport à l'onde de combustion laminaire, perpendiculairement à celle-ci. Historiquement, les approches théoriques pour le calcul de la vitesse de flamme laminaire sont de deux ordres :

— théories thermiques liées aux phénomènes de transport ;

— théories diffusionnelles fondées sur la diffusion d'atomes et de radicaux libres.

Nous étudions essentiellement deux exemples de théories thermiques : la théorie ancienne de Mallard et Le Châtelier (1885) qui, à partir d'hypothèses simples, conduit à une expression intéressante de la vitesse et celle due à Zeldovitch, Franck-Kamenetskii et Semenov (1938).

Nous donnons quelques indications concernant les théories diffusionnelles et nous nous intéressons également aux développements plus récents, qui prennent simultanément en compte les phénomènes de transport et les réactions chimiques complexes.

2.3.1. Théorie de Mallard et Le Châtelier

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

(Figure 4).

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

$$\frac{dT}{dx} = \frac{T_2 - T_i}{\delta_r} \quad (\text{IV.36})$$

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

$$mC_p(T_i - T_1) = \lambda \frac{T_2 - T_i}{\delta_r} \quad (\text{IV.37})$$

avec λ conductivité thermique

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 $m = \rho S_l$, on obtient :

$$\rho S_l C_p (T_i - T_1) = \lambda \frac{T_2 - T_i}{\delta_r} \Rightarrow S_l = \frac{\lambda (T_2 - T_i)}{\rho C_p (T_i - T_1) \delta_r} \quad (\text{IV.38})$$

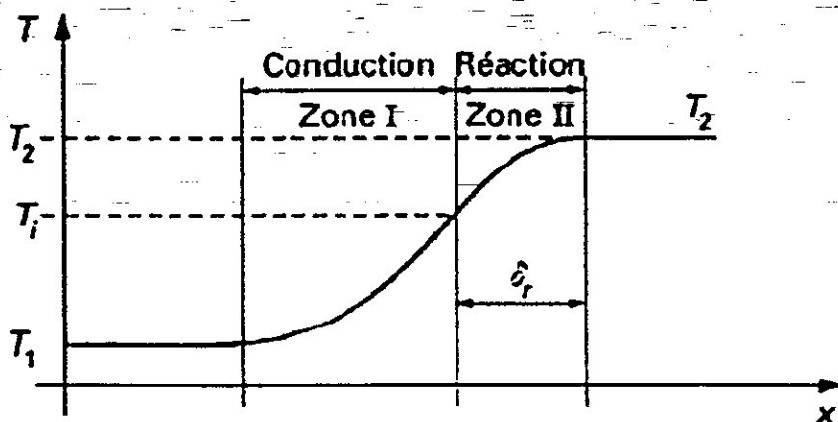


Fig IV. 4 : Propagation de la chaleur suivant la théorie de Mallard et Le Châtelier

Sous cette forme, l'équation contient T_i et δ_r qui sont inconnues.

En ce qui concerne T_i , 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 de l'inflammation spontanée et les centres actifs de la 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.

2.3.1.1. Interprétation de l'épaisseur de la zone de réaction vive (δ_r) :

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

$$\delta_r = S_l \tau_c \tag{IV.39}$$

Où τ_c , temps chimique nécessaire à la réaction, est inversement proportionnel au taux de réaction moyen ϖ :

$$\tau_c \propto \frac{1}{\varpi} \tag{IV.40}$$

Donc :
$$S_l \propto \frac{\lambda}{\rho C_p} \frac{T_2 - T_i}{T_i - T_1} \frac{\varpi}{S_l} \tag{IV.41}$$

et enfin :

$$S_l \propto \left(\frac{\lambda}{\rho C_p} \varpi \right)^{1/2} \text{ ou } S_l \propto (D_r \varpi)^{1/2} \tag{IV.42}$$

Cette méthode, en l'absence de connaissance de T_i , ne permet pas d'obtenir de valeur théorique acceptable pour (aucune méthode simple ne le permet d'ailleurs vraiment).

Cependant, ce raisonnement très simple conduit aux deux caractéristiques essentielles de la vitesse de propagation d'une onde laminaire : celle-ci est proportionnelle à la racine carrée de la diffusivité thermique et à la racine carrée du taux de réaction. Le taux de réaction détermine le gradient de température par son effet sur l'épaisseur de la zone de réaction. La diffusion (ici de chaleur) a pour conséquence la propagation de la flamme.

2.3.2. Théorie de Zeldovitch, Franck-Kamenetskii et Semenov (1938)

C'est une extension de la théorie initiale 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 (inconnue) T_i intervient encore, mais comme simple condition aux limites des deux parties du problème (figure 5).

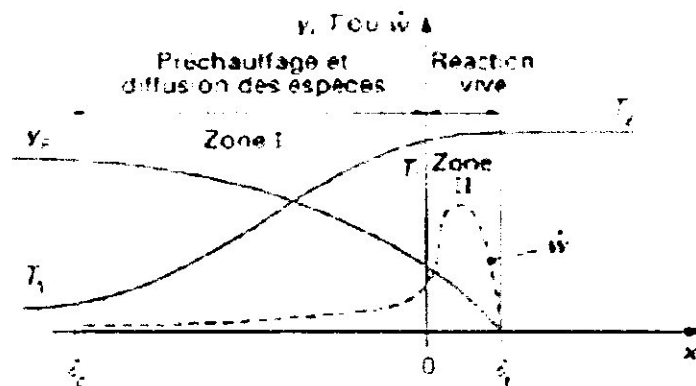


Fig IV.5 : Structure du front de flamme : profils de température, de fraction massique du combustible et de taux de réaction

2.3.2.1. Hypothèses simplificatrices

*On considère un gaz au repos où la conductivité thermique λ , la capacité thermique massique C_p , les termes de diffusion des espèces ρD_{ij} sont constants quelles que soient la température et la composition du mélange (on peut, en fait, prendre des valeurs moyennes entre les deux températures limites T_1 et T_2).

*On suppose de plus que $Le \gg 1$, soit

$$D_T = \frac{\lambda}{\rho C_p} = D_{ij} \quad (\text{IV.43})$$

*On suppose également que le nombre total de moles du mélange ne change pas avec la combustion.

*Enfin, 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 (taux de consommation du combustible) suit une loi d'Arrhenius :

$$\dot{\omega} = A v_F M_F \left(\frac{\rho Y_F}{M_F} \right)^{n_F} \left(\frac{\rho Y_O}{M_O} \right)^{n_O} T^\beta e^{-\frac{E_a}{RT}} \quad (\text{IV.44})$$

Avec A facteur préexponentiel de la loi d'Arrhenius,

E énergie d'activation,

$\dot{\omega}$ taux de réaction,

Y_O fraction massique de l'oxydant,

Y_F fraction massique du combustible.

v_F est le coefficient stochiométrique du fuel.

n_F, n_O, β sont des paramètres de la loi d'Arrhenius.

2.3.2.2. La vitesse de la flamme

En suivant ces hypothèses, et en utilisant les équations de bilan, on arrive à formuler la vitesse de flamme laminaire prémélangée S_l :

$$S_l = \frac{\lambda}{\rho_1 C_p (T_2 - T_1)} \left(\frac{2\Delta h^0}{\lambda} \int_{T_1}^{T_2} \dot{\omega} dT \right)^{1/2} \quad (\text{IV.45})$$

La plus grande partie de la réaction vive a lieu au voisinage de T_2 , et on peut écrire

$$(T_2 - T_1) \approx (T_2 - T_1) \quad \text{donc :} \quad \int_{T_1}^{T_2} \dot{\omega} dT \approx \int_{T_1}^{T_2} \dot{\omega} dT \quad \text{et en conséquence, on peut écrire :}$$

$$S_l = \left(\frac{cte \lambda \Delta h^0 \bar{\omega}}{\rho_1^2 C_p^2 (T_2 - T_1)} \right)^{1/2} \quad (\text{IV.46})$$

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

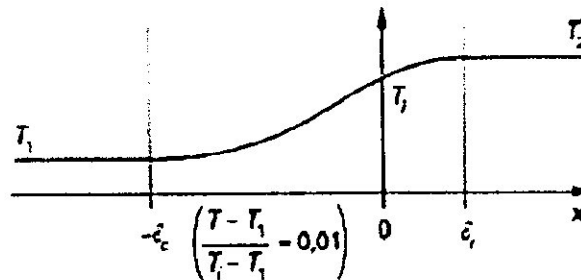
$$\bar{\omega} = \frac{1}{T_2 - T_1} \int_{T_1}^{T_2} \omega \, dT \quad (\text{IV.47})$$

2.3.2.3. L'épaisseur de la flamme

T_i étant très proche de T_2 , l'épaisseur de la zone de réaction vive δ_r est beaucoup plus mince que celle de la zone de préchauffage δ_c (figure 6). C'est cette dernière que nous déterminerons.

On définit par convention δ_c comme étant l'abscisse pour laquelle :

$$\delta_c = \frac{T - T_1}{T_i - T_1} = \frac{1}{100} \quad (\text{IV.48})$$



FigIV.6 – Détermination de l'épaisseur de la flamme

En effet, en toute rigueur, l'évolution exponentielle de T dans la zone de préchauffage :

$$\frac{T - T_1}{T_i - T_1} = \exp\left(\frac{mCp}{\lambda} x\right) \quad (\text{IV.49})$$

Conduit, pour $T=T_1$, à $x \rightarrow -\infty$.

Avec l'hypothèse faite :

$$\frac{1}{100} = \exp\left(\frac{mCp}{\lambda} \delta_c\right) \Leftrightarrow 2 \ln 10 = \frac{mCp}{\lambda} \delta_c$$

$$\text{Donc } \delta_c = 2 \ln 10 \frac{\lambda}{mCp} = 4,6 \frac{\lambda}{S_1 \rho_1 Cp}$$

Et finalement :

$$\delta_c = 4,6 \frac{D_i}{S_i} \quad (\text{IV.50})$$

2.3.3 Théorie diffusionnelle

2.3.3.1. Introduction :

Elle est en particulier due à Tanford et Pease (1947) qui ont supposé que, pour certaines réactions en flammes laminares, la vitesse de flamme est liée au taux de diffusion des 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. Nous supposons également que le front de flamme est caractérisé par une concentration moyenne X_r en radicaux libres et une température moyenne T_m homogène (figure 7).

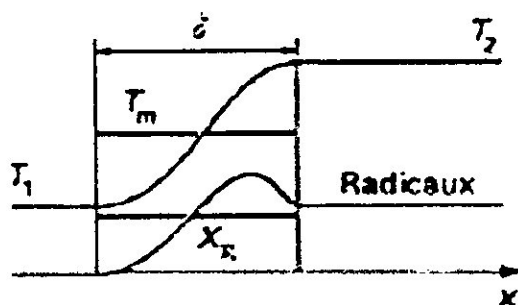
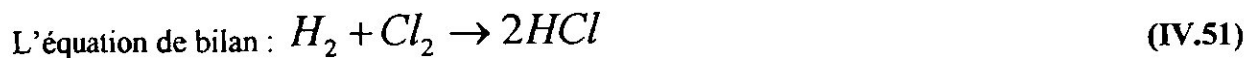


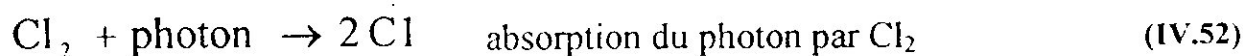
Fig IV. 7 : Propagation de la chaleur suivant la théorie diffusionnelle

La réaction de combustion en chaîne comporte essentiellement des réactions de ramification de la chaîne (qui augmentent le nombre de radicaux libres) et de rupture (qui diminuent ce nombre par recombinaison).

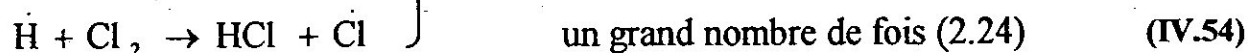
Exemple des réactions en chaîne : la synthèse de HCl



de synthèse de HCl est connue pour pouvoir être initiée par des photons de fréquence adéquate. On a constaté que le nombre de molécules HCl produites pouvait dépasser le million par photon reçu par le mélange. On dit que le rendement quantique est élevé. C'est la raison pour laquelle on a été amené à imaginer le mécanisme ci-dessous



Après quoi



La première réaction de cette séquence est l'étape d'initiation de la chaîne, elle est photochimique dans le cas présent. La deuxième et la troisième, qui peuvent se répéter un très grand nombre de fois, d'où le grand nombre de molécules HCl produites avec un seul photon, sont les étapes de propagation de la chaîne; à elles deux elles constituent un « maillon » de cette chaîne. La quatrième et la cinquième réaction sont des réactions de rupture de la chaîne. Les radicaux libres, comme ici H et Cl, qui contribuent à propager la chaîne sont appelés centres actifs ou centres propagateurs.

Les réactions en chaîne jouent un rôle essentiel en combustion, et pour commencer dans celle de l'hydrogène, laquelle se déroule à peu près suivant le mécanisme ci-dessous:



Initiation



Propagation dite en chaîne droite, un radical à gauche en donnant un à droite



Propagation dite ramifiée, un radical à gauche en donnant deux à droite



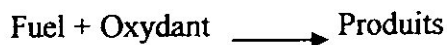
suivies des réactions de recombinaison des radicaux, donc de coupures de chaînes telles que:



3. Présentation du modèle étudié : [6],[13],[10],[16]

On s'intéresse à l'étude d'une flamme laminaire prémélangée d'un hydrocarbure C_nH_m, notre modèle sera étudié dans le cadre des hypothèses suivantes :

* On se placera dans le cadre d'une chimie simple avec une seule réaction irréversible



* On supposera que le nombre de LEWIS $Le = \frac{\lambda}{\rho C_p D_T}$ est égale à 1.

Ces hypothèses paraissent très fortes, mais elles sont raisonnables dans la plupart des cas.

3.1. Cinétique chimique

La cinétique chimique traite de l'évolution dans le temps des systèmes dans lesquels s'effectuent des réactions chimiques. Cette évolution peut être décrite soit par les propriétés macroscopiques qui sont exprimées en fonction du temps (cinétique formelle), soit par les espèces chimiques qui se forment et (ou) disparaissent simultanément ou successivement (mécanismes réactionnels). La notion centrale de la cinétique chimique est celle de vitesse de réaction. Elle vise à décrire la modification de la composition chimique du système au cours du temps. Elle intervient donc aussi bien en cinétique formelle que dans les mécanismes réactionnels. [33]

Soit le cas d'un écoulement avec M réactions faisant intervenir N réactifs M_{kj} :



Avec v'_{kj} et v''_{kj} les coefficients stoechiométriques respectivement des réactifs et des produits.

$$\rho UCp \frac{dT}{dx} = \frac{d}{dx} \left(\lambda \frac{dT}{dx} \right) - \omega_T \quad (\text{IV.71})$$

L'indice f représente le fuel.

La résolution de ce système est très difficile, on doit définir des variables réduites :

$$Y = \frac{Y_F}{y_{F1}} \quad (\text{IV.72})$$

Avec Y_{F1} est la fraction molaire initial du fuel.

$$\theta = \frac{T - T_1}{T_2 - T_1} \text{ est la température réduite.} \quad (\text{IV.73})$$

En supposant que le nombre de Lewis est égal à 1, on aura : $Y + \theta = 1$. Il suffit donc de résoudre l'équation de la température pour résoudre entièrement le système.

Dans l'expression de taux de réaction, la température apparaît d'une façon non linéaire, donc on doit utiliser un modèle simplifié de ω :

Echekki et Ferziger ont proposé un modèle de taux de réaction plus simple que le modèle

D'Arrhenius, noté ω_{EF} . Leur modèle propose de considérer le taux de réaction comme une fonction triangulaire en fonction de la température réduite qui s'écrit :

$$\omega_{EF} = \rho R_r (1 - \theta) H(\theta - \theta_c) \quad [16] \quad (\text{IV.74})$$

$$\text{Avec } \theta_c = 1 - \frac{1}{\beta} \quad (\text{IV.75})$$

H est la fonction d'HEAVISIDE.

R_r est une constante.

3.2. Calcul de la vitesse de flamme

La vitesse de flamme est calculée grâce à la formule démontrée par Mitani : [16], [1] :

$$S_L = \left[\frac{2 \lambda v_f (v_o v_f)^{n_o} \rho_2^{n_f + n_o} A_f T_2^\beta Y_f^{n_f + n_o - 1} Le_f^{n_f} Le_o^{n_o}}{\rho_1^2 W_f^{n_f + n_o - 1} \beta^{n_f + n_o + 1}} \right]^{1/2} \quad (\text{IV.76})$$

$$G(n_f, n_o)^{1/2} \exp\left(-\frac{\beta_1}{2\alpha}\right)$$

Avec :

*La fonction G est défini par : $G(n_f, n_o) = \int_0^\infty \zeta^{n_f} \left(\zeta + \frac{\Phi - 1}{Le_o}\right)^{n_o} \exp(-\zeta) d\zeta \quad (\text{IV.77})$

* v_f et v_o sont les coefficients stoechiométriques respectivement du fuel et de l'oxygène,

$$*\alpha = \frac{(T_2 - T_1)}{T_2} \quad (\text{IV.78})$$

$$*\beta_1 = \alpha \frac{T_a}{T_2} \quad T_a \text{ est la température d'activation.} \quad (\text{IV.79})$$

CHAPITRE V

Résultats et discussions

Le programme de calcul décrit précédemment a été utilisé pour la résolution d'équations non linéaires régissant un écoulement de fluide réactif incompressible en équilibre chimique par la méthode de Newton-Raphson en utilisant la technique d'élimination de Gauss pour la résolution du système obtenu.

Avec ce travail, nous pouvons étudier presque tous les hydrocarbures de forme (C_xH_y) , il suffit d'avoir la composition moléculaire de l'hydrocarbure, sa densité et son enthalpie libre, aussi cette peut être étendu aux hydrocarbures de forme $C_xH_yO_z$, mais il faut rajouter les modèles chimiques des équations élémentaires de dissociation appropriés.

Pour notre cas, on admet que le modèle chimique de combustion C_xH_y -Air est composé de onze espèces, les exemples étudiés sont: le kérosène vapeur avec sa formule chimique $(C_{12}H_{23})$, le gasoil $(C_{14.4}H_{24.8})$ et le méthane (CH_4) .

On va présenter alors les résultats numériques et graphiques permettant d'analyser le phénomène de dissociation à haute température, en tenant compte des températures de préchauffage de l'air à l'entrée, de la composition du combustible, sa densité et son enthalpie de formation; en outre, on a utilisé des polynômes d'interpolation de "Sanford Gordon et Bonnie J. McBride" publié par la NASA en 1996, 2002 et mis à jour en 2004. De plus, nos résultats peuvent être comparés et validés par d'autres travaux récemment publiés.

A l'équilibre chimique :

1. L'effet de la température d'entrée d'air sur la température adiabatique de la flamme pour la combustion du gasoil et du Kérosène pour différentes richesses.

Les Fig.VI.1 et Fig.VI.2 montrent que des économies de combustible substantielles soient réalisées en utilisant des récupérateurs pour renvoyer une partie de l'énergie gagnée, ce rôle est joué par les régulateurs numériques à boucle fermée utilisés dans les installations thermiques modernes, ainsi les moteurs d'automobile et dans les moteurs aéronautiques, puisque la température maximale augmentera en raison de préchauffage. Donc, comme exemple, avec de l'air entrant à 600 K, la température adiabatique de flamme augmente de 250 (°K) au-dessus du cas de l'air à 300°K [1], [3],[31]. Autrement dit, si on fait un préchauffage de l'air de 300°k pour une richesse de 0.7, on aura un gain de température de combustion de près de 250°k, qui peut être obtenue avec une richesse supérieure de près de 0.9 ce qui a comme conséquence une perte d'énergie sous forme de combustible.

Résultat:

Alors, comme résultats important: le préchauffage de l'air est indispensable pour minimiser la consommation du combustible et augmenter les performances de combustion.

2. Effet de la richesse Φ sur la température adiabatique de flamme pour la combustion de méthane

La Fig.VI.3 et Fig.VI.4 présentent l'évolution de la température adiabatique de la flamme en fonction de la richesse pour différentes températures de préchauffage; il est intéressant pour noter que la température maximum est près de 2420 K de la flamme se produit à la stœchiométrie (richesse $\Phi=1$). Également la température de flamme diminue lorsque ϕ dépasse l'unité; la diminution de la température de flamme est dominée par l'augmentation en nombre de moles des produits formées par mole du carburant brûlé [7],[12]. De plus la diminution de la température de combustion est causée par le phénomène de dissociation de molécule et des espèces chimiques causé par la haute température. Ce phénomène créé par des réactions élémentaires qui la nature endothermique provoquant la diminution de la température de combustion.

Résultat:

D'après les deux figures précédentes, on remarque qu'on a deux zones de combustion, une zone pauvre de richesse inférieure à l'unité et une zone riche où la richesse est supérieure à l'unité, et pour minimiser la consommation de combustible on peut trouver des richesses inférieures à l'unité qui donnent les mêmes températures à richesse supérieure à l'unité. On remarque aussi qu'on a presque les mêmes allures des deux figures comparées à la référence [2]. On note que les Fig.VI.3 et Fig.VI.4 sont obtenus par l'utilisation des polynômes de (Gordon-Mcbride) publié par la NASA respectivement en 2004 pour la première, et 1996 pour la deuxième.

3. Effet de la richesse Φ sur l'évolution de la composition molaire des produits de combustion Kérosène-Air

La fig.VI.5 Montre l'évolution des produits de combustion (CO_2 , CO , H_2O , H_2 , H , OH , O_2 , O , NO , N_2 , et N) en fonction de la richesse. Les produits principaux de la combustion pauvre sont H_2O , CO_2 , O_2 , et N_2 ; tandis que pour la combustion riche, H_2O , CO_2 , CO , H_2 , et N_2 sont en plus. En outre, nous voyons, en raison de la dissociation, la présence simultanée

de l'O₂, le CO, et le H₂ aux états stœchiométriques; Ainsi, nous exposons la nature approximative de l'hypothèse «combustion complète ». Certaines espèces mineures de la combustion équilibrée du Kérosène avec de l'air est montré sur la fig.VI.6. De même pour la combustion du Gasoil avec de l'air représentée sur la fig.VI.7. Donc, en remarquant sur les figures une légère diminution du N₂ et l'apparition du NO et N avec un faible taux, de plus, on remarque l'augmentation simultanée du CO₂ et H₂O en fonction de la richesse comme principaux produits de la combustion et une consommation du O₂ qui joue le rôle de l'oxydant, la diminution du O₂ est moins rapide dans la zone de richesse inférieure à l'unité, c'est-à-dire dans la zone pauvre de combustion où on a une quantité insuffisante de combustible qui ne peut consommer tout l'oxygène (O₂) disponible, par contre dans la zone riche en combustible où la richesse est supérieure de l'unité, la consommation du O₂ est très rapide et presque complète, ce qui permet l'apparition d'autres espèces chimiques dû au phénomène de dissociation des molécules. Parmi ces produits qui apparaissent, on trouve le monoxyde de carbone (CO) et le monoxyde du nitrogène (NO) qui représentent les principaux polluants. Alors, il est clair que le taux de production du CO est faible dans la zone pauvre et il devient très important dans la zone riche, ce qui permet de conclure:

Afin de diminuer la pollution et les polluants il est préférable d'avoir une combustion pauvre.

4. Effet de la température de préchauffage sur la production des polluants pour différentes richesses.

D'après les Figures (VI.8, VI.9 et VI.10) il est clair que la température de préchauffage joue un rôle important dans le contrôle des polluants, cette technique est très utilisée par les constructeurs des turbomachines et des installations thermiques industrielles afin de diminuer les polluants comme le CO, NO et le CO₂ et augmente les performances de la combustion avec moins de consommation de combustible.

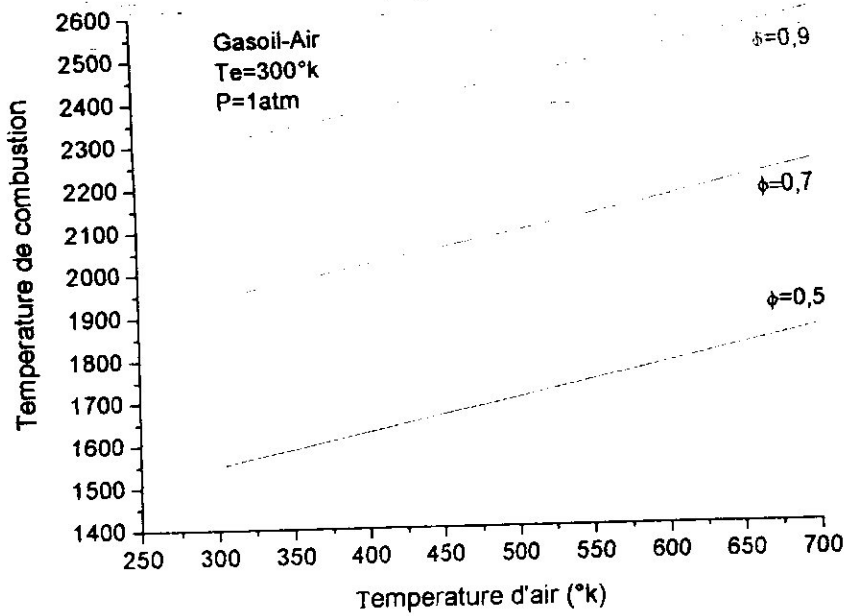


Fig.V.1 Evolution de la température de combustion du Gasoil avec de l'air en fonction de la température de préchauffage pour différentes richesses.

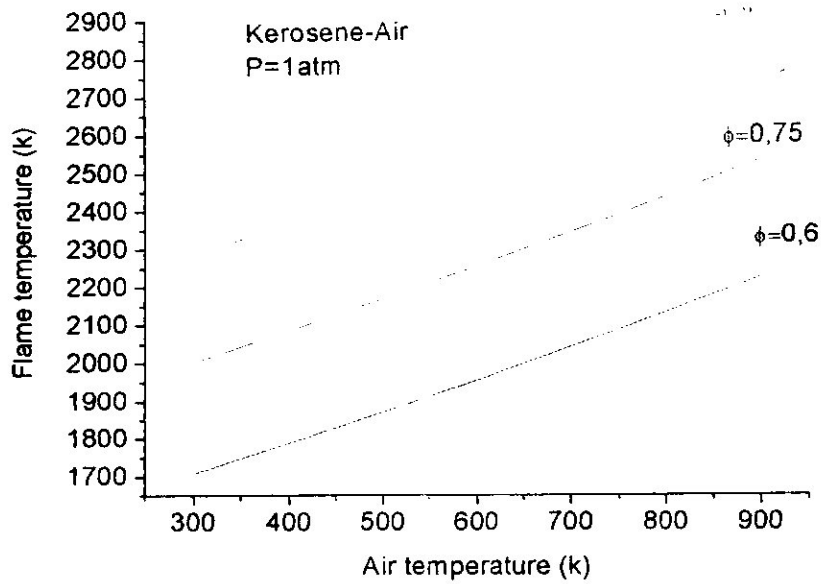


Fig.V.2 Evolution de la température de combustion du Kerosene avec de l'air en fonction de la température de préchauffage pour différentes richesses.

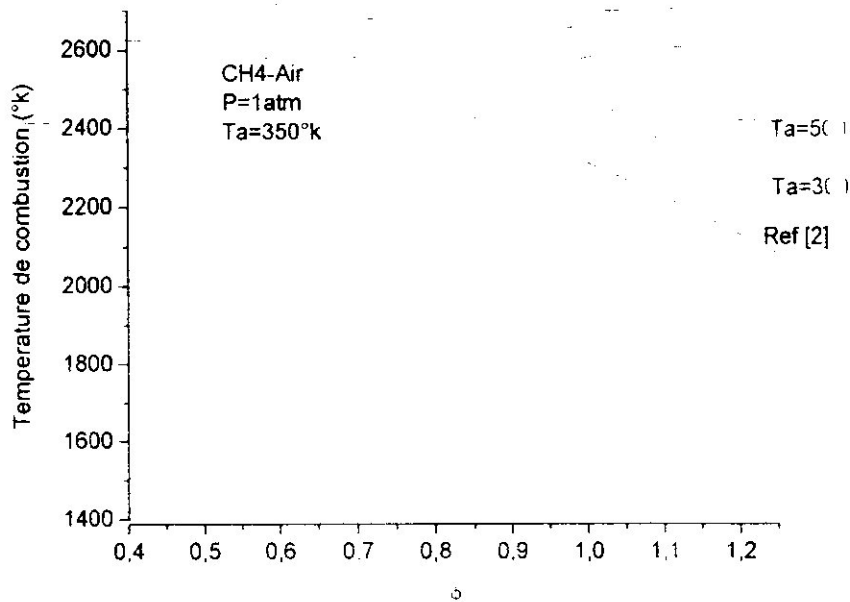


Fig.V.3 Evolution de la température de combustion en fonction de la richesse se[2]

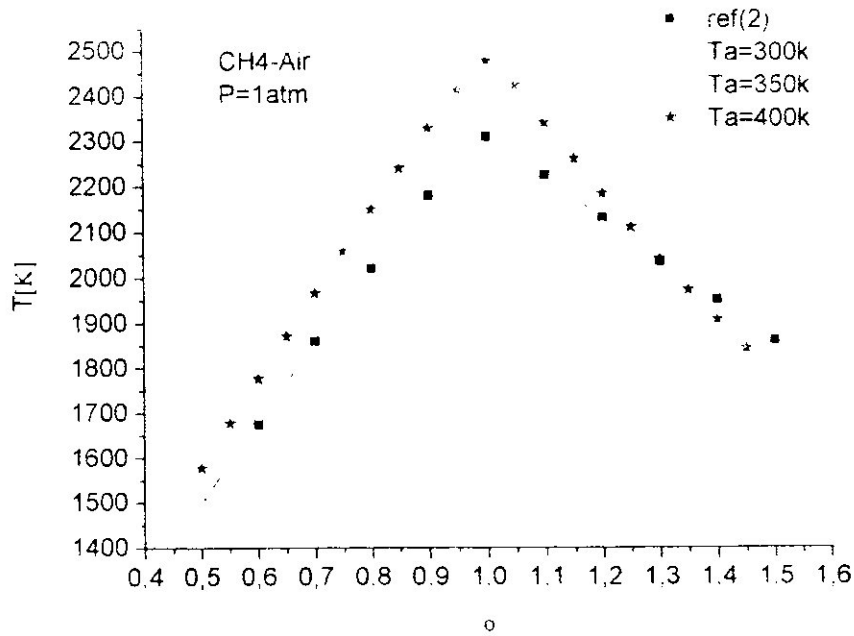


Fig.V.4 Evolution de la température de combustion en fonction de la richesse :[1]

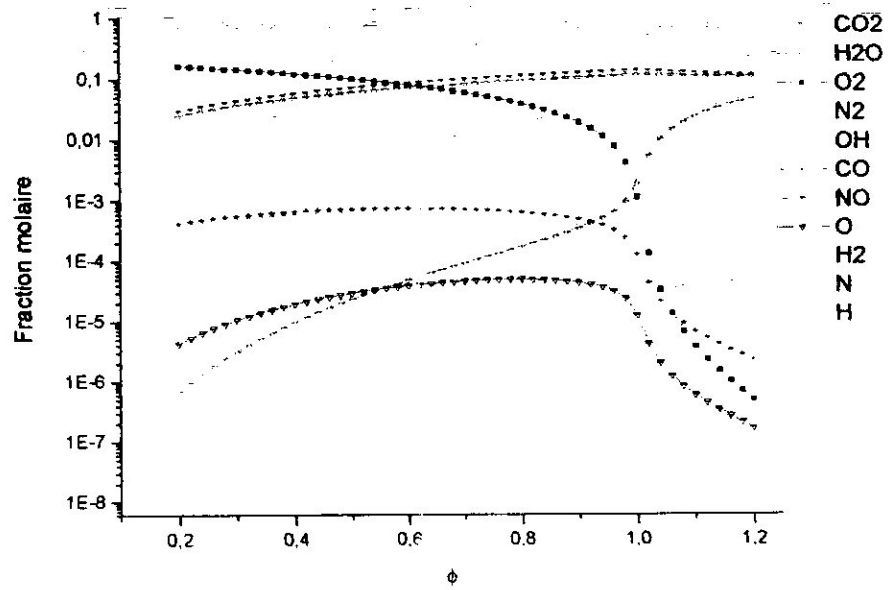


Fig.V.5. Variation des différentes espèces en fonction de la richesse pour la combustion (Kérosène- Air).

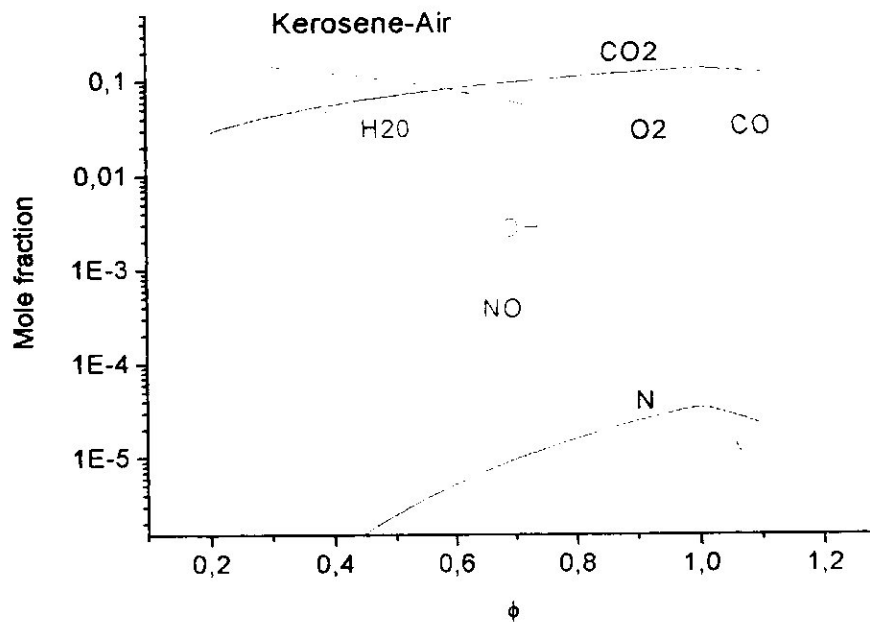


Fig.V.6. Variation des principales espèces en fonction de la richesse pour la combustion (Kérosène- Air).

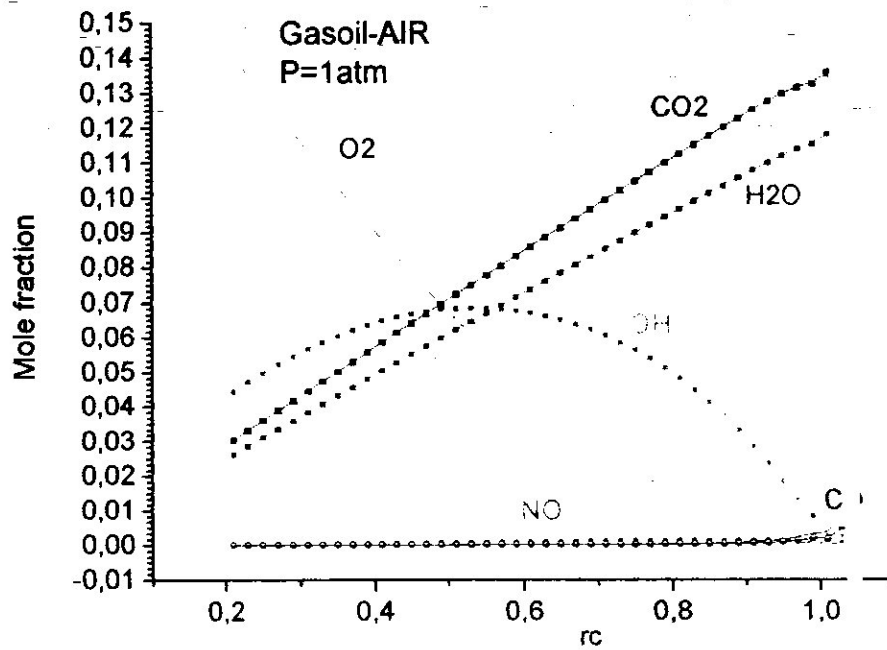


Fig.V.7. Variation de principales espèces en fonction de la richesse pour la combustion (gasoil- Air).

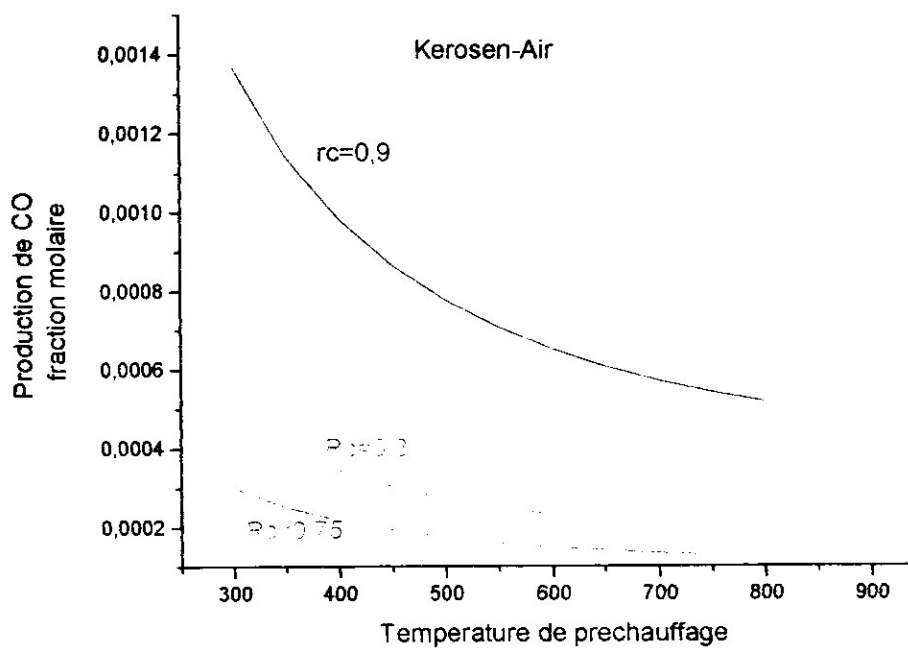


Fig.V.8 Evolution du monoxyde de carbone (CO) en fonction de la température de préchauffage pour différente richesse

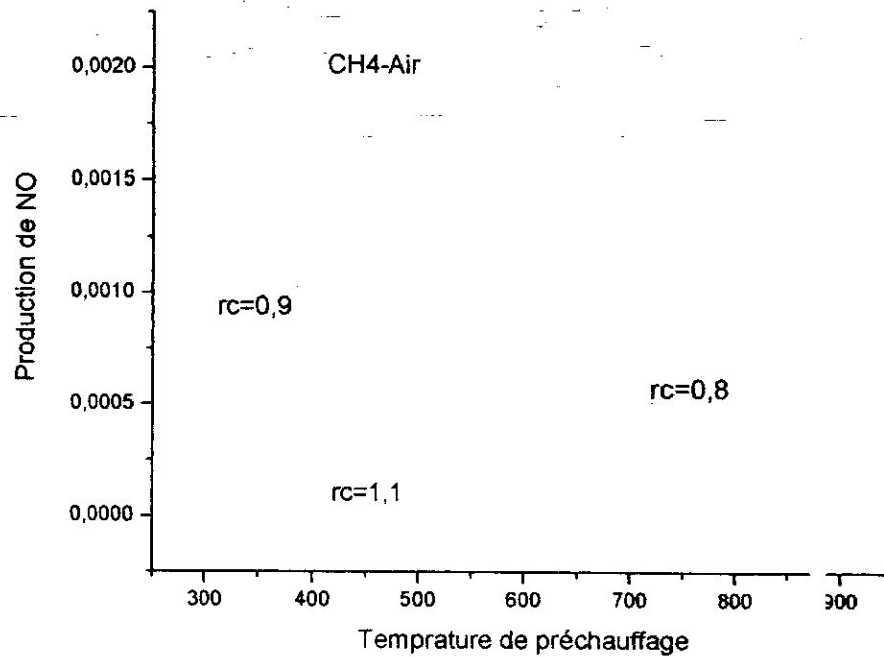


Fig.V.9 Evolution du (NO) en fonction de la température de préchauffage pour différente richesse

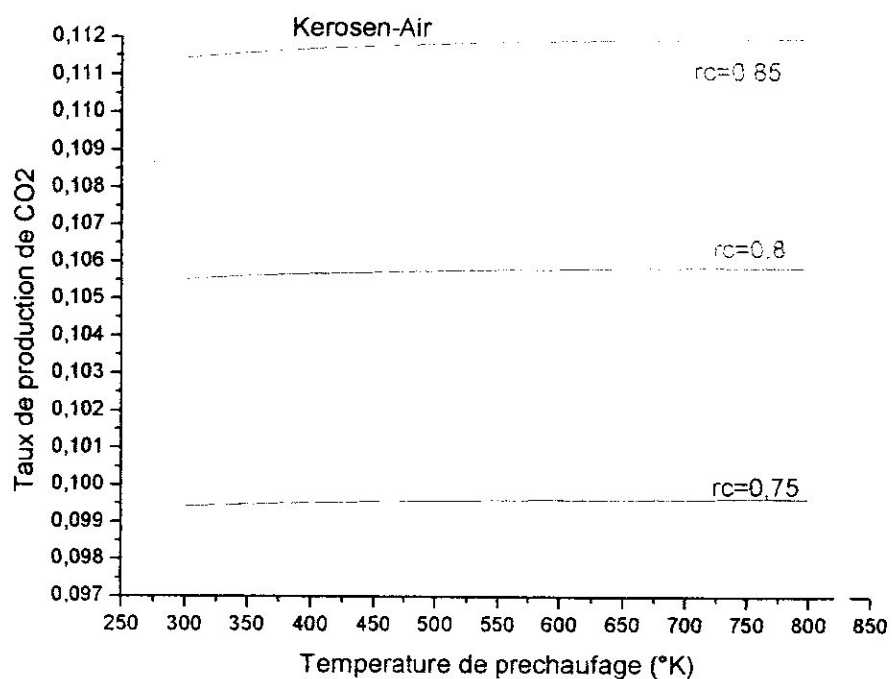


Fig.V.10 Evolution du bioxyde de carbone (CO2) en fonction de la température de préchauffage pour différente richesse

Hors équilibre chimique :

5. Variation de température du gaz en fonction de la plage de réaction :

Les figures (V.11,V.12,V.13) nous montrent que la plage de réaction est composée de trois zones principales :

La zone I (avant réaction) : ou le carburant et le comburant se mélangent dans un écoulement d'une vitesse convenable (injection), dans cette zone, la température est constante car le milieu ne subit aucune transformation de son état thermique.[18],[17]

La zone II : la température fait un saut d'environ 1500 K dans une très courte distance. Au premier lieu l'augmentation de température est due aux phénomènes de conductivité thermique : les gaz brûlés génèrent un flux de chaleur qui se déplace vers les gaz frais. Juste après, la combustion se déroule dans une petite plage, et on aura un énorme dégagement de chaleur qui fait augmenter la température jusqu'à atteindre son maximum .

La zone III : c'est la zone d'équilibre (état finale de la combustion), dans un système adiabatique, la température ne varie pas, elle sera fixe et égale à sa valeur maximale.[14]

5.1. Effet du coefficient de conductivité thermique sur la variation de température :

On remarque sur la figure(V.11) que dans la zone II, le saut de température est plus brusque pour une valeur de λ supérieur, ce qui signifie que la température évolue plus rapidement dans les milieux de grande conductivité thermique.

Dans la zone I et III, la température est la même pour les deux valeurs de λ , donc la conductivité thermique n'a pas d'influence sur les gaz se situant loin de la zone de réaction (avant la réaction et après atteindre l'équilibre chimique).

5.2. Effet de la température de préchauffage sur la variation de température :

Dans la zone I, la température de préchauffage est imposée sur le mélange, et c'est cette température qui domine le milieu (pas de réaction ni transfert thermique), d'où la raison d'avoir T près de T de préchauffage.

Dans la zone II, les trois températures augmentent et convergent vers une même valeur T_{ad} , c'est le début de la zone III.

Mais en réalité, pour des températures d'entrée différentes, on aura des températures finales différentes, comme on le voit sur la figure (V.1) où la variation de l'une des températures en fonction de l'autre est linéaire, la droite représentative a une pente différente de zéro.

5.3. Effet de la richesse sur la variation de température :

La figure (V.13) nous montre que la richesse n'influe pas sur le mélange dans la première zone, car la variation de ϕ veut dire variation de quantité de matière, donc le mélange ne subit aucun effet thermique, et la température reste constante.

Par contre, la richesse influe sur la réaction de combustion, donc sur la température finale de combustion, et on a vu à l'équilibre chimique que la température maximale est atteinte à $\phi=1$, mais en réalité on arrive à T_{max} pour une richesse qui dépasse légèrement l'unité.

6. Variations de la fraction massique du carburant et du comburant en fonction de la plage de réaction : figure(V.14)

Les réactifs subissent les mêmes variations dans toute la plage de réaction :

L'état des réactifs dans la zone I est caractérisé par une stabilité relative car il n'y a pas de variations quantitatives des espèces.

La diminution simultanée de l'oxydant et du combustible est justifiée par la manifestation des deux partis dans la réaction. Et à la stoechiométrie, on arrive à un point où les deux corps sont introuvables.

7. Variations du taux de réaction le long de la plage de réaction : figure (V.14)

On a chaque réaction chimique est caractérisé par son taux de production, donc lorsque le taux prend des valeurs non nulles veut dire que la réaction se déroule, et cela arrive dans un intervalle bien déterminé.

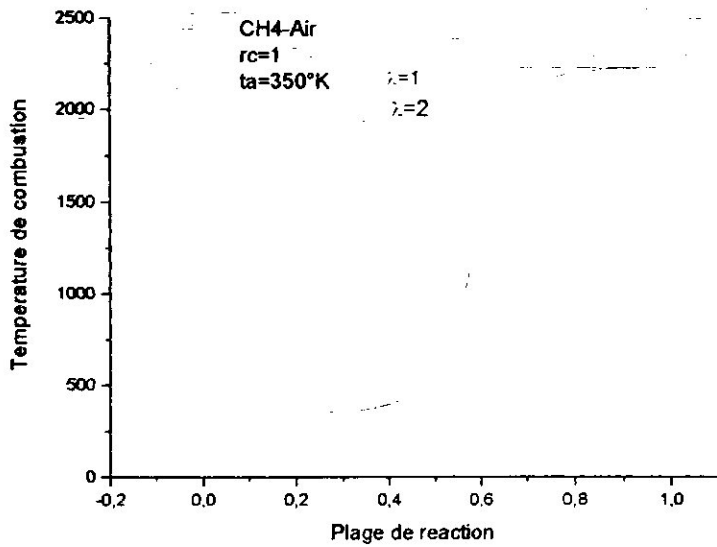


Fig.V.11 Variation de température du gaz en fonction de la plage de réaction
Pour différents λ (coef de cond)

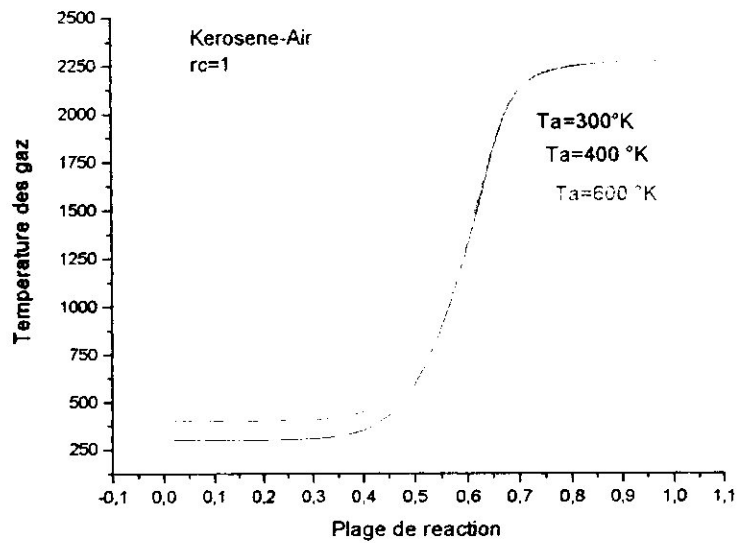


Fig.V.12 Variation de température du gaz en fonction de la plage de réaction
Pour différentes températures de préchauffage

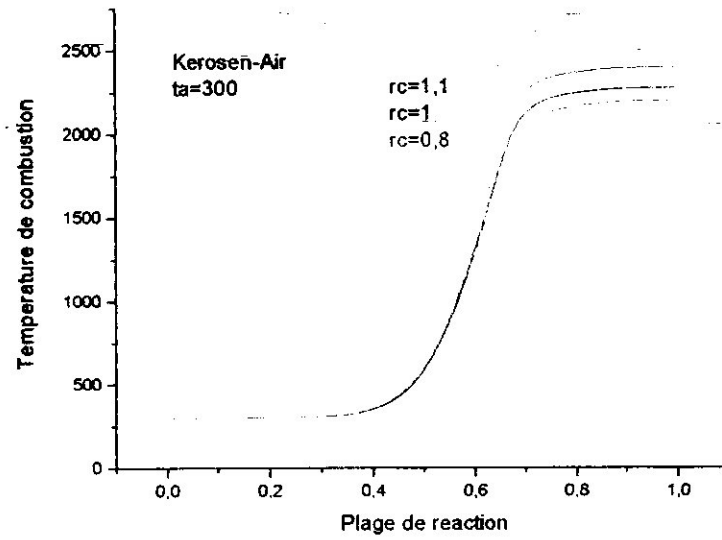
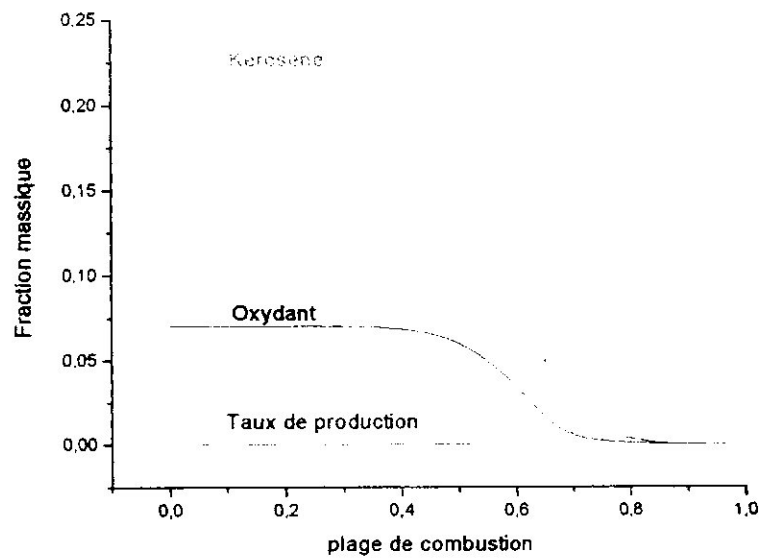


Fig.V.13 Variation de température du gaz en fonction de la plage de réaction
 Pour différentes richesses.



V.14. Variations du carburant et du comburant et le taux de réaction en fonction de la
 plage de réaction

Conclusion et perspectives

Ce travail est une contribution dans l'étude de la flamme laminaire à l'équilibre chimique et à l'hors équilibre avec le contrôle de la température et des polluants

parmi les conclusion tirée: pour minimiser les polluants a savoir le CO_2 et le CO et diminuer la consommation du fuel, il faut que la combustion soit pauvre, donc, la richesse du carburant soit inférieure a l'unité, et pour améliorer les conditions de combustion, le préchauffage du fuel compense l'effet de diminution de la température de la flamme, par exemple, la température maximale augmentera en raison de préchauffage avec $250^\circ k$ pour une augmentation de la température d'entrée d'air de $300^\circ k$ à $600^\circ k$; Egalement la température de la flamme diminue plus rapidement avec le $\phi \geq 1$ Fig.(V.3 & V.4); la diminution de la température de flamme est dominée par l'augmentation en nombre des produits pour une combustion riche. En outre, la diminution de la température de flamme en raison des réactions élémentaire de la dissociation puisque ces réactions sont endothermiques, donc, nous pouvons trouver les valeurs de la richesse inférieures à l'unité, qui donnent les températures de combustion semblables à une combustion riche [2], [9]. L'autre résultat important est que les produits principaux de la combustion pauvre sont H_2O , CO_2 , O_2 , et N_2 ; tandis que pour la combustion riche, ils sont 11 espèces H_2O , CO_2 , CO , H_2 , et N_2 , donc plus de polluant dans la combustion riche.

A l'issue de cette première approche basé sur l'équilibre chimique, une deuxième partie en hors équilibre chimique est traité par la suite, la stratégie numérique de résolution utilisée consiste à discrétiser les équations du Bilan réduit complétées par les équations cinétiques par la technique de différence finis du premier ordre dans l'espace. Le calcul s'arrête lorsque l'équilibre est atteint, c'est-à-dire qu'il n'y a plus de production chimique, la température du mélange dans ce cas ne varie plus, les quantités du combustible et de l'oxydant seront complètement consommés et le taux de production revient a sa valeur initiale avant la combustion, cela est clairement présenté dans nos résultats qui peuvent être justifier et comparé avec d'autre travaux scientifiques récemment publiés.

Et comme perspectives, ce travail peut être étendu à de nombreux travaux scientifiques, en calculant tous les paramètres qui contrôlent et modélisent la flamme laminaire de prémélange et allant à la modélisation de la flamme turbulente.

Finalement, je note qu'une partie de ce travail a été l'objet de deux conférences, l'une nationale « Contrôle des paramètres de combustion d'une flamme laminaire prémélangée à l'équilibre chimique par l'analyse des produits » et l'autre internationale.

ANNEXES

Annexes

Annexe A : les constantes de GORDON_MC BRIDE utilisés pour le calcul de l'enthalpie et l'entropie :

Annexe A1 : utilisation des 7 coefficients [1] :

Pour ces coefficients, les relations utilisées pour le calcul de la capacité calorifique C_p , l'enthalpie H , et l'entropie S , sont : [1]

$$C_p(T) = (\alpha_1 + \alpha_2 \times T + \alpha_3 \times T^2 + \alpha_4 \times T^3 + \alpha_5 \times T^4) \times R$$

$$H(T) = \int C_p(T) dt \quad \text{donc :}$$

$$H(T) = \left[\alpha_1 + \left(\frac{\alpha_2}{2} \right) \times T + \left(\frac{\alpha_3}{3} \right) \times T^2 + \left(\frac{\alpha_4}{4} \right) \times T^3 + \left(\frac{\alpha_5}{5} \right) \times T^4 + \frac{C}{T} \right] \times R \times T$$

$$S(T) = \left[\alpha_1 \times \ln(T) + \alpha_2 \times T + \left(\frac{\alpha_3}{2} \right) \times T^2 + \left(\frac{\alpha_4}{3} \right) \times T^3 + \left(\frac{\alpha_5}{4} \right) \times T^4 + \alpha_7 \right] \times R$$

Pour $300 < T < 1000$: on prend $\alpha_i = a_i'$

Pour $1000 < T < 5000$: on prend $\alpha_i = a_i$

**Tableau 1 : données thermodynamiques : les constantes de GORDON MC BRIDE pour les produits de combustion
(LES PRODUITS DE BASE)**

T	CO ₂	H ₂ O	O ₂	N ₂
300<T<1000	a'1	0.02275724e+02	0.03386842e+02	0.03298677e+02
	a'2	0.09922072e-01	0.03474982e-01	0.14082404e-02
	a'3	-0.10409113e-05	-0.06354696e-04	-0.03963222e-04
	a'4	0.06866686e-07	0.06968581e-07	0.05641515e-09
	a'5	-0.02117280e-10	-0.02506588e-10	-0.024448541e-10
	a'6	-0.04837314 e+06	-0.0302 0811e+06	-0.102 08999e+04
	a'7	0.10188488e+02	0.02 590232e+02	0.039503 72e+02
1000<T<5000	a1	0.04453623e+02	0.0267214 5e+02	0.02926640e+02
	a2	0.03140168e-01	0.03056293e-01	0.14879768e-02
	a3	-0.12784105e-05	-0.08730260e-05	-0.05684760e-05
	a4	0.02393996e-08	0.12009964e-09	0.10097038e-09
	a5	-0.16690333e-13	-0.06391618e-13	-0.06753351e-13
	a6	-0.04896696e+06	-0.02989921e+06	-0.09227977e+04
	a7	-0.095 53959e+01	0.06862 817e+02	0.05980528e+02

**Tableau 2 : données thermodynamiques : les constantes de GORDON MC BRIDE pour les produits de combustion
(LES PRODUITS DE DISSOCIATION)**

T	C _p	NO	OH	CO	H ₂	O	H	N
300 < T < 1000	a'1	0.03376541e+02	0.03637266e+02	0.03262451e+02	0.03298124e+02	0.02946428e+02	0.02500000e+02	0.02503071e+02
	a'2	0.12530634e-02	0.01850910e-02	0.15119409e-02	0.08249441e-02	-0.16381665e-02	0.00000000e+00	-0.02180018e-03
	a'3	-0.03302750e-04	-0.16761646e-05	-0.03881755e-04	-0.08143015e-05	0.02421031e-04	0.00000000e+00	0.05420529e-06
	a'4	0.05217810e-07	0.02387202e-07	0.05581944e-07	0.09475434e-09	-0.16028431e-08	0.00000000e+00	-0.05647560e-09
	a'5	-0.02446262e-10	-0.08431442e-11	-0.02474951e-10	0.04134 872e-11	0.03890696e-11	0.00000000e+00	0.02099904e-12
	a'6	0.09817961e+05	0.03606781e+05	-0.14310539e+05	-0.10125209e+04	0.02914764e+06	0.02547162e+06	0.05609890e+06
	a'7	0.05829590e+02	0.13588605e+01	0.04848897e+02	-0.03294094e+02	0.02963995e+02	-0.04601176e+01	0.04167566e+02
1000 < T < 5000	a1	0.03245435e+02	0.02882 730e+02	0.0302 5078e+02	0.02991423e+02	0.02542059e+02	0.02500000e+02	0.02450268e+02
	a2	0.12691383e-02	0.10139743e-02	0.14426885e-02	0.07000644e-02	-0.02755061e-03	0.00000000e+00	0.10661458e-03
	a3	-0.05015890e-05	-0.02227687e-05	-0.05630827e-05	-0.05633828e-06	-0.03102803e-07	0.00000000e+00	-0.07465337e-06
	a4	0.09169283e-09	0.02174683e-09	0.10185813e-09	-0.09231578e-10	0.04551067e-10	0.00000000e+00	0.01879652e-09
	a5	-0.06275419e-13	-0.05126305e-14	-0.06910951e-13	0.15827519e-14	-0.04368051e-14	0.00000000e+00	-0.10259839e-14
	a6	0.09800840e+05	0.03886888e+05	-0.14268350e-05	-0.08350340e-04	0.02923080e+06	0.02 547162e+06	0.05611604e+06
	a7	0.06417293e+02	0.05595712e+02	0.06108217e+02	-0.13551101e+01	0.049920308e+02	-0.04601176e+01	0.04448758e+02

ANNEXE A.2 : utilisation des constantes de GORDON _ MC BRIDE publiés en 2002 par NAZA [2]

On peut aussi utiliser d'autres formulations pour les grandeurs : Cp, H, S.[2]

$$Cp(T) = (a_1.T^{-2} + a_2.T^{-1} + a_3 + a_4.T + a_5.T^2 + a_6.T^3 + a_7.T^4).R \quad (1)$$

$$H(T) = (-a_1.T^{-2} + \frac{a_2 \ln T}{T} + a_3 + \frac{a_4.T}{2} + \frac{a_5.T^2}{3} + \frac{a_6.T^3}{4} + \frac{a_7.T^4}{5} + \frac{b_1}{T}).R.T \quad (2)$$

$$S(T) = (-a_1 \cdot \frac{T^{-2}}{2} - a_2.T^{-1} + a_3 \cdot \ln T + a_4.T + a_5 \cdot \frac{T^2}{2} + a_6 \cdot \frac{T^3}{3} + a_7 \cdot \frac{T^4}{4} + b_2).R \quad (3)$$

En utilisant des nouveaux coefficients (a_i) et des constantes d'intégration (b₁, b₂), qui sont donnés sous un format spécifique relié au langage FORTRAN.

Ce format est mentionné dans le tableau suivant :

Tableau 1 :le format FORTRAN utilisé pour les nouvelles données

Lignes	Contenu	Format FORTRAN	colonnes
1	Nom de l'espèce ou sa formule	A16	1 à 16
	Commentaires et source de données	A62	19 à 80
2	Nombre d'intervalles de température	I2	1 à 2
	Code de référence_date	A6	4 à 9
	Formule chimique (symbole) et numéro	5(A2 ,F6.2)	11 à 50
	Zéro pour les gaz et non zéro pour les condensées	I2	51 à 52
	Masse moléculaire	F13.7	53 à 65
	Chaleur de formation à 298.15K, j/mol	F15.5	66 à 80
3	Intervalle de température	2F11.3	1 à 22
	Nombre de coefficients pour Cp (toujours sept)	I1	3
	Les exposants de T dans l'équation empirique de Cp (toujours -2,-1, 0, 1, 2, 3,4, regardez (1))	8F5.1	24 à 63
	H°(298.15)-H°(0) j/mol	F15.3	66 à 80
4	Les cinq premiers coefficients pour Cp, équation (1)	5D16.9	1 à 80
5	Les deux derniers coefficients pour Cp ,équation (1)	2D16.9	1 à 32
	Les constantes d'intégration b ₁ et b ₂ , équations (2) et (3)	2D16.9	49 à 80
-----	Répéter 3, 4, et 5 pour chaque intervalle de température	-----	-----

Les codes du référence _ date :

Il y a sept :

Tableau 2 : signification des codes référence _ date

Letres	référence	Suivi de
g	Différentes références	Mois /année de tableau
j	NIST-JANAF thermochemical tables. Chase, 1998	Mois /année de tableau
tpis	Thermodynamic Properties of Individual Substances. Gurvich, 1978, 1982, 1989, 1991,1996	Année du volume
n	TRC Thermodynamic Tables, NIST	Mois /année de tableau
bar	Barin: Thermochemical Data of Year Pure Substances. Barin,1989	Année du volume
coda	CODATA Key Values for Thermodynamics. Cox,1989	Année du volume
srd	Standard Reference Data	Année de J. Phys. Chem. Ref. Data journal

Annexes

H2 Ref-Elm. Gurvich, 1978 pt1 p103 pt2 p31.

3 tps78 H	2.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0	2.0158800	0.000		
200.000	1000.0007	-2.0	-1.0	0.0	1.0	2.0	3.0	4.0	0.0	8468.102
4.078323210D+04-8.009186040D+02	8.214702010D+00-1.269714457D-02	1.53605076D-05								
-1.202860270D-08	3.368093490D-12						2.682484665D+03-3.	43788844D+01		
1000.000	6000.0007	-2.0	-1.0	0.0	1.0	2.0	3.0	4.0	0.0	8468.102
5.608128010D+05-8.371504740D+02	2.975364532D+00	1.252249124D-03-3.	40716190D-07							
5.936625200D-11-3.606994100D-15		5.339824410D+03-2.	02774769D+00							
6000.000	20000.0007	-2.0	-1.0	0.0	1.0	2.0	3.0	4.0	0.0	8468.102
4.966884120D+08-3.147547149D+05	7.984121880D+01-8.414789210D-03	4.53248350D-07								
-1.371873492D-11	1.605461756D-16						2.488433516D+06-6.	95728110D+02		

H2O Hf:Cox, 1989. Woolley, 1987. TRC(10/88) tuv25.

2 g 8/89 H	2.000	1.00	0.00	0.00	0.00	0	18.0152800	-241826.000		
200.000	1000.0007	-2.0	-1.0	0.0	1.0	2.0	3.0	4.0	0.0	9904.092
-3.947960830D+04	5.755731020D+02	9.317826530D-01	7.222712860D-03-7.	342557370D-06						
4.955043490D-09-1.336933246D-12							-3.303974310D+04	1.724205775D+01		
1000.000	6000.0007	-2.0	-1.0	0.0	1.0	2.0	3.0	4.0	0.0	9904.092
1.034972096D+06-2.412698562D+03	4.646110780D+00	2.291998307D-03-6.	336830480D-07							
9.426468930D-11-4.822380530D-15							-1.384286509D+04-7.	978148510D+00		

N Hf:Cox, 1989. Moore, 1975. Gordon, 1999.

3 g 5/97 N	1.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0	14.0067000	472680.000		
200.000	1000.0007	-2.0	-1.0	0.0	1.0	2.0	3.0	4.0	0.0	6197.428
0.000000000D+00	0.000000000D+00	2.500000000D+00	0.000000000D+00	0	000000000D+00					
0.000000000D+00	0.000000000D+00						5.610463780D+04	4	193905036D+00	
1000.000	6000.0007	-2.0	-1.0	0.0	1.0	2.0	3.0	4.0	0.0	6197.428
8.876501380D+04-1.071231500D+02	2.362188287D+00	2.916720081D-04-1	729515100D-07							
4.012657880D-11-2.677227571D-15		5.697351330D+04	4	865231506D+00						
6000.000	20000.0007	-2.0	-1.0	0.0	1.0	2.0	3.0	4.0	0.0	6197.428
5.475181050D+08-3.107574980D+05	6.916782740D+01-6.847988130D-03	3	827572400D-07							
-1.098367709D-11	1.277986024D-16						2.550585618D+06-5	848769753D+02		

Annexes

NO. Gurvich, 1978, 1989 pt1 p326 pt2 p203.

3 tpis89 N	1.000	1.00	0.00	0.00	0.00	0	30.0061000	91271.310		
200.000	1000.0007	-2.0	-1.0	0.0	1.0	2.0	3.0	4.0	0.0	9179.110
-1.143916503D+04	1.536467592D+02	3.431468730D+00	-2.668592368D-03	8.431399120D-06						
-7.685111050D-09	2.386797655D-12						9.098214410D+03	6.728725490D+00		
1000.000	6000.0007	-2.0	-1.0	0.0	1.0	2.0	3.0	4.0	0.0	9179.110
2.239018716D+05	-1.289651623D+03	5.433936030D+00	-3.656034900D-04	9.830966450D-08						
-1.416076856D-11	9.380184620D-16						1.750317656D+04	-8.501669090D+00		
6000.000	20000.0007	-2.0	-1.0	0.0	1.0	2.0	3.0	4.0	0.0	9179.110
-9.575303540D+08	5.912434480D+05	-1.384566826D+02	1.694339403D-02	-1.007351096D-06						
2.912584076D-11	-3.295109350D-16						-4.677501240D+06	1.142081216D+03		

N2 Ref-Elm. Gurvich, 1978 pt1 p280 pt2 p207.

3 tpis78 N	2.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0	28.0134000	0.000		
200.000	1000.0007	-2.0	-1.0	0.0	1.0	2.0	3.0	4.0	0.0	8670.104
2.210371497D+04	-3.818461820D+02	6.082738360D+00	-8.530914410D-03	1.84646189D-05						
-9.625793620D-09	2.519705809D-12						7.108460860D+02	-1.76003744D+01		
1000.000	6000.0007	-2.0	-1.0	0.0	1.0	2.0	3.0	4.0	0.0	8670.104
5.877124060D+05	-2.239249073D+03	6.066949220D+00	-6.139685500D-04	1.91806679D-07						
-1.923105485D-11	1.061954386D-15						1.283210415D+04	-1.86640027D+01		
6000.000	20000.0007	-2.0	-1.0	0.0	1.0	2.0	3.0	4.0	0.0	8670.104
8.310139160D+08	-6.420733540D+05	2.020264635D+02	-3.065092046D-02	2.86903333D-06						
-9.705954110D-11	1.437538881D-15						4.938707040D+06	-1.172099740D+03		

O D0(O2):Brix, 1954. Moore, 1976. Gordon, 1999.

3 g 5/97 O	1.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0	15.9994000	249175.003		
200.000	1000.0007	-2.0	-1.0	0.0	1.0	2.0	3.0	4.0	0.0	6725.403
-7.953611300D+03	1.607177787D+02	1.966226438D+00	1.013670310D-03	-1.110415423D-06						
6.517507500D-10	-1.584779251D-13						2.840362437D+04	8.404241820D+00		
1000.000	6000.0007	-2.0	-1.0	0.0	1.0	2.0	3.0	4.0	0.0	6725.403
2.619020262D+05	-7.298722030D+02	3.317177270D+00	-4.281334360D-04	1.036104594D-07						
-9.438304330D-12	2.725038297D-16						3.392428060D+04	-6.679585350D-01		
6000.000	20000.0007	-2.0	-1.0	0.0	1.0	2.0	3.0	4.0	0.0	6725.403
1.779004264D+08	-1.082328257D+05	2.810778365D+01	-2.975232262D-03	1.854997534D-07						
-5.796231540D-12	7.191720164D-17						8.890942630D+05	-2.181728151D+02		

Annexes

OH D0(H-OH): Ruscic, 2002. Gurvich, 1978 pt1 p110 pt2 p37

3 g 4/02 O	1.00H	1.00	0.00	0.00	0.00	0	17.0073400	37278.206
200.000	1000.0007	-2.0	-1.0	0.0	1.0	2.0	3.0 4.0 0.0	8813.106
-1.998858990D+03	9.300136160D+01	3.050854229D+00	1.529529288D-03	-3.167890998D-06				
3.315446180D-09	-1.138762683D-12		2.991214235D+03	4.674110790D+00				
1000.000	6000.0007	-2.0	-1.0	0.0	1.0	2.0	3.0 4.0 0.0	8813.106
1.017393379D+06	-2.509957276D+03	5.116547860D+00	1.305299930D-04	-8.284322260D-08				
2.006475941D-11	-1.556993656D-15		2.019640206D+04	-1.101282337D+01				
6000.000	20000.0007	-2.0	-1.0	0.0	1.0	2.0	3.0 4.0 0.0	8813.106
2.847234193D+08	-1.859532612D+05	5.008240900D+01	-5.142374980D-03	2.875536589D-07				
-8.228817960D-12	9.567229020D-17		1.468393908D+06	-4.023555580D+02				

O2 Ref-Elm. Gurvich, 1989 pt1 p94 pt2 p9.

3 tpis89 O	2.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0	31.9988000	0.000
200.000	1000.0007	-2.0	-1.0	0.0	1.0	2.0	3.0 4.0 0.0	8680.104
-3.425563420D+04	4.847000970D+02	1.119010961D+00	4.293889240D-03	-6.836300520D-07				
-2.023372700D-09	1.039040018D-12		-3.391454870D+03	1.819699470D+01				
1000.000	6000.0007	-2.0	-1.0	0.0	1.0	2.0	3.0 4.0 0.0	8680.104
-1.037939022D+06	2.344830282D+03	1.819732036D+00	1.267847582D-03	-2.138067988D-07				
2.053719572D-11	-8.193467050D-16		-1.689010929D+04	1.738716506D+01				
6000.000	20000.0007	-2.0	-1.0	0.0	1.0	2.0	3.0 4.0 0.0	8680.104
4.975294300D+08	-2.866106874D+05	6.690352250D+01	-6.169959020D-03	3.016396027D-07				
-7.421416600D-12	7.278175770D-17		2.293554027D+06	-5.530621610D+02				

END PRODUCTS

Air Mole%: N2 78.084, O2 20.9476, Ar .9365, CO2 .0319. Gordor, 1982. Reac

2 g 9/95 N	1.56170	.41959AR	.00937C	.00032	.00000	0	28.9651159	-125.530
200.000	1000.0007	-2.0	-1.0	0.0	1.0	2.0	3.0 4.0 0.0	8649.264
1.009950160D+04	-1.968275610D+02	5.009155110D+00	-5.761013730D-03	1.066859930D-05				
-7.940297970D-09	2.185231910D-12		-1.767967310D+02	-3.021504225D+00				
1000.000	6000.0007	-2.0	-1.0	0.0	1.0	2.0	3.0 4.0 0.0	8649.264
2.415014430D+05	-1.257574600D+03	5.144558670D+00	-2.138541790D-04	7.065227840D-08				
-1.071483490D-11	6.577500150D-16		6.462263190D+03	-8.47411905D+00				

Annexes.

CH4 Gurvich,1991 pt1 p44 pt2 p36.
2 g 8/99 C 1.00H 4:00 0.00 0.00 0.00 0 16.0424600 -74600.000
200.000 1000.0007 -2.0 -1.0 0.0 1.0 2.0 3.0 4.0 0.0 10016.202
-1.766850998D+05 2.786181020D+03-1.202577850D+01 3.917619290D-02-3.19054430D-05
2.026853043D-08-4.976705490D-12 -2.331314360D+04 8.04322750D+01
1000.000 6000.0007 -2.0 -1.0 0.0 1.0 2.0 3.0 4.0 0.0 10016.202
3.730042760D+06-1.383501485D+04 2.049107091D+01-1.961974759D-03 4.27313040D-07
-3.728814690D-11 1.623737207D-15 7.532066910D+04-1.19124889D+02

C3H8 Hf:TRC(10/85) w1350. Chao,1973.
2 g 2/00 C 3.00H 8.00 0.00 0.00 0.00 0 44.0956200 -104680.000
200.000 1000.0007 -2.0 -1.0 0.0 1.0 2.0 3.0 4.0 0.0 14741.218
-2.433144337D+05 4.656270810D+03-2.939466091D+01 1.188952745D-01-1.76308269D-04
8.814823910D-08-2.342987994D-11 -3.540335270D+04 1.41749277D+02
1000.000 6000.0007 -2.0 -1.0 0.0 1.0 2.0 3.0 4.0 0.0 14741.218
6.420731680D+06-2.659791134D+04 4.534356840D+01-5.020663920D-03 9.71216940D-07
-9.575405230D-11 4.009672880D-15 1.455582459D+05-2.18374734D+02

C7H16,n-heptane TRC(10/85) tuv1460. TRC(10/84) ptuv1010.
2 n10/85 C 7.00H 16.00 0.00 0.00 0.00 0 100.2019400 -187780.000
200.000 1000.0007 -2.0 -1.0 0.0 1.0 2.0 3.0 4.0 0.0 33221.000
-6.127432890D+05 1.184085437D+04-7.487188600D+01 2.918466052D-01-3.116795490D-04
2.159285269D-07-5.655852730D-11 -8.013408940D+04 4.107213320D+02
1000.000 6000.0007 -2.0 -1.0 0.0 1.0 2.0 3.0 4.0 0.0 33221.000
9.135632470D+06-3.923319690D+04 7.889780850D+01-4.654251930D-03 2.071774142D-06
-3.442539300D-10 1.976834775D-14 2.050708295D+05-4.851104020D+02

Références bibliographiques

- [1] Stephen R. Turns, "An introduction to combustion, concepts and application", Propulsion engineering research center and department of mechanical engineering, the Pennsylvania state university, 1996
- [2] Bonnie J. McBride, Michael J. Zehe, and Sanford Gordon, "Nasa Glenn for calculating thermodynamic properties of individual species", Cleveland, Ohio, Nasa /Tp-2002-211256.
- [3] A. Van Tiggelin, J-C. Baclaceanu, "Oxydations et combustions T1", Institut Français du Pétrole, Paris 1968.
- [4] R. Borghi et M. Champion, « Modélisation et théorie des Flammes », Edition Technip Paris 2000.
- [5] R. Borghi, M. Destriau, « la combustion et les flammes », Edition Technip Paris 1975.
- [6] Jorge AMAYA, « Modélisation du Fonctionnement d'une Chambre de Combustion SNECMA : Vers une Etude des Instabilités de Combustion », Rapport de stage, école nationale supérieure de l'aéronautique et de l'espace, cerfacs, juillet 2006.
- [7] T. J. Poinso¹ and D. P. Veynante², « Combustion », article, ¹ Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse ² Laboratoire EM2C, Ecole Centrale de Paris, 2004.
- [8] Alexander Burcat, Branko Ruscic, "Third Millennium Ideal Gas and Condensed Phase Thermochemical Database for Combustion with Updates from Active Thermochemical Tables", article, Argonne National Laboratory is managed by The University of Chicago for the U. S. Department of Energy, September 2005.
- [9] Amal BOUAMOUL, "modélisation mathématique d'une flamme de diffusion méthane-air avec incision et en configuration contre courant", mémoire, université du Québec à Chicoutimi comme exigence partielle de la maîtrise en ingénierie, juin 2005.

[10] Stéphane Pascaud, « *Etude monphasique et diphasique des flammes laminaire monodimensionnelles* », rapport cerfacs CFD-Combustion, juin 2002 .

[11]Olivier HEUZE. « *Contribution au calcul des caractéristiques de détonation de substances explosives gazeuses ou condensés* ». Thèse de doctorat université de Poitiers, 1985.

[12] Matthieu Boileau, « *Simulation Numérique de la combustion phasique* », thèse DEA Ecole Doctorale Energétique et Dynamique des Fluides, cerfacs, Juillet 2003.

[13] JOSEPH David. « *Modélisation des transferts radiatifs en combustion par méthode aux ordonnées discrètes sur des maillages non structures tridimensionnels* », Thèse de doctorat, l'institut national polytechnique de Toulouse,Avril 2004.

[14] L. Gasnot . « *Modélisation de la cinétique chimique de combustion, flammes plates laminaires et prémélangées : codes de calcul chemkin ii / premix* »,septième école de combustion, Mont Saint Odile -Mai 2000.

[15] STAFFELBACH Gabriel, « *Calculs de flammes laminaires prémélangées* »,Thèse DEA , cerfacs, Juillet 2002.

[16] Caroline Saulnier,« *Analyse théorique et simulation numérique d'une flamme monodimensionnelle laminaire diphasique* », Projet de Fin d'Etudes, Université Bordeaux 1, juin 2002.

[17]Émile ESPOSITO, « *Combustion en prémélange gazeux* », document techniques de l'ingénieur :B8315,école centrale de paris,

[18]NOUI Samira, « *étude numérique de la combustion des gaz dans un four de cimenterie* », mémoire diplôme de magistère, université Hadj Lakhdar, Batna ,Mars 2006.

[19] Ghislain LARTIGUE, « *simulation des grandes échelles et instabilités de combustion* », mémoire de thèse doctorat , institut national polytechnique de Toulouse,Novembre 2004.

[20] Robert P. Lucht, « *Detonations and Deflagrations: Chapman-Jouguet Analysis I* » présentation, Room 86, Mechanical Engineering Building .School of Mechanical Engineering Purdue University. West Lafayette, Indiana, Mars 2007.

[21] Étienne Parizot, « *Thermodynamique et gaz parfaits* », Cours de Physique, Université Paris 7,

[22] Frédéric BUDA, « *mécanismes cinétiques pour L'amélioration de la sécurité des Procédés d'oxydation des hydrocarbures* », thèse doctorat, institut national polytechnique de lorraine, Mars 2006.

[23] JOSIANE Roy , « *les types de flammes* », article 3, novembre 2006.

[24] P. Amiot, « *thermodynamique* », département de physique, de génie physique et d'optique, université Laval, Québec, Canada.

[25] 3A5 : combustion in power generation, lecture 3, "dissociation and equilibrium"

[26] "thermette" centre d'énergétique –Paris, Février 2004.

[27] Communiqué de presse, FEMLAB® 3.1 : Technologie 64-bit et Nouveaux Modèles de Sciences de la Terre, de Transferts de Chaleur et MEMS.

[28] M. BOUMAH RAT et A. GOURDIN, « *méthodes numériques appliquées* », CO.P.U

[29] R. RENANE, N. NOUR, A. BEKHTI , « *Contrôle des paramètres de combustion d'une flamme laminaire prémélangée à l'équilibre chimique par l'analyse des produits* », First National Conference on Mechanics and Engineering Systems, Boumerdes, May 26-27, 2007

[30] Trun K. a, Varoque B. a;b, Veynante D. b, Poinso T. c, "Large Eddy Simulations and experimental characterization of the unsteady response of partially premixed flames", article, EM2C Laboratory, Ecole Centrale de Paris, 12 January 2004.

[31] D. Bissières†, C. Bérat† “*Large Eddy Simulation predictions and validations of a gas turbine combustion chamber*”, article, DT/CP/CTE, TURBOMECA, cerfacs, 2005.

[32] R.RENANE, N.NOUR, N.BEKKA, A.BEKHTI , « *Temperature and pollution control contribution in laminar monodimensional flames*», Proceedings of the International Conference on Modeling and Simulation (MS'07 Algeria) July 2 - 4, 2007, Algiers, Algeria

[33] “*Les mots de combustion*”, groupement français de combustion, janvier 2004.

[w1] <http://www.enseiht.fr/hmf/travaux/CD9900/travaux/optemf/moteur/rap1.htm#ir> ;
« étude de la combustion dans le moteur »

[w2] <http://fr.wikipedia.org/wiki/combustion>
<http://fr.wikipedia.org/wiki/thermodynamique>

[W3] [http://www.roulezgnv.com/hydrocarbures et pollution.](http://www.roulezgnv.com/hydrocarbures%20et%20pollution)

[w4] [http://www.cenerg.ensmp.fr/francai/logiciel/thermi/html/bthermisimtherm.htm,](http://www.cenerg.ensmp.fr/francai/logiciel/thermi/html/bthermisimtherm.htm)

[w5] <http://www.tec.adelaide.edu.au/chapters/emission.html#combustion>
<http://www.tec.adelaide.edu.au/chapters/emission.html#design>
<http://www.tec.adelaide.edu.au/chapters/emission.html#predictive>
<http://www.tec.adelaide.edu.au/chapters/emission.html#predictive1>

[w6] [http://www.ensa-agadir.ac.ma/gree/download/combustibles.htm#4.pouvoir calorifique](http://www.ensa-agadir.ac.ma/gree/download/combustibles.htm#4.pouvoir%20calorifique)