

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية
REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE

19/90

وزارة التعليم و البحث العلمي
Ministère de l'Enseignement et de la Recherche Scientifique

ECOLE NATIONALE POLYTECHNIQUE

DEPARTEMENT

GENIE MECANIQUE
المدرسة الوطنية المتعددة التقنيات
BIBLIOTHEQUE — المكتبة
Ecole Nationale Polytechnique

PROJET DE FIN D'ETUDES

SUJET

ETUDE ET ELABORATION D'UN PROGRAMME DE CALCUL
DE LA TEMPERATURE D'EQUILIBRE (T₂)
DE LA COMPOSITION (X_i) DE FIN DE COMBUSTION
DE KEROSENE DANS L'AIR
EFFET DE LA TEMPERATURE D'ENTREE ET
DE LA RICHESSE SUR
(T₂) ET (X_i)

Proposé par :

B. Benkoussas

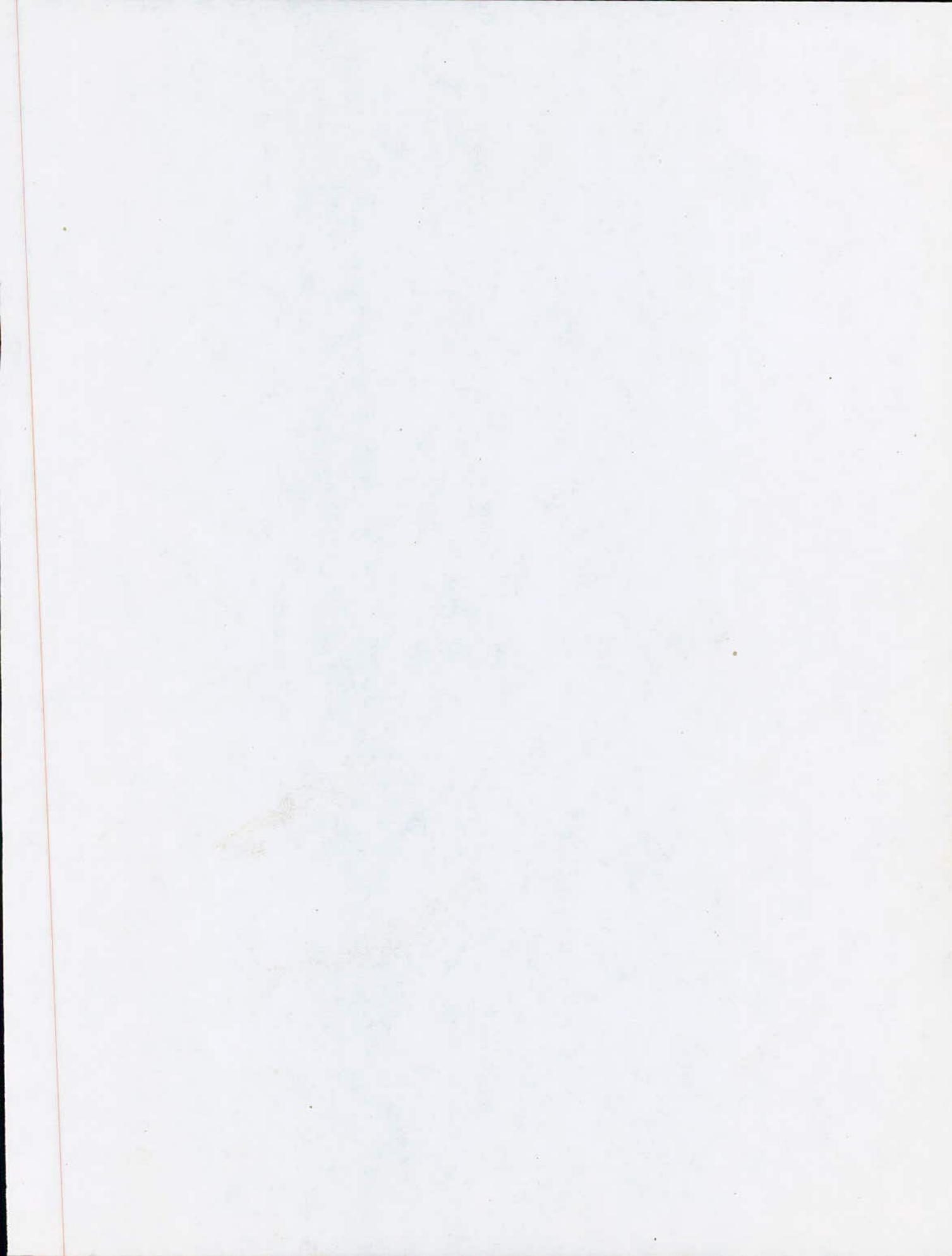
Etudié par :

Sidotmane Mourad

Dirigé par :

B, Benkoussas

PROMOTION *Juin 1990*



الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية
REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE

وزارة التعليم و البحث العلمي
Ministère de l'Enseignement et de la Recherche Scientifique

ECOLE NATIONALE POLYTECHNIQUE

DEPARTEMENT : GENIE MECANIQUE

المدرسة الوطنية المتعددة التقنيات
BIBLIOTHEQUE — المكتبة
Ecole Nationale Polytechnique

PROJET DE FIN D'ETUDES

SUJET

ETUDE ET ELABORATION D'UN PROGRAMME DE CALCUL
DE LA TEMPERATURE D'EQUILIBRE (T_2)
DE LA COMPOSITION (X_i) DE FIN DE COMBUSTION
DE KEROSENE DANS L'AIR
EFFET DE LA TEMPERATURE D'ENTREE ET
DE LA RICHESSE SUR
(T_2) ET (X_i)

Proposé par :

B. Benkoussas

Etudié par :

Sidotmane Mourad

Dirigé par :

B, Benkoussas

PROMOTION *Juin 1990*

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ

قُلْ إِنْ صَلَاتِي وَنُسُكِي وَمَحْيَايَ وَمَمَاتِي لِلَّهِ
رَبِّ الْعَالَمِينَ. لَا شُؤْكَ لَهُ وَبِذَلِكَ أُمُوتُ
وَأَنَا أَوَّلُ الْمُسْلِمِينَ.

اللَّهُمَّ خُنْ الْفُقَرَاءُ إِلَيْكَ. الْإِسْوَاءُ بَيْنَ يَدَيْكَ لَهُ
فَاغْنِنَا بِعِلْمِكَ الَّذِي لَا يَنْفُذُ.

الحمد لله الذي ربنا الله وكتبه

اللَّهُمَّ اجْعَلْ هَذَا الْعَمَلَ خَالِصًا لِرَجَائِكَ
الْكَرِيمِ

الموضوع : يهدف هذا المشروع إلى دراسة وإعداد برنامج

إحصائي يسمح لنا بحساب درجة حرارة التوازن

المدرسة الوطنية المتعددة التقنيات
المكتبة - BIBLIOTHEQUE
Ecole Nationale Polytechnique

ومكونات المواد الناتجة من احتراق الحديد و الكربون

"كبروزان" ، وبالتالي دراسة تأثير بعض الوسائط لحرارة

دخول المزيج ، المكونات الابتدائية للمزيج (عنى المزيج)

تعدت هذه الدراسة على مزيج متفقر .

objet: le but de ce projet est de faire l'etude et l'elaboration
d'un programme qui calcule la température d'équilibre et
la composition de fin de combustion du kéroséne, ainsi de
faire l'etude de l'influence de plusieurs paramètres tels
que la température d'entrée du mélange, la richesse.
Cette étude est consacrée aux mélanges pauvres .

object: the aim of the project is to study and elaborate a program
which calculate the equilibrium temperature and the composition
of the combustion of the kerosene with air. Also the effect
of the initiale température mixture and the equivalence ratio
on the temperature and composition was studied .
The study was limited to the poor mixtures .

Dédicaces

A mes chers parents.

A mes chers frères et soeurs
et leurs enfants - khaled & achwak -

A tous ce qui temoignent qu'il n'y a de dieu qu' ALLAH et
que MOHAMED est son envoyé et son prophète .

Je dédie ce modeste mémoire

Remerciements

Je tiens à exprimer à mon promoteur, Monsieur B.BENKOUSSAS

toute ma gratitude pour les conseils et les encouragements
qu'il m'a prodigués durant cette étude .

Je remercie vivement le personel de la bibliotheque et
celui du centre de calcul.

Que tous ceux qui ont contribué à ma formation ainsi
qu'à la réalisation de ce travail trouvent ici l'expression
de ma gratitude et ma reconnaissance .

المدرسة الوطنية المتعددة التقنيات
BIBLIOTHEQUE — المكتبة
Ecole Nationale Polytechnique

TABLE DES MATIERES

المدرسة الوطنية المتعددة التقنيات
BIBLIOTHEQUE — المكتبة
Ecole Nationale Polytechnique

PREFACE

CHAPITRE I INTRODUCTION

CHAPITRE II ASPECTS GENERAUX DE LA COMBUSTION ET DEFINITIONS

II.1 Introduction

II.2 Definitions

II.3 Phenomènes de combustion

II.3.1 Modeles de la combustion

II.3.2 Phenomènes d'auto-inflamation et de propagation

II.4 Manifestations observables de la combustion

II.4.1 La chimie-luminescence

II.4.2 La chimie-ionisation

II.4.3 Limites d'inflammabilité

II.4.4 Richesse

II.4.5 Pouvoir comburivore

II.4.6 Pouvoir fumigène

II.4.7 Pouvoir calorifique

II.5 Aspects chimique de la combustion

II.5.1 Aspect thermodynamique

II.5.2 Aspect cinétique

II.5.2.1 Le mécanisme réactionnel de la combustion

II.5.2.2 Les vitesses réactionnelles

II.5.2.2.1 Vitesses des étapes élémentaires

II.5.2.2.2 Vitesses de réaction globale de combustion

II.6 Aspect aérodynamique de la combustion

II.7 Rendement thermo-chimique de la combustion

CHAPITRE III COMBUSTION DES CARBUREACTEURS

III.1 Les carburateurs

III.2 Description de la combustion dans les turbo-réacteurs

III.2.1 Le turbo-réacteur

III.2.2 La chambre de combustion

III.2.2.1 Ecoulement du fluide dans la chambre de combustion

III.3 La combustion du carburateur
stabilité de la flamme

III.4 Reactions de combustion des carburateurs

III.5 Les propriétés du carburateur liées à la combustion

CHAPITRE IV DONNEES THEORIQUES SUR LA COMBUSTION DU KEROSENE DANS L'AIR

IV.1 Introduction

IV.2 Hypothèses de calcul

IV.3 Combustion complète sans dissociation 'mélange pauvre'

- introduction

- évaluation de la température de combustion

IV.4 Phénomène de dissociation

IV.5 Combustion en tenant compte des dissociation - mélange pauvre

IV.6 Possibilité de formation d'autres produits de combustion

CHAPITRE V THEORIE DE CALCUL DE L'ETAT DES PRODUITS DE COMBUSTION

V.1 Introduction - définition du problème -

V.2 Calcul de l'état des produits de combustion

V.3 Méthode de calcul

V.3.1 Hypothèses

V.3.2 Bilan de masse

V.3.3 Bilan d'énergie

V.3.4 Calcul de la température de fin de combustion
adiabatique et la composition

V.3.5 Application de la méthode de calcul

V.3.5.1 Calcul de la température de combustion complète

V.3.5.2 Calcul de la température et la composition
à l'équilibre

CHAPITRE VI INTERPRETATIONS ET CONCLUSION

VI.1 Interpretations des graphes

VI.2 Conclusion

APPENDICE A ORGANIGRAMME

APPENDICE B PROGRAMME DE CALCUL

APPENDICE C FICHIER DES RESULTATS - 1^{re} VERSION -

APPENDICE D FICHIER DES RESULTATS - 2^{de} VERSION -

APPENDICE E GRAPHS

APPENDICE F BIBLIOGRAPHIE

PREFACE.

"il est difficile de concilier les vues du spécialiste de l'aérodynamique et celles du cinéticien, mais un effort mérite d'être tenté en vue d'arriver à une meilleure interprétation synthétique d'un domaine aussi riche que celui de la combustion."

A . VANTIGLEN

La réaction de combustion vive est la première qui l'homme ait été capable de déclencher volontairement l'orsque, au plus profond de son histoire, il acquit "l'art du feu".

Cette découverte allait constituer pour lui un élément essentiel de sa puissance; et beaucoup plus tard, il parvient à la mieux maîtriser et à l'asservir dans des machines productrices d'énergie, c'est encore elle qui permet aujourd'hui d'entrevoir une entreprise cosmique dont les limites sont imprevisibles.

Cette art du feu doit encore et sans cesse être perfectionné et mieux compris. Le but des chapitres qui vont suivre est de tenter de faire le point des connaissances actuelles dans un domaine si important de la combustion.

Si le chemin parcouru peut sembler long et pénible depuis le silex jusqu'aux premiers jalons d'une science quantitative, il est encourageant par contre, de contempler rétrospectivement un siècle et demi de progrès continuels et d'entrevoir les promesses de réalisations futures.

CHAPITRE - I -

INTRODUCTION

I - INTRODUCTION

Actuellement, les besoins en énergie sont couverts pour la part la plus importante par la combustion vive de pétrole et de charbon.

La connaissance des propriétés thermodynamique des produits de cette combustion et la détermination de leur état immédiatement après la réaction chimique au terme d'évolution données, revêtent une importance essentielle dans l'étude des machines thermiques qui constituent la grande généralité des moteurs de véhicules autopropulsés, car c'est encore, parmi les formes d'énergie actuellement disponibles, l'énergie thermique qui se prête la mieux à une transformation en énergie mécanique.

En fait, la propulsion aéronautique n'utilise à l'heure actuelle que la réaction de combustion, avec l'air ou l'oxygène pure, comme comburant, dans les moteurs à piston, les turboréacteurs, les turbopropulseurs les statoréacteurs, et les fusées.

La combustion est ainsi la réaction fondamentale des machines thermiques dont elle constitue la source d'énergie on peut la définir à ce titre comme le phénomène au cours duquel l'énergie potentielle du combustible, ou plus exactement

de l'ensemble combustible-comburant, est transformée en énergie utilisable sous forme calorifique, relais indispensable vers la forme mécanique.

La représentation du phénomène de combustion et de ceux qui lui sont directement liés trouve sa base dans la thermodynamique, dont les développements correspondants aux écoulements gazeux sans et avec réaction chimique sont maintenant désignés par les expressions d'aérodynamique et d'aérothermochimie.

L'évolution des milieux gazeux intéressés est toujours traitée en les assimilant à des gaz parfaits, hypothèse parfaitement légitime dans le cas des machines utilisant l'air comme comburant, puisque celui-ci est le constituant majeur des gaz, les réactifs sont injectés à l'état vapeur ou gaz dans la chambre, mais leurs transformation en gaz brûlés et assez rapide pour que l'on puisse se contenter de considérer uniquement l'évolution de ceux-ci du point de vue thermodynamique global.

L'application du premier principe de la thermodynamique conduit immédiatement à l'établissement des bilans de masse et d'énergie, dont sont déduites les représentations globales, numériques du fonctionnement des foyers.

Donc, la thermodynamique permet de déterminer l'état, et d'une façon générale les propriétés des gaz brûlés, si l'on admet que les conditions des équilibres mécaniques, thermiques, et chimiques sont réalisées, approximation légitime pour un grand nombre d'applications.

C'est à l'exposé de ces calculs, que sont consacrés les derniers chapitres de cette thèse, tandis qu'il a été jugé utile, afin de situer les différents phénomènes de la combustion dans leur contexte physico-chimique et aérodynamique, de commencer par une description générale de cette réalité physique qu'il est convenu d'appeler "combustion vive" et de ces multiples manifestations.

Dans une autre section de la thèse, on établira les systèmes d'équations qui régissent l'état des produits de combustion ainsi que la méthode de résolution choisie; en fin une section sera consacrée aux résultats de calcul de la température et de la composition à l'équilibre (fin de combustion) qui présentent du point de vue pratique, un intérêt tout particulier, ainsi que l'interprétation des résultats sur la base de :

- l'effet de la température initiale.
- l'effet de la composition initiale (richesse).

CHAPITRE II

ASPECT GÉNÉRAUX DE LA COMBUSTION ET DÉFINITION

.....

II - 1 INTRODUCTION

Il est actuellement encore impossible de donner un critère absolu de la combustion vive, qui la distinguerait de façon simple et non équivoque de tout autre phénomène d'oxydation ou de combustion lente, mais une définition phénoménologique est possible afin d'entrevoir la nature si difficile à saisir de la combustion vive.

II - 2 DEFINITION

La combustion implique évidemment la réaction entre deux espèces le comburant (oxydant) et le combustible (réducteur) dans l'ensemble constitue le milieu réactionnel.

Les mélanges utilisés en combustion sont constitués, d'une part, d'un plusieurs combustibles tels que l'hydrogène ou les hydrocarbures (kérosène dans notre cas) et, d'autre part, d'un comburant, généralement l'air ou l'oxygène.

II - 3 PHENOMENES DE COMBUSTION

La combustion est un processus chimique assez complexe, qui peut être définie comme étant l'emballement d'une réaction chimique exothermique, rendu possible du fait de certaines

conditions adéquates (pression, température, composition des réactifs), contrôlé par certains phénomènes physiques (transferts de chaleur et de masse) qui lui imposent des modalités précises et des apparences diverses .

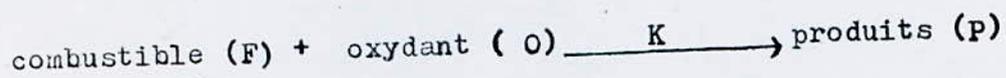
Notons que des nombreuses espèces intermédiaires, de durée de vie plus ou moins courte, apparaissent dans la zone de réaction. La prise en compte des réactions chimiques intervenant dans la combustion nécessite une modélisation faisant apparaître les espèces les plus importantes .

II - 3 - I . MODELES DE LA COMBUSTION

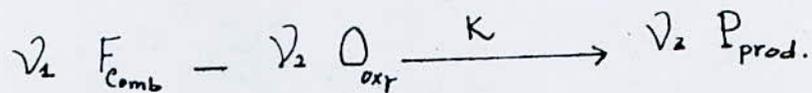
Deux types de modèles sont généralement utilisés. L'un à chimie complexe, fait intervenir en plus des réactifs et des produits de la réaction, les espèces chimiques intermédiaires qui pilotent la réaction, et dont la durée de vie et les concentrations sont suffisantes pour influencer le cours de la réaction. L'utilisation du modèle avec chimie complexe implique la connaissance préalable du mécanisme cinétique des espèces chimiques intervenant, des réactions chimiques à prendre en compte et des constantes des taux de réactions respectifs, or la connaissance simultanée de ces paramètres est très délicate .

On peut alors simplifier le schéma des réactions en déterminant un système équivalent, qui puisse représenter les caractéristiques générales de la réaction de combustion.

Le plus simple de ces systèmes équivalents est celui correspondant à la réaction simple, irréversible du type :



en présence d'un gaz inerte (N₂). La réaction chimique s'exprime dans ce cas par l'équation :



ν_1 et ν_2 : sont les coefficients stoechiométriques des réactifs et des produits de la réaction.

K : la vitesse de réaction directe.
 dans cette relation, la vitesse de la réaction est indépendante des concentrations et dépend uniquement de la température selon la loi d'Arrhénius.

II - 3 - 2 PHENOMENE D'AUTO-INFLAMATION ET DE PROPAGATION

Suivant les conditions physiques et aérodynamique, le phénomène de la combustion peut prendre des modalités et des apparences très différentes.

Souvent, il débute par une réaction d'oxydation lente qui, lorsque certaines conditions de température, de pression et de la composition du mélange se trouvent réalisées dans l'ensemble du système, se transforme en oxydation vive ou combustion vive, ou simplement combustion. c'est l'explosion, au sens strict du terme, ou simplement auto-inflammation.

Dans autres cas (notre cas par exemple), ce même mélange étant maintenu à la température ambiante, si on y introduit une source d'activation "ponctuelle" (bougie à étincelle), on provoquera une auto-inflammation localisée.

Lorsque l'auto-inflammation se produit localement la zone de réaction au sein de la quelle se déroulent les réactions de combustion peut, dans certaines conditions, se propager de proche en proche dans le mélange frais. La zone réactionnelle en propagation est appelée front de flamme.

Par ailleurs, la flamme peut elle même se propager de manière très différente; si le combustible et le comburant sont parfaitement mélangés au préalable, on parle de prémélange; si, par contre, le phénomène de propagation est contrôlé par la vitesse avec la quelle s'opère par diffusion le mélange des réactifs, on parle de flamme de diffusion.

En fin, en fonction de la nature du mélange et de certaines conditions de confinement, la flamme en prémélange peut se propager soit à une vitesse subsonique (déflagration), soit à une vitesse supersonique (détonation) .

II - 4 MANIFESTATIONS OBSERVABLES DE LA COMBUSTION

Durant la combustion, ils se manifestent à l'observation (visualisation et mesures) :

II - 4 - I LA CHIMIE - LUMINESCENCE

Qui est notamment responsable de la luminosité des flamme . Ce processus résulte d'une très grande concentration de chaleur sur l'un des produits de réaction .

II - 4 - 2 LA CHIMIE-IONISATION

Dont le mécanisme est similaire au précédent, et qui conduit pour de nombreux combustibles à la formation d'ions dans la zone de combustion, conférant à la flamme la propriété de conduire l'électricité .

II - 4 - 3 LIMITES D'INFLAMMABILITE

Les proportions relatives - combustible comburant - ne doivent pas être trop éloignées des proportions stoechiométriques correspondant à la combustion neutre • La combustion ne peut se produire que si le pourcentage de gaz combustible dans le mélange est compris entre deux limites inférieure et supérieure •

II - 4 - 4 RICHESSE

$$\text{l'expression } \phi = \frac{\left\{ \frac{\text{combustible}}{\text{comburant}} \right\} \text{ donnée}}{\left\{ \frac{\text{combustible}}{\text{comburant}} \right\} \text{ stoechio}}$$

définit la richesse du milieu réactionnel •

si $\phi = 1$, mélange stoechiométrique (combustion complète)

si $\phi < 1$, mélange pauvre (combustion oxydante)

si $\phi > 1$, mélange riche (combustion partielle-défaut de comburant-)

II - 4 - 5 POUVOIR COMBURIVORE

C est la quantité de comburant nécessaire et strictement suffisante qu'il faut délivrer à une unité de masse (ou de volume) de ce combustible pour assurer sa combustion neutre •

II - 4 - 6 POUVOIR FUMIGENE

On appelle pouvoir fumigène d'un combustible, les quantités de fumées qui résultent d'une combustion neutre d'une unité de ce combustible .

II - 4 - 7 POUVOIR CALORIFIQUE

C'est la quantité d'énergie libérée sous forme de chaleur par la combustion complète d'une unité de combustible . on convient de considérer que les produits sont ramenés aux conditions standards (25°C ET 1 atm), ceci fournit un outil convenable pour la comparaison entre divers combustibles . Dans les fumées, l'eau peut se présenter aussi bien en phase liquide qu'en phase vapeur; dans le premier cas le pouvoir calorifique est dit "supérieur", dans le second il est dit "inférieur" .

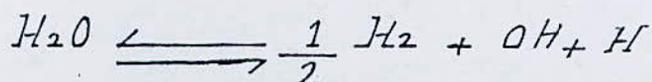
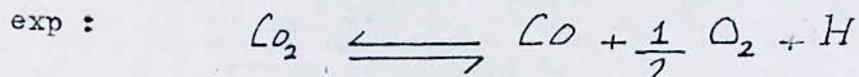
II - 5 ASPECTS CHIMIQUE DE LA COMBUSTION

Comme toute réaction chimique, la combustion présente un aspect thermodynamique et un aspect cinétique .

II - 5 - I ASPECT THERMODYNAMIQUE

On appelle chaleur de combustion la fraction d'énergie chimique libérée par mole de combustible à (T, P, N) en se transformant en produit de combustion.

La chaleur de combustion est donnée par la différence des chaleurs de formation du système réactif et du système des produits. En réalité, à cause des valeurs des équilibres thermiques aux hautes températures atteintes dans la combustion, les produits de combustion sont en partie dissociés.



Les taux de dissociation sont une fonction de la température et sont exprimés par les constantes d'équilibres :

$$K_1(T) = \frac{[CO] [O_2]^{1/2}}{[CO_2]}$$

$$K_2(T) = \frac{[H_2]^{1/2} [OH]}{[H_2O]}$$

D'ordinaire, les concentrations des espèces chimiques sont exprimées en pressions partielles ou en nombre de moles.

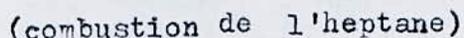
Il est important de faire remarquer que cet aspect permet le calcul de la température de fin de combustion à travers la loi de conservation d'énergie.

II - 5 - 2 ASPECT CINETIQUE

Cet aspect traite successivement :

II - 5 - 2 - I LE MECANISME REACTIONNEL DE LA COMBUSTION

Il est totalement improbable qu'une collision entre plusieurs molécules à la fois (une d'un hydrocarbure et plusieurs oxygène), par exemple :



puisse avoir lieu . Cette propabilité est tellement petite que la réaction demanderait un temps quasi infini, si telle était la façon dont devait se dérouler.

En réalité, chaque réaction qui doit mettre en jeu plus de deux(ou trois) partenaires à la fois, se fait par étapes élémentaires, (principe des transformations minimales). L'ensemble de ces étapes élémentaires constitue le mécanisme de la réaction .

Dans la combustion, ces étapes élémentaires font intervenir non des molécules stables seulement, mais également des radicaux libres, et de plus ces étapes se succèdent de façon à former des chaînes caractérisées par une régénération continue des radicaux libres .

Ensuite, la réaction (réactivité) chimique de ces radicaux est très forte, d'où il résulte une vitesse réactionnelle très élevée .

Enfin, les radicaux libres, non seulement sont régénérés, mais ils peuvent en plus se multiplier, ce qui augmente le nombre de chaînes réactionnelles qui théoriquement peut augmenter jusqu'à l'infini, cet emballement de la vitesse réactionnelle constitue le fait primitif le plus caractéristique de ce qu'on appelle l'explosion .

radical libre: c'est toute partie d'une molécule qui possède un électron de valence solitaire (H ,OH, O).

II - 5 - 2 - 2 . LES VITESSES REACTIONNELLES

II - 5 - 2 - 2 - I . VITESSES DES ETAPES ELEMENTAIRES

D'une façon générale, on peut exprimer la vitesse réactionnelle d'une étape élémentaire en multipliant la fréquence collisionnelle (des collisions bi-particulaires, ou tri-particulaires ou encore des collisions sur la paroi, suivant les cas) par la probabilité complexe de réalisation des conditions requises pour que l'étape considérée puisse avoir lieu; ces conditions sont:

- la nécessité que les particules qui entrent en collision soient bien les réactifs requis par l'étape considérée .
- la nécessité pour le système des particules qui entrent en collision, de posséder l'énergie minimale (énergie d'activation).

On peut appliquer cela maintenant successivement au cas des différentes étapes élémentaires qu'on rencontre dans la combustion :

- vitesse des étapes de propagation .
- vitesse de ramification directe .
- vitesse de rupture en phase homogène .
- vitesse de rupture sur paroi .

II - 5 - 2 - 2 - 2 VITESSE DE LA REACTION GLOBALE DE COMBUSTION

La vitesse réactionnelle globale étant proportionnelle à la fraction molaire des radicaux libres, elle doit nécessairement s'accélérer lorsque cette fraction molaire augmente .

La réaction de combustion étant exothermique, son accélération correspond d'ordinaire à une augmentation de la température dans le milieu réactionnel; ceci est une seconde cause de l'accélération de combustion. Cette auto-accélération mène très vite à un "emballement" de la vitesse réactionnelle, qui constitue le caractère propre de l'explosion .

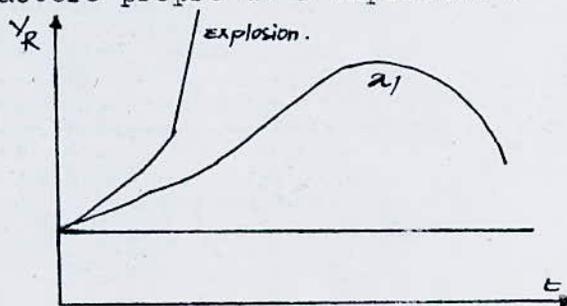


fig . évolution de la vitesse réactionnelle dans

a) réaction lente . b) explosion

II - 6 ASPECT AERODYNAMIQUE DE LA COMBUSTION

Cet aspect étudie la déflagration et sa propagation à des différentes vitesses, suivant qu'elle se produit dans un mélange inflammable au repos ou en écoulement, laminaire, ou bien dans un mélange en écoulement turbulent .

La connaissance de la nature de l'interaction entre la flamme et la turbulence est d'une grande importance pour la pratique .

En effet, dans la presque totalité des applications industrielles la flamme se propage dans des conditions de turbulence plus ou moins prononcées et le contrôle de ces dernières constitue un facteur important dans l'optimisation des procédés . On se trouve ici devant un cas type de l'incidence des conditions aérodynamiques sur la combustion .

II - 7 RENDEMENT THERMOCHIMIQUE D'UNE COMBUSTION

La combustion réelle d'une unité de combustible dégage une quantité de chaleur étant inférieure au pouvoir calorifique de ce même combustible (à cause des pertes par dissociation et ionisation), on convient de définir un rendement thermochimique représentant le rapport entre ces deux quantités de chaleur respectivement. Le rendement réel de la combustion est encore

inférieur au rendement thermochimique à cause des pertes par rayonnement .

CHAPITRE III

COMBUSTION DES CARBUREACTEURS

III - I LES CARBUREACTEURS

On distingue principalement deux qualités de carburateurs:

- le carburateur type "kérosène", désigné JET (AI), à point d'éclair élevé (minimum 311°k) et à point de congélation de (223°k),
- le carburateur type "large coupe", désigné JJET B, mélange de distillat type kérosène avec de l'essence légère et solvant, son point de congélation est de 215°k_{maxi}.

III - 2 DESCRIPTION DE LA COMBUSTION DANS LES TURBO-REACTEURS

A la différence des moteurs à piston, dans les quels l'air qui participe à l'évolution génératrice de la force motrice est admis de manière discontinu, les réacteurs sont parcourus par un écoulement continu.

Le fonctionnement du réacteur reposant un accroissement d'énergie cinétique du fluide, accroissement que seule une détente peut procurer. La combustion doit être précédée d'une compression préalable.

III - 2 - I. LE TURBO REACTEUR

Quelque soit le turboréacteur envisagé, on retrouve toujours les constituants suivant :

un compresseur axial ou centrifuge, comprimant légèrement l'air.

augmente notablement sa température, et lui imprime une grande vitesse de translation, une ou plusieurs chambres de combustion, au le combustible est injecté et brûlé, ce qui amène une forte augmentation de la température, enfin ce processus est terminé par une dilatation de ces gaz chauds venant de la chambre de combustion, et une tuyère d'éjection terminée par une buse de propulsion, au les gaz finissent de se détendre, ce qui donne l'accélération recherchée .

III - 2 - 2 LA CHAMBRE DE COMBUSTION

La combustion dans la chambre d'un turboréacteur se caractérise par les ordres de grandeur suivante :

- l'air est porté par compression à 523 / 573 °K sur les avions subsonique, à 823°K sur les avions supersoniques .
 - le niveau des pressions sont modestes (quelque bars) .
- les vitesses de passage de l'air sont considérables (de l'ordre de centaines de metres par secondes) .
- l'élément "limite" de tout turboreacteur est la température d'entrée en turbine, cette température est limitée à :
 - 923 / 973 ° K (au mini) sur turbine terrestres .
 - 1273 / 1373 °K (au mini) sur turbine aviation à ailettes refroidies .

L'étude de la combustion dans la chambre et la définition du carburant viseront donc à obtenir une combustion stable, sans surchauffe des parois ou des premiers aubages de la turbine .

III - 2 - 2 - I ECOULEMENT DU FLUIDE DANS LA CHAMBRE DE COMBUSTION

La combustion dans la chambre de combustion se caractérise par un grand excès d'air; en effet, l'air provenant du compresseur est divisé en :

- air primaire qui forme avec le combustible injecté, un mélange qui assurera un début de combustion dans les meilleures conditions possibles .
- air secondaire qui léche les parois extérieures de la chambre de combustion empêche que celle-ci soit portée à trop haute température, complète la combustion et abaisse la température des gaz brûlés à une valeur compatible avec le fonctionnement continu des aubes de la turbine .

Remarquons que pour abaisser la température des gaz brûlés à une valeur acceptable, il faut un fort excès d'air par rapport à l'air strictement nécessaire pour la combustion . C'est grâce à cet excès d'air qu'il est possible d'installer un dispositif de post-combustion .

III - 3 LA COMBUSTION DU CARBUREACTEUR

Dans un écoulement gazeux, la zone de réaction d'une flamme peut être entraînée par l'écoulement et se détacher de l'orifice du brûleur : la flamme est soufflée et le processus de combustion s'arrête .

Les vitesses de passage de l'air à l'entrée du foyer sont très nettement supérieures à la vitesse fondamentale de propagation linéaire de la flamme, et il faudra donc trouver un artifice pour éviter le soufflage et assurer la stabilité de la flamme .

a)- l'écoulement est turbulent, la vitesse fondamentale s'y accroît, sans toutefois équilibrer les vitesses de passage .

b)- la stabilité ne peut être assurée qu'en apportant au point d'inflammation un apport de chaleur suffisant pour que la température permette à la réaction de combustion de (re)commencer en permanence à cet endroit .

Cet apport est assuré par les gaz chauds de la combustion que le mouvement de l'air rabat sur les orifices des brûleurs grâce à un dispositif judicieusement conçu .

voir fig. représentent les deux solutions de principe ----->

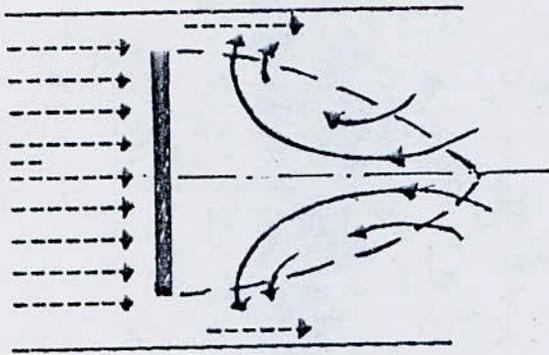


fig.
 réalisation de l'écoulement
 inverse d'un fluide par
 disposition d'un obstacle
 matériel perpendiculaire
 au courant gazeux .

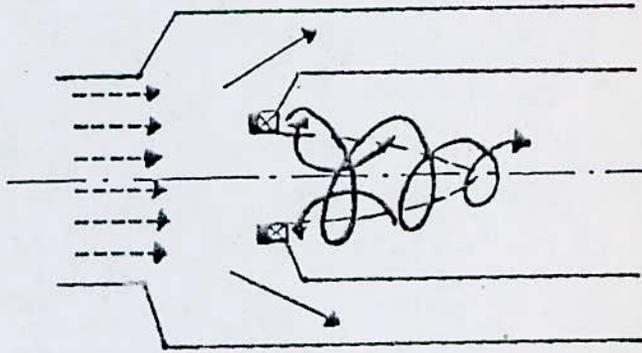


fig.
 réalisation de l'écoulement
 inverse d'un fluide en donnant
 un mouvement giratoire au
 courant gazeux .

S ----- ff ----- S

III - 4 REACTION DE COMBUSTION DES CARBUREACTEURS

Les réactions de base ne constituent qu'une partie du mécanisme de combustion d'un carburéacteur. Lorsque l'on entreprend une description détaillée du phénomène, il est nécessaire de prendre en compte un plus grand nombre de réactions d'espèces secondaires .

Les carburéacteurs, et la plupart des combustibles, brûlent également suivant des mécanismes complexes de chaînes ramifiées. Les réactions font intervenir, outre les radicaux O, H, OH, des espèces intermédiaires (formaldéhyde par ex (CHO), des radicaux carbonés telque CH₃, CH, CHO .

Les réactions de combustion des carburéacteurs peuvent être précédées de réactions de craquage thermique qui conduisent à des carburéacteurs plus légers et, éventuellement, à du carbone . Les réactions de combustions sont accompagnées et suivies de la formation d'oxydes d'azote, principalement NO suivant un schéma dont les réactions majeurs sont :



III - 5 LES PROPRIETES DU CARBUREACTEUR LIEES A LA COMBUSTION

Le mécanisme de la combustion dans un écoulement à grande vitesse est essentiellement une propagation . Le mécanisme d'auto-inflammation n'est nullement utilisé .

Il apparait donc que, du seul point de vue de la combustion ; aucune spécification particulière n'est à demander au carburant. Mais, pour qu'il y ait combustion, il est nécessaire que le carburant, en général utilisé sous forme liquide, puisse se vaporiser et se mélanger à l'air rapidement; la réaction n'ayant lieu qu'en phase gazeuse .

Il doit donc être pulvériser en un nuage de gouttelettes . Donc, le mécanisme de la combustion dans les réacteurs à flux continu est moins exigeant pour ce qui est de la structure de la molécule du combustible qu'il ne l'est dans les moteurs à pistons . Les difficultés éventuelles ne peuvent provenir que de la formation du mélange, du rayonnement de la flamme et des dépôts de carbone sur les parois du foyer .

Les spécifications tiennent compte de ces impératifs en introduisant les tests de point de fumée, de luminosité de la flamme, de teneur en aromatique, de point final de distillation, et partiellement de viscosité .

En plus de ces propriétés liées à la combustion, le combustible utilisé dans les réacteurs doit posséder certaines propriétés liées à l'utilisation particulière, conditions en vol (évaporation, la solubilité de l'air, la fluidité à basse température, la stabilité thermique et les possibilités de séparation de l'eau).

Comme tout carburant, ou produit pétrolier raffiné, le carburé-acteur devra satisfaire certaines exigences d'absence de corrosion, de permance de qualité au stockage, de possibilité et de sécurité de manutention .

IV - I INTRODUCTION

Le mélange d'hydrocarbures, appelé kérosène, que nous étudierons, est un pétrole distillant entre 439/524 °K, de densité moyenne 0.78 à 288 °K. l'analyse élémentaire d'un tel mélange donne, en poids, 85 % de carbone et 14 % d'hydrogène, ce qui correspond à la formule empirique moyenne $C_n H_m$ avec $n = 10.4$ et $m = 20.8$. Le kérosène est composé approximativement de 10 % de carbures aromatiques, 80 % de naphéniques et 10 % de paraffiniques.

La combustion du kérosène dans l'air provoque une élévation de température et donne lieu à la formation de certains produits de combustion .

IV - 2 HYPOTHESES DE CALCUL

Le calcul des températures atteintes et les valeurs des concentrations des produits formés n'est possible qu'en supposant par hypothèse la combustion idéal, c'est-à-dire adiabatique .

De plus, nous admettrons que :

- la combustion se propage continuellement dans une chambre à pression constante ;
- les gaz sont parfaits et les produits de combustion formés sont enéquilibré à toute température ;

CHAPITRE IV

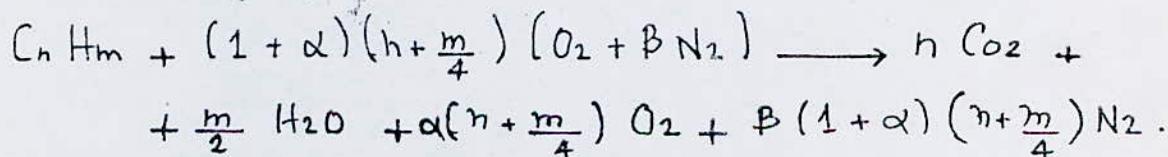
DONNEES THEORIQUES SUR LA COMBUSTION DU KEROSENE DANS L'AIR

- les températures de l'air et du combustible à l'entrée dans la chambre de combustion sont constantes .

Enfin, nous supposerons pour simplifier les calculs que l'air est uniquement formé d'oxygène et d'azote dans les proportions 23.2 % de O₂ et 76.8 % de N₂ . Quant au combustible kérosène, nous supposerons qu'il est constitué seulement de carbone et d'hydrogène avec une composition en poids 85.6 % de carbone et 14.4 % d'hydrogène .

IV - 3 COMBUSTION COMPLETE SANS DISSOCIATIONS = MELANGE PAUVRE -
(INTRODUCTION - EVALUATION DE LA TEMPERATURE DE COMBUSTION)

En combustion complète, le kérosène brûle dans l'air suivant la réaction chimique :



on désigne par :

α : l'excès d'air comburant ;

$r_c = (1 + \alpha)^{-1}$: richesse ;

$\beta = 3.76$ le nombre de molécules d'azote pour une molécule d'oxygène .

le nombre total de moles de gaz brûlés formées dans la réaction précédente est :

$$m = n + \frac{m}{2} + \alpha \left(n + \frac{m}{4} \right) + \beta (1 + \alpha) \left(n + \frac{m}{4} \right) \dots \dots (2)$$

si l'on considère des gaz parfaitement desséchés, le nombre de moles devient :

$$m' = m - \frac{m}{2} \dots \dots (3)$$

les concentrations des produits de combustion formés eau et anhydride carbonique sont :

$$a_{CO_2} \% = 100 \times \frac{n}{m} \quad (4)$$

$$a_{H_2O} \% = 100 \times \frac{m}{m} \quad (5)$$

comme $n = \frac{m}{2}$, on a $a_{CO_2} = a_{H_2O}$ et il reste de l'oxygène en excès et de l'azote qui ne participent pas à la combustion :

$$a_{O_2} \% = 100 \times \frac{\alpha \left(n + \frac{m}{4} \right)}{m} \quad (6)$$

$$a_{N_2} \% = 100 \times \frac{\beta (1 + \alpha) \left(n + \frac{m}{4} \right)}{m} \quad (7)$$

si les gaz brûlés sont desséchés et totalement dépourvus d'eau, $a_{H_2O} = 0$ et les titres des constituants du mélange sont :

$$a_{CO_2} \% = a_{CO_2} \% \frac{m}{m'} \quad \text{etc.} \quad (8)$$

le rapport air/combustible :

$$\frac{A}{C} = \frac{(1 + \alpha) \left(n + \frac{m}{4} \right) (O_2 + \beta N_2)}{C_n H_m} \quad (9)$$

définit la richesse du mélange. Si $\alpha = 0$, la combustion a lieu en mélange stoechiométrique. En remplaçant n, m, C, H, O , et N par leurs valeurs dans l'équation (9) on trouve :

$$a \frac{A}{C} = (1 + \alpha) 14.70 \quad (10)$$

la valeur du rapport air/combustible stoechiométrique est donc :

$$\left(\frac{A}{C} \right)_{St} = 14.70$$

Le calcul des concentrations des constituants du mélange montre que celles-ci sont des fonctions de (équations -2- 4_5-6 et -7-); or, est relié, au rapport A/C par l'équation (10). Les concentrations peuvent donc être exprimées directement en fonction du rapport A/C et les relations ainsi établies sont de la forme :

$$a_{CO_2} \% = a_{H_2O} \% = 100 \times \frac{K1}{K2 \frac{A}{C} + K3} \quad (11)$$

$$a_{O_2} \% = 100 \times \frac{K4 \frac{A}{C} - K5}{K2 \frac{A}{C} + K3} \quad (12)$$

$$a_{N_2} \% = 100 \frac{K6 \frac{A}{C}}{K2 \frac{A}{C} + K3} \quad (13)$$

et K1, K2, K3 sont des constantes numériques .

Remarquons que nous avons :

$$\frac{Jn}{Jn'} = \frac{K2 \frac{A}{C} + K3}{K2 \frac{A}{C} - K3} \quad (14)$$

L'élévation théorique de température provoquée par la combustion air-kérosène peut être calculée . Soit A/C = Z un rapport air combustible donné. Dans Ig de mélange on peut déterminer les concentrations [C], [O], [H], [N] en atomes-gramme/gramme de mélange des quatre sortes d'atomes participant à la combustion .

Après combustion nous avons en présence les constituants $e = [CO_2]$, $f = [H_2O]$, $g = [O_2]$, $h = [N_2]$ en atomes-gramme/gramme de mélange et la loi de la conservation de la matière nous permet d'écrire :

$$\begin{aligned} [C] &= e & , [H] &= 2f , \\ [O] &= f + 2g + 2e & , [N] &= 2h , \end{aligned} \quad (15)$$

Avant combustion le mélange possède une certaine chaleur initiale Q_I (préchauffage de l'air) et en fin de combustion la chaleur totale du mélange est :

$$e Q_{CO_2} + f Q_{H_2O} + Q_I = Q \quad , \quad (16)$$

Q_{CO_2} et Q_{H_2O} étant les chaleurs de formation de l'anhydride carbonique et l'eau .

Supposons que le mélange gazeux atteigne une certaine température T que nous choisirons arbitrairement; on doit, si la température T est bien choisie, avoir la relation :

$$(e \overline{C_{P_{CO_2}}^T} + f \overline{C_{P_{H_2O}}^T} + h \overline{C_{P_{N_2}}^T} + g \overline{C_{P_{O_2}}^T}) (T - 300) = Q \quad , \quad (17)$$

$\overline{C_{P_{CO_2}}}$, représentant les chaleurs spécifiques moyennes des différents constituants, entre 300 et T °K, à pression constante, conformément aux hypothèses faites .

Evidement, la valeur arbitraire choisie pour T n'est jamais exacte, et l'on trouve un écart $\pm \Delta Q$. Les valeurs des chaleurs spécifiques à la température T nous permettent d'écrire :

$$\frac{\pm \Delta Q}{\epsilon c_{p_{CO_2}}^T + r c_{p_{H_2O}}^T + h c_{p_{N_2}}^T + \xi c_{p_{O_2}}^T} = \pm \Delta T \quad (18)$$

on déduit de la température théorique en combustion complète:

$$T_I = T \pm \Delta T \quad (19)$$

Ce mode de calcul des températures des gaz est assez rapide. dû à HOPKINS il exige un choix judicieux de la température T .

IV - 4 PHENOMENE DE DISSOCIATION

La considération de la réaction idéal et complète écrite pour le mélange stoechiométrique n'est en réalité valable que l'orsque la température de fin de combustion est suffisamment basse pour que les molécules saturées produites soient valables.

Vers 2000 K apparaissent des décompositions endothermiques donnant lieu à des molécules telles que CO, OH , etc ; puis vers 5000 K, apparait l'ionisation des molécules, c'est-à-dire la séparation des électrons périphériques.

Le phénomène de dissociation se traduisant par une augmentation du nombre de molécules, formées, et aussi, sensible à la pression,

selon le principe du déplacement de l'équilibre, il croit donc quand la pression diminue et quand la température augmente, ce qui souligne son importance particulière pour les moteurs aéronautiques poussés fonctionnant à grande altitude .

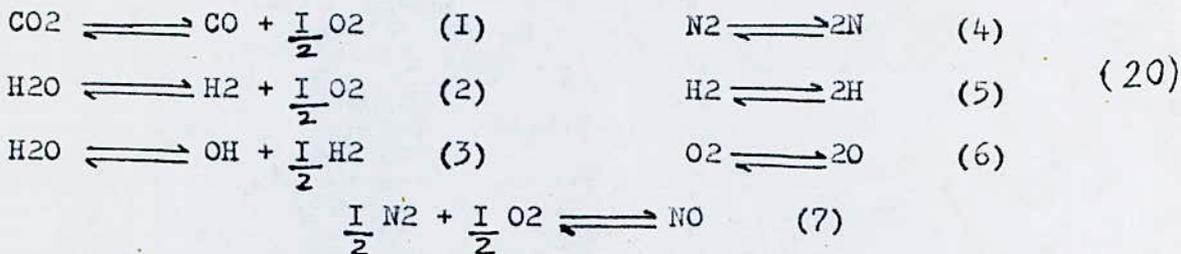
Pour la combustion d'hydrocarbures avec l'air, au moins lorsque ce dernier n'est pas chauffé notablement au préalable et qu'on a affaire à des mélanges pauvres de telle sorte que la température finale soit inférieure à 2000 K environ, on pourra toujours considérer comme valable le schéma réactionnel suivant lequel tout le combustible est brûlé en CO_2 et H_2O , l'exédent de comburant intervenant comme une masse gazeuse supplémentaire à chauffer .

Lorsque au contraire les températures atteintes en fin de combustion sont telles que le phénomène de dissociation devient notable, ou si la richesse est trop grande et qu'il se produise des imbrures, il est nécessaire de faire le calcul de la composition des gaz qui peut s'écarter d'une façon importante de la précédente.

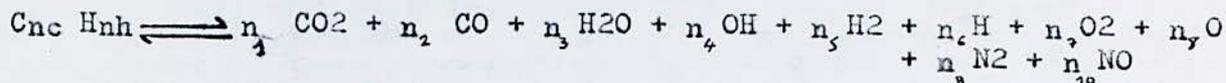
Ce calcul est effectué en supposant réalisées les conditions d'équilibre chimique, l'hypothèse qui risque d'être en défaut si la vitesse de déplacement des gaz est grande par rapport aux vitesses des réactions chimiques . On encadre alors le phénomène réel par la considération des deux cas extrêmes d'une évolution en constant équilibre chimique et d'une évolution seulement thermodynamique pour une composition figée à un état déterminé plus ou moins conventionnel

IV - 5 COMBUSTION EN TENANT COMPTE DES DISSOCIATION
MELANGE PAUVRE

Les atomes présents sont C, H, O, N et les réactions de dissociation entre, H₂O, CO₂, N₂, et O₂ sont les suivantes :



la réaction globale d'équilibre s'écrit :



Désignons par $e = [\text{CO}_2]$, $f = [\text{H}_2\text{O}]$, $h = [\text{N}_2]$, $g = [\text{O}_2]$, $j = [\text{CO}]$, $l = [\text{H}_2]$, $s = [\text{OH}]$, $p = [\text{NO}]$, les concentrations en atomes-gramme / gramme de mélange des divers produits de combustion, la somme de ces concentrations étant égale à Σ . Les équations de la balance matérielle du système sont :

$$\begin{array}{l}
 [\text{C}] = e + j ; \\
 [\text{O}] = 2e + j + f + 2g + s + p ; \\
 [\text{H}] = 2l + 2f + s ; \\
 [\text{N}] = 2h + p ;
 \end{array} \quad (21)$$

En supposant que la pression P, constante par hypothèse durant la combustion, est égale à une atmosphère, la loi d'action des masses appliquée aux équilibres chimiques (réactions de dissociation) nous

fournit les relations suivantes :

$$\frac{[CO][O_2]^{1/2}}{[CO_2]} = K_c = K_{pCO} \left(\frac{\Sigma}{P}\right)^{1/2}$$

ou :

$$\frac{e}{j} \left(\frac{\Sigma}{g}\right)^{1/2} = K_{CO_2} \quad \text{avec} \quad K_{CO} = \frac{I}{K_{pCO}} \quad (22)$$

et :

$$\frac{f}{I} \times \left(\frac{\Sigma}{g}\right)^{1/2} = K_{H_2O} \quad \text{en posant} \quad K_{H_2O} = \frac{I}{K_{pH_2O}}$$

$$\frac{f}{s} \times \left(\frac{\Sigma}{L}\right)^{1/2} = K_{OH} ; \quad K_{OH} = \frac{I}{K_{pOH}}$$

$$\frac{p}{(h)^{1/2}(g)^{1/2}} = K_{NO} ; \quad K_{NO} = K_{pNO} .$$

les valeurs des constantes d'équilibre à la pression de l'atmosphère sont données dans des tables en fonction de la température .

L'ensemble des équations (22) permet de déterminer les concentrations des différents constituants du mélange . Pour cela les concentrations p , s , l , et j peuvent être considérées comme petites, comparativement aux concentrations e , f , g et h .

Ayant déterminé les concentrations e_1 , f_1 , g_1 , h_1 et la température T_1 en combustion complète, on suppose que l'intervention des dissociations provoque un abaissement de température $\Delta T'$ et l'on choisit arbitrairement une température $T'_2 = T_1 - \Delta T'$.

Admettons que e_1, f_1, g_1 et h_1 totalisant Σ_1 soient solutions des équations (22); on peut alors calculer :

$$\begin{aligned} j_1 &= \frac{e_1}{K_{CO_2}} \left(\frac{\Sigma_1}{g} \right)^{1/2}; & l_1 &= \frac{f_1}{K_{H_2O}} \left(\frac{\Sigma_1}{g} \right)^{1/2}; \\ s_1 &= \frac{f_1}{K_{OH}} \left(\frac{\Sigma_1}{l} \right)^{1/2}; & p_1 &= K_{NO} (h_1 \times g_1)^{1/2}, \end{aligned} \quad (23)$$

les constantes d'équilibre étant prises à la température T_2' . Connaissant j_1, l_1, s_1 , et p_1 on corrige les valeurs e_1, f_1, g_1, h_1 supposées exactes en écrivant que :

$$\begin{aligned} e_2 &= [C] - j_1; & g_2 &= \frac{1}{2} ([O] - 2e_2 - f_2 - j_2 - s_2 - p_2); \\ f_2 &= [H] - 2l_1 - s_1; & h_2 &= \frac{1}{2} ([N] - p_1). \end{aligned}$$

A partir des valeurs e_2, f_2, g_2, h_2 ainsi obtenues, on calcule l_2, j_2, s_2, p_2 et l'on poursuit jusqu'à ce que :

$$s_n \approx s_{n-1} \quad p_n \approx p_{n-1} \quad j_n \approx j_{n-1} \quad l_n \approx l_{n-1}$$

Les concentrations étant ainsi déterminées, on calcule la température de combustion en effectuant le bilan énergétique du système, mais en tenant compte de tous les constituants du mélange.

On calcul $\pm \Delta Q$ et $\pm \Delta T$ et l'on en déduit $T_2 = T_2' \pm \Delta T$.

IV - 6 POSSIBILITÉ DE FORMATION D'AUTRES PRODUITS DE COMBUSTION

Nous pouvons signaler que certaines réactions pouvaient se produire à partir des différents produits de combustion formés.

Nous n'avons pas tenu compte de ces équilibres et nous avons admis que leur rôle était négligeable. on peut, ainsi, justifier ce point de vue par leurs concentrations qui sont extrêmement faibles

- formation de METHANE, CH_4 : à 2000 °K, $K_p = 10^6$ (mélange poudre)
- formation de ALDEHYDE FORMIQUE: $\text{HCHO} \% = 10^{-3}$ à 2000 °K
- formation de l'AMMONIAC: $\text{NH}_3 \% = 2 \times 10^{-7}$ à 2000 °K .

CHAPITRE V

THEORIE DE CALCUL DE L'ETAT DES PRODUITS DE COMBUSTION
TEMPERATURE & COMPOSITION
ADIABATIQUE CHIMIQUE

V. I INTRODUCTION - DEFINITION DU PROBLEME -

L'estimation de la température de combustion n'est possible que si la composition idéal d'équilibre est connue. Ce calcul résulte du bilan entre les calories dégagées par la réaction et celles absorbées par l'échauffement des produits de réaction, et par les processus endothermiques de formation de ces derniers .

Le système d'équations à résoudre comprend :

- les équations décrivant la balance matérielle du système, une pour chaque sorte d'atome;
- les équations décrivant (représentant) la loi d'action de masse appliquée aux équilibres chimiques de dissociation ;
- l'équation représentant le bilan énergétique du système .

La température des gaz de combustion dépend :

- de la nature du combustible et de la richesse du mélange ;
- de sa température d'injection et de son état (gaz, liquide, solide) ;
- de la température initiale de l'air;
- de la pression, celle-ci intervient sur les équilibres de dissociation influencant le bilan thermique final .

Le problème consiste à élaborer un programme de calcul permettant la résolution du système d'équation des relations des équilibres chimiques; ces calculs, qui permettent, à partir :

- de la composition du mélange carburé et des chaleurs de formation ;
 - des constantes des équilibres chimiques ;
 - des chaleurs de formation des produits résiduels ;
 - de la variation d'enthalpie molaire des produits de la réaction entre la température de référence(0°K OU 298°K) et la température des gaz de combustion ;
- de calculer la température des gaz brûlés, la composition du mélange résiduel, l'enthalpie globale et l'enthalpie sensible, etc .

V - 2 CALCUL DE L'ETAT DES PRODUITS DE COMBUSTION

Dans les conditions de l'équilibre thermodynamique, l'ensemble des propriétés thermodynamiques des produits de combustion est déterminé lorsque sont données :

- la composition chimique élémentaire en nombre d'atomes de chaque espèce (formule brute du mélange)
- deux grandeurs thermodynamiques indépendantes .

La première donnée fait intervenir la composition centésimale du mélange; elle dépend de celle du combustible, de celle du comburant, ainsi que de la richesse définie par le quotient de la quantité de combustible à celle du comburant divisé par la valeur de ce même rapport à la stoechiométrie .

Quant au couple des variables thermodynamiques à considérer, il est déterminé par la nature du problème à traiter; deux de ces couples se présentent le plus fréquemment en pratique .

Le plus simple est le couple pression-température et le couple pression-enthalpie qui est utilisé pour déterminer l'état de fin de combustion adiabatique à pression constante et notamment la température de la flamme .

Pour un couple de variables donné le problème consiste à calculer les grandeurs caractéristiques du mélange :

- la composition, ce qui fait intervenir autant d'inconnues qu'il y a d'espèces chimiques dans le mélange ;
- les grandeurs thermodynamiques, par exemple l'enthalpie H , l'entropie S , etc .

V - 3 METHODE DE CALCUL

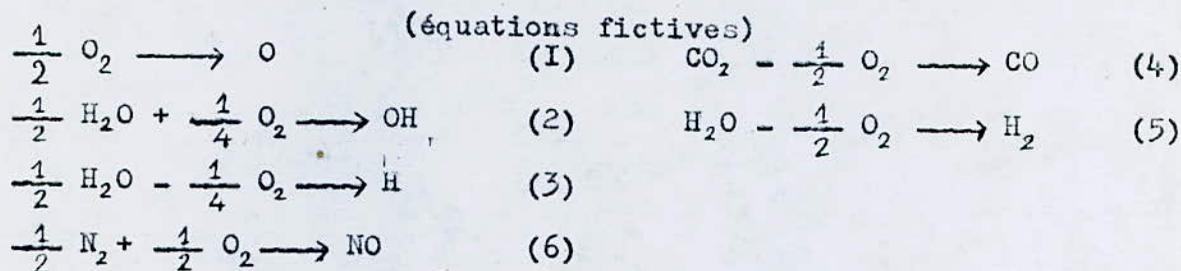
Dans les combustions avec l'air, on travaille à peu près toujours en mélange pauvre. C'est seulement ainsi que l'on peut espérer obtenir une combustion complète puisque le mélange ne peut jamais être parfaitement homogène. Il faut donc trop d'air pour brûler à coup sûr tout le combustible .

V - 3 - I HYPOTHESES

En plus des hypothèses sur les produits de la combustion sans dissociation :

- les gaz sont assimilés à des gaz parfaits .
- la combustion est adiabatique .
- les énergies cinétique et potentielle sont négligeables .

Les principales réactions de dissociation sont les suivantes :



pour la réaction globale de combustion avec dissociation (voir ch IV-5)

V - 3 - 2 BILAN DE MASSE

Il convient d'écrire avant tout les équations relatives à la composition du système car cette détermination est indispensable dans tous les cas pour le calcul des grandeurs thermodynamiques .

la composition du mélange dépend d'une façon générale de la température et de la pression (ou du volume spécifique) par l'intermédiaire des phénomènes de dissociation qui jouent un rôle important aux températures élevées.

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

$$g = \sum_m G_m N_m$$

le nombre de moles du composé m est N_m , sachant que les variables N_m ne sont pas indépendantes; elles sont liées par les équations de bilan exprimant que le nombre d'atomes de chaque élément reste constant :

$$f_j = \sum_m a_{jm} N_m - a_{j0} = 0$$

a_{jm} = nombre d'atomes d'espece j dans la molécule m ;

a_{j0} = nombre total d'atome j dans le mélange .

le nombre des équations $f_j = 0$ est égal à σ_j , nombre d'especes atomiques présentes dans le mélange .

le nombre total d'especes chimiques étant σ_m , le nombre de variables indépendantes est $(\sigma_m - \sigma_j)$.

A ces relations doivent etre adjoint celles qui traduisent la loi d'équilibre qui peut s'exprime au moyen des pressions partielles ou des nombres de molécules, les produits considérés étant assimilés à des gaz parfaits . par exemple, l'équilibre $CO_2 \rightleftharpoons CO + \frac{1}{2} O_2$ se traduit par :

$$\frac{P_{CO_2}}{P_{CO} \times P_{O_2}^{1/2}} = K_{CO_2}(T) \quad \text{ou avec} \quad P_{CO_2} = N_{CO_2} \frac{R T}{V}$$

$$\frac{R T}{V} = \frac{P}{N} = \frac{P_{CO_2}}{N_{CO_2}} = \frac{P_{CO}}{N_{CO}} = \frac{P_{O_2}}{N_{O_2}}$$

$$\text{d'ou } N_{CO_2} = k_{CO_2} (T) N_{CO} N_{O_2}^{\frac{1}{2}} \left(\frac{P}{N} \right)$$

on établie de la même manière une équation pour chacune des dissociations indiquées .

Le nombre total de moles à l'état gazeux est désigné par $N = \sum N_m$; avec les expressions précédentes, la loi d'équilibre peut se mettre sous la forme :

$$\frac{N_m}{\prod_i N_i^{a_{im}}} \left(\frac{P}{N} \right)^{(1 - \sum_i a_{im})} = K_m$$

Les constantes d'équilibres K_j ne dépendent que de la température ; et qu'elles peuvent être calculées à partir des grandeurs thermodynamique relatives aux constituants de chaque équilibre .

On est dès lors en possession, pour une valeur déterminée de R_c (richesse) et T_1 (température d'entrée), de équations permettant de déterminer les inconnues $N_1, N_2, \dots, N_{10}, N$.

Le système d'équations est de la forme:

$$\sum_m a_{jm} N_m - a_{j0} = 0 \quad (4 \text{ équations}) \quad (25)$$

$$\sum N_m = N \quad (1 \text{ équation}) \quad (26)$$

$$\frac{N_m}{\prod_i N_i^{a_{im}}} \left(\frac{P}{N} \right)^{(1 - \sum_i a_{im})} = K_m \quad (6 \text{ équations}) \quad (27)$$

V - 3 - 3 BILAN D'ÉNERGIE

La détermination des différentes formes d'énergie mises en jeu dans les transformations thermochimiques constitue toujours une application du premier principe de la thermodynamique, par l'utilisation de l'énergie interne.

Si l'on suppose que la combustion s'effectue sans échange de chaleur ni de travail avec l'extérieur, ce qui est très approximativement réalisé dans la pratique, la chaleur de réaction est entièrement utilisée à chauffer les gaz brûlés: l'enthalpie du fluide en déplacement est constante, de sorte que dans le diagramme $h-T$ si (1) représente l'état des gaz (mélange) avant combustion, le point (2) représente l'état des gaz brûlés, dont la température T_b correspond précisément à la conservation de l'enthalpie (voir fig. V.1)

Il s'agit alors d'une combustion isobare et adiabatique pour autant que les pertes par radiation soient négligeables, le problème revient à écrire la relation de base suivante relative aux enthalpies par gramme :

$$(H_{\text{réactifs}})_{T_i} = (H_{\text{produits}})_{T_b}$$

la température initiale des réactifs est désignée par T_i ; elle peut éventuellement être la température résultant du mélange de deux fractions se trouvant à des températures différentes .

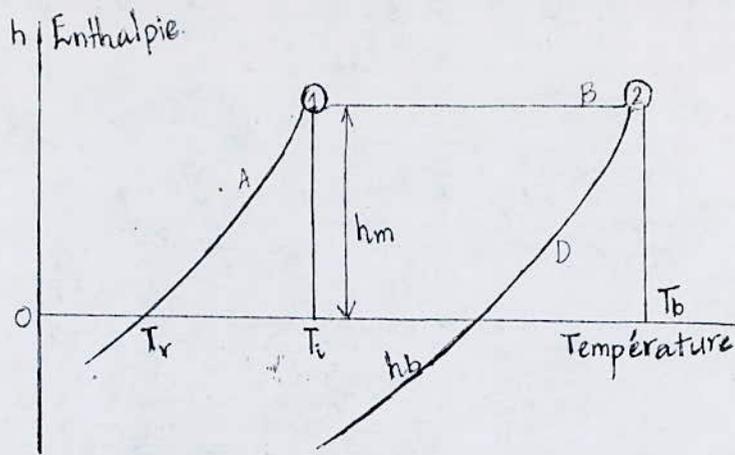


FIG V.I détermination de la température de fin de combustion

La température de fin de combustion adiabatique est donc l'abscisse du point ② qui peut être déterminée par le calcul ou par un procédé graphique .

Le calcul de l'état des produits de combustion, fait intervenir uniquement les différences entre les grandeurs thermodynamiques du système après et avant la réaction; il n'est donc pas nécessaire d'utiliser les valeurs absolues de ces grandeurs, mais des valeurs qui peuvent être définies par rapport à un système de référence convenablement choisi afin de faciliter les calculs . Généralement ce système de référence est choisi de telle sorte que toutes les enthalpies ou énergies internes soient positives .

Il est par ailleurs assez aisé de déterminer la chaleur de réaction qui à pression constante est égale à la variation d'enthalpie changée de signe. Cette dernière est généralement répertoriée à une température standard T_0 conventionnellement prise égale à la température ambiante (25°C) de sorte que pour une masse unitaire :

$$(H_{\text{réactifs}})_{T_0} - (H_{\text{produits}})_{T_0} = (Q_p)_{T_0} = -(\Delta H)_{\text{réactifs}}$$

Q_p désigne la chaleur de réaction par unité de masse du mélange et

à pression constante .

A une température différente de la température standard on peut écrire :

$$(\mathcal{Q})_T = (\mathcal{Q})_{T_0} + \int_{T_0}^T (C_p)_{\text{réactifs}} dT - \int_{T_0}^T (C_p)_{\text{produits}} dT .$$

V - 3 - 4 CALCUL DE LA TEMPERATURE DE FIN DE COMBUSTION ADIABATIQUE ET LA COMPOSITION

L'enthalpie du mélange étant déterminée, h_1 , le calcul consiste à déterminer la température pour laquelle l'enthalpie des gaz brûlés a cette valeur. Il suffit d'associer au système d'équations donnant la composition d'équilibre en fonction de la température cette dernière condition, ce qui donne :

.....////////.....

$$\sum_j a_{jm} N_m = a_{j0} \quad \dots\dots\dots (25)$$

$$\frac{N_m}{\prod_i N_i^{a_{im}}} \left(\frac{P}{N} \right)^{(1-\sum_i a_{im})} = K_m \quad \dots\dots\dots (27)$$

$$\sum N_m \mathcal{Q}_{im} + \sum N_m \int_0^T C_{p,m} dT = h_1 \quad \dots\dots\dots (28)$$

.....////////.....

- avec :
- a_{jm} - nombre d'atomes d'espece j dans la molécule m ;
 - a_{j0} - nombre total d'atome j dans le mélange;
 - N_m - nombre de moles du composé m;
 - N_i - nombre de moles du composé i;
 - N - nombre de moles à l'état gazeux; P - pression partielle
 - K_m - constante d'équilibre ;

- Q_m - enthalpie de formation molaire d'une espèce chimique m ;
 C_{pm} - chaleur spécifique de l'espèce i ($C_{pi} = f(T)$)
 h_1 - enthalpie du mélange frais .

V - 3 - 5 APPLICATION " HYDROCARBURE KEROSENE C_8H_{18} "

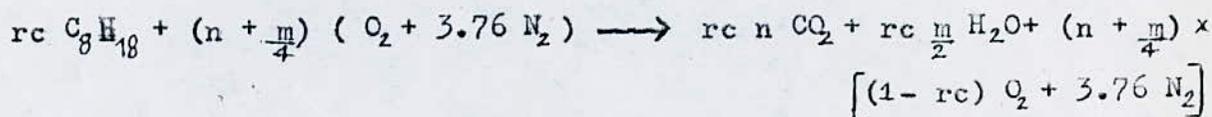
La méthode de calcul de l'état des gaz en fin de combustion, ainsi que les estimations théoriques des grandeurs nécessaires aux calculs ont fait l'objet des deux sections précédentes .

On considérera dans ce qui suit l'application à notre cas qui se pose souvent dans la pratique: à savoir la détermination de la composition et de la température des gaz ayant subi la combustion à pression constante .

On considère un foyer sphérique supposé parfaitement, homogène et adiabatique. On réalise, dans ce foyer , la combustion permanente d'un mélange d'octane (keroséne) (C_8H_{18}) dans l'air, à une pression d'une atmosphère à une richesse rc et à une température d'entrée T_1 (K) .

V - 3-5-I Calcul de la température de combustion complète

La combustion complète s'écrit :



avec $n = 8$, et $m = 18$

le nombre total de moles des produits de la combustion est :

$$NT = rc (m/4) + (n + m/4) 4.76 \quad \dots (29)$$

Le premier principe de la thermodynamique entre la température initiale T_1 et la température de combustion complète T_c s'écrit :

$$H(T_1) = H(T_c) \quad \dots (30)$$

$$\text{avec : } H(T_1) = rc H_{C_8} H_{18}(T_1) + (50/4) H_{O_2}(T_1) + (50/4) 3.76 H_{N_2}(T_1)$$

$$H(T_c) = rc \times 8 H_{CO_2}(T_c) + (18/2) rc H_2O(T_c) + (50/4) [(1 - rc) \times H_{O_2}(T_c) + 3.76 H_{N_2}(T_c)]$$

sachant que l'enthalpie de l'espèce est donnée par :

$$H_i(T) = H_i(T_0) + \int_{T_0}^T C_{pi}(T) dT \quad \dots (31)$$

$$\text{avec } C_{pi}(T) = \sum_{h=1}^5 A_{in} \left(\frac{T}{1000} \right)^n, \quad A_{in} : \text{coefficients donnés}$$

par une boucle de calcul on détermine T_c car :

- $H(T_1)$ est connue pour la température d'entrée T
- $H(T_c)$ est calculé par une boucle jusqu'à ce que le premier principe sera vérifié .

V-3-5-2 Calcul de la température et la composition à l'équilibre .

(méthode des constantes d'équilibre)

On voit que pour l'établissement d'un nombre d'équations suffisant à la description stoechiométrique du système, la connaissance des réactions simples qui s'y déroulent effectivement n'est pas indispensables. Il suffit de connaître tous les corps qui se présentent en quantités importantes dans le mélange réactionnel.

Parmi les corps on choisit un certain nombre de composants primaires de façon que chaque autre corps (composants secondaires) puisse être formé par une réaction hypothétique, mais exacte au point de vue stoechiométrique. Les équations de ces réactions de formations hypothétiques pour tous les composants secondaires forment alors un ensemble suffisant de réactions indépendantes du système.

Dans notre cas $\text{CO}_2, \text{H}_2\text{O}, \text{O}_2, \text{N}_2$ ont été choisis comme composants primaires (de base); à la température plus élevée, les produits de combustion à considérer sont : $\text{CO}_2, \text{CO}, \text{H}_2\text{O}, \text{OH}, \text{H}_2, \text{H}, \text{O}_2, \text{O}, \text{N}_2, \text{NO}$.

Indice $\rightarrow (1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10)$

*Equations de conservation des atomes (eq 25) nous donne :

les atomes présents sont C, H, O, N .

d'après la réaction globale d'équilibre :

$$n_1 + n_2 = 8 \text{ rc} \quad \dots\dots \text{atome de carbone}$$

$$2 n_3 + n_4 + n_6 + 2 n_5 = 18 \text{ rc} \dots\dots \text{atome de l'hydrogène}$$

$$2 n_1 + n_2 + n_3 + n_4 + 2 n_7 + n_8 + n_{10} = 2(8 + 18/4) \dots \text{atome d'oxygène}$$

$$2 n_9 + n_{10} = 2 \times 3.76 (8 + 18/4) \quad \dots\dots \text{atome d'azote}$$

Pour adopter ces équations aux équations d'équilibre, convenons de raisonner sur une mole de gaz brûlés. Ceci nous introduit

la condition supplémentaire : $\sum_{i=1}^{10} X_i = 1$.

Soit $X = \frac{1}{NT}$ la fraction molaire de combustible produit une mole de gaz brûlés, les équations de conservation des atomes sont alors :

$$X_{CO_2} + X_{CO} = \frac{8 \text{ rc}}{NT} \quad \dots(32)$$

$$2 X_{H_2O} + X_{OH} + X_H + 2X_{H_2} = \frac{18 \text{ rc}}{NT} \quad \dots(33)$$

$$2 X_{CO_2} + X_{CO} + X_{H_2O} + X_{OH} + 2 X_{O_2} + X_O + X_{NO} = \frac{2 \times (8 + 18/4)}{NT} \quad \dots(34)$$

$$2 X_{N_2} + X_{NO} = \frac{7.52 (8 + 18/4)}{NT} \quad \dots(35)$$

$$\text{avec } \sum_i X_i = 1 \quad \dots(36)$$

Equations d'équilibre s'écrivent d'après la forme générale

(éq 27) avec $P = P_0 = 1 \text{ atm}$.

$$X_O = K_{P_1} (X_{O_2})^{0.5} \quad \dots(37)$$

$$X_{OH} = K_{P_2} \times (X_{H_2O})^{0.5} (X_{O_2})^{0.25} \quad \dots(38)$$

$$X_H = K_{P_3} \times (X_{H_2O})^{0.5} (X_{O_2})^{-0.25} \quad \dots(39)$$

$$X_{CO} = K_{P_4} \times (X_{CO_2}) (X_{O_2})^{-0.5} \quad \dots(40)$$

$$X_{H_2} = K_{P_5} \times (X_{H_2O}) (X_{O_2})^{-0.5} \quad \dots(41)$$

$$X_{NO} = K_{P_6} \times (X_{N_2})^{0.5} (X_{O_2})^{0.5} \quad \dots(42)$$

nous avons maintenant onze inconnues X_i et NT , et les onze équations de (32) à (42).

Nous allons maintenant, pour trouver la température d'équilibre, calculer la composition et l'enthalpie du système pour deux températures, car dans la pratique, il est plus simple de faire le calcul pour des températures encadrant la température de fin de combustion cherchée et d'en déduire la valeur de cette température par application du premier principe; en considérant, ce qui est tout à fait justifié, que dans cet intervalle de température, l'enthalpie du mélange à l'équilibre varie linéairement en fonction de la température.

l'intervalle : $T_{c_1} = T_c$ et $T_{c_2} = T_c - 0.1 (T_c - T_1)$.

Pour résoudre le système d'équations, il est nécessaire de faire les calculs des constantes d'équilibre à T_{c_1} et T_{c_2} ; les expressions générales sont données par les relations suivantes :

$$\ln K_{pk} = - \frac{1}{RT} \Delta G_k^\circ (T) \quad ; \dots (43)$$

$$\Delta G_k^\circ (T) = \Delta H_k^\circ (T) - T \Delta S_k^\circ (T) \quad \dots (44)$$

$$\Delta H_k^\circ (T) = \sum \nu_{ki} H_i (T) \quad \dots (45)$$

$$H_i (T) = H_i^\circ (T_0) + \int_{T_0}^T C_{pi} dT \quad \dots (46) \quad ; \quad C_{pi} (T) = \sum_{h=1}^5 A_{ih} \left(\frac{T}{1000} \right)^n$$

$$\Delta S_k^\circ (T) = \sum \nu_{ki} S_i^\circ (T) \quad \dots (47)$$

$$S_i^\circ (T) = S_i^\circ (T_0) + \int_{T_0}^T \frac{C_{pi}}{T} dT \quad \dots (48) \quad \text{avec } T_0 = 298 \text{ K}$$

avec : K_{pk} : constante d'équilibre de l'équation d'équilibre k

ΔG_k° : variation de l'enthalpie libre de l'équation d'équilibre k

ΔH_k° : " " " de l'équation d'équilibre k

ΔS_k° : " " l'entropie " " " " " "

H_i et S_i : enthalpie et entropie de l'espece i .

C_{pi} : chaleur spécifique donnée en fonction de la température .

\$\$\$ Calcul des compositions à T_{c_1} et T_{c_2} :- il est maintenant possible de résoudre le système des équations (32) à (42) pour chacune des températures T_{c_1} et T_{c_2} .

On peut résoudre le système par approximations successives, en comme solutions initiales les valeurs de la combustion complète .

$NN_1 = 7.52 (8 + 18/4) \quad \dots \dots \dots$ NOMBRE TOTAL d'atomes d'azote

$NC_1 = 8 \text{ rc} \quad \dots \dots \dots$ " " " de carbone

$NO_1 = 2 (8 + I8/4)$ nombre total d'atomes de l'oxygène
 $NH_1 = I8 rc$ " " " d'hydrogène
 $NT_1 = (I8/4)rc + 4.76 (I8/4 + 8)$ le nombre total de moles des
 produits de la combustion
 posons: $N=8$; $M=I8$

conditions initiales sur les fractions molaires :

$XO_2(1) = ((N+M/4) * (1-RC)) / NT(1)$
 $XH_2O(1) = (RC * M / 2) / NT(1)$
 $XN_2(1) = ((N+M/4) * 3.76) / NT(1)$
 $XCO_2(1) = RC * N / NT(1)$
 $XH_2(1) = 0.$
 $XOH(1) = 0.$
 $XCO(1) = 0.$
 $XNO(1) = 0.$
 $A(1) = 2 * XCO_2(1) + XH_2O(1) + 2 * XO_2(1)$
 $B(1) = 2 * XH_2O(1)$
 $C(1) = XCO_2(1)$
 $D(1) = 2 * XN_2(1)$

pour l'approximation $(I+1)$ nous aurons les relations :

@-----* _ RELATIONS D'EQUILIBRES -----@

$XO(I+1) = KP(1) * (XO_2(I) ** 0.5)$
 $XOH(I+1) = KP(2) * ((XH_2O(I) ** 0.5) * (XO_2(I) ** 0.25))$
 $XH(I+1) = KP(3) * ((XH_2O(I) ** 0.5) * (XO_2(I) ** (-0.25)))$
 $XCO(I+1) = KP(4) * (XCO_2(I) * (XO_2(I) ** (-0.5)))$
 $XH_2(I+1) = KP(5) * (XH_2O(I) * (XO_2(I) ** (-0.5)))$
 $XNO(I+1) = KP(6) * ((XN_2(I) ** 0.5) * (XO_2(I) ** 0.5))$

C @-----* RELATIONS DE CONSERVATION D'ATOMES -----@

$A(I+1) = (NO / NT(I)) - XCO(I+1) - XOH(I+1) - XO(I+1) - XNO(I+1)$
 $B(I+1) = (NH / NT(I)) - XOH(I+1) - 2 * XH_2(I+1) - XH(I+1)$
 $C(I+1) = (NC / NT(I)) - XCO(I+1)$
 $XO_2(I+1) = (A(I+1) / 2) - (B(I+1) / 4) - C(I+1)$
 $XH_2O(I+1) = B(I+1) / 2$
 $XCO_2(I+1) = C(I+1)$
 $XN_2(I+1) = 1 - XH_2O(I+1) - XCO_2(I+1) - XO_2(I+1) - XCO(I+1) - XOH(I+1) - XH(I+1)$
 $1 \quad - XO(I+1) - XNO(I+1) - XH_2(I+1)$
 $D(I+1) = 2 * XN_2(I+1)$
 $NT(I+1) = NN / (2 * XN_2(I+1) + XNO(I+1))$

C @-----* -----FIN DU SYSTEME-----@

\$\$\$ Calcul de la température d'équilibre.

Pour déterminer la température de fin de combustion, il faut calculer l'enthalpie des produits de combustion à T_c et à T_e

$$H(T_{c_1}) = \sum_i n_i H_i(T_{c_1}) = NT \sum_i X_i H_i(T_{c_1})$$
$$H(T_{c_2}) = \sum_i n_i H_i(T_{c_2}) = NT \sum_i X_i H_i(T_{c_2})$$

la combustion étant supposée adiabatique, nous aurons:

1er principe : $H(T_1) = H(T_{eq})$

la température d'équilibre par linéarisation de l'enthalpie

$$\frac{T_{eq} - T_{c_2}}{T_{c_1} - T_{c_2}} = \frac{H(T_{eq}) - H(T_{c_2})}{H(T_{c_1}) - H(T_{c_2})} \quad \text{d'ou } T_{eq} = \dots$$

\$\$\$ Composition des gaz brûlés à la température d'équilibre.-

pour déterminer la composition des gaz brûlés à la température d'équilibre, il suffit de suivre le même raisonnement pour obtenir les constantes d'équilibre (methode déjà citée), les fractions molaires des différentes espèces sont alors calculées par la résolution du système d'équations (conservation d'atomes - d'équilibre)

pour les résultats --> voir fichier - 2eme VERSION-

CHAPITRE VI .

Interpretations

of

Conclusion .

VI - I INTERPRETATION DES FIGURES

En fig (I.1), on a représenté l'influence de la température du mélange à l'entrée T_e sur la variation de la température d'équilibre des gaz brûlés T_{eq} en fonction de la richesse; on note qu'un préchauffage du mélange est néfaste, car il augmente le pourcentage de molécules dissociées, on remarque sur la figure qu'au fur et à mesure de l'élévation de la température du mélange (surtout de l'air), les courbes de température en fonction de la richesse ont des formes de plus en plus plates, les maxima se déplacent vers les mélanges riches ($R_c > 1$). Les températures de fin de combustion n'augmentent pas aussi vite que la température d'entrée, car de nombreuses réactions endothermiques de dissociation absorbent une bonne partie de l'énergie apportée par le mélange préchauffé.

Les températures de fin de combustion du kérosène brûlant dans l'air sont voisines, pour les conditions d'injection normales, de 2300 K.

En fig (I.2^a), on a représenté l'évolution de la température théorique des mélanges air-kérosène au on peut voir l'écart existant entre la température d'équilibre et celle de combustion complète, dûe à l'effet de dissociation.

En fig (I.3), on a représenté la variation de l'enthalpie des produits de combustion en fonction de la température d'entrée et pour plusieurs valeurs de richesse du mélange, ce qui donne à des réseaux de courbes tels qu'il est représenté sur la figure. Il suffit de couper ces courbes par l'abscisse T pour avoir l'enthalpie des produits, pour chaque richesse du mélange.

Ces courbes fournissent immédiatement la remarque que l'enthalpie augmente avec l'augmentation de la température d'entrée.

Sur les figures (II.1) à (II.5) on a représenté les variations des concentrations des moles formées de toute espèces en fonction de la richesse, pour chaque températures d'entrées.

Pour une température donnée, nous pouvons voir clairement l'état de variation de chaque espèce des produits de combustion. nous examinerons successivement les divers produits de combustion formés :

- CO : la concentration en CO d'abord négligéable pour des richesses très faible (voisinage de 0.5) devient notable à partir de 0.64. la quantité de CO formée croit ensuite très rapidement, et elle continue d'augmenter au voisinage du R_c stoechiométrique par suite de la formation de CO de combustion.

- CO₂ : l'anhydride carbonique, produit permanent de la combustion du kérosène, est en proportion d'autant plus élevée que la quantité de combustible utilisée est plus grande. mais ceci n'est exact que jusqu'à la richesse stoechiométrique; pour des richesses plus riches

il se forme du CO de combustion aux dépens du CO₂ et la concentration de ce dernier décroît.

- NO : du fait de la valeur élevée de la constante d'équilibre , la quantité de NO formée est notable, où la concentration des autres produits de dissociation peut être considérée comme négligeable . La teneur en NO croît constamment avec la température , c'est-à-dire avec la quantité de combustible utilisée . Mais des richesses plus élevées les proportion de NO diminue, car il n'y a plus suffisamment d'oxygène pour que la réaction se produise dans de bonnes conditions ;

- H₂ : la quantité de H₂ formée commence à devenir à partir de 0.7 et croît ensuite constamment avec la richesse en combustible ;

- OH : même aux richesses pauvres la concentration OH est assez importante vis-à-vis des autres produits de dissociation. la concentration maximum est atteinte au richesse stoechiométrique ;

- O₂ : la concentration en oxygène diminue constamment avec la richesse . la quantité d'oxygène est nulle lorsque est stoechiométrique, dans le cas d'une combustion complète sans dissociations, avec le phénomène de dissociation , la concentration en O₂ devient nulle pour une valeur plus riche ;

- N₂ : varie faiblement avec la richesse , mais on remarque la diminution de la concentration constamment avec la richesse ;

- H₂O ET CO₂ : la quantité de vapeur d'eau formée est identique à la quantité de CO₂ tant que les concentrations en OH et H₂ ne sont pas notables. La concentration en H₂O croît avec la quantité de combustible utilisée jusqu'à un rapport (richesse) plus riche que le stoechiométrique, puis décroît ;

O ET H : on remarque les faibles proportions de ces espèces, mais on peut remarquer la faible augmentation de ces proportions en fonction de la richesse .

Pour voir l'influence de la température d'entrée sur la variation de la concentration de mole formée de chaque espèce , nous avons tracé les graphes (fig (III.I) à (III.IO)), d'où tirer les remarques:

- pour les espèces : NO , H, CO, H₂, O, OH

augmentation de la variation de la concentration de mole formée de tout ces espèces, dû au phénomène de dissociation à haute température .

- pour l'espèce : O₂

augmentation de la variation de la concentration de mole formée faible dû à la consommation de O₂ dans la combustion .

- pour les espèces : H₂O , CO₂

diminution de la variation des concentrations des moles formées, dû au phénomène de dissociation à haute température .

- pour l'espèce : N₂

faible diminution de la variation de la concentration de mole formée dû à l'augmentation notable de la température de combustion qui fait l'accroissement de l'enthalpie spécifique des réactifs .

En dernier lieu on a représenté fig(IV.I) et fig (V.I) à (V.5) , la première montre la variation des moles formées de toutes les espèces en fonction de la température d'entrée pour une richesse donnée ($R_c=0.7$), pour pouvoir observer l'allure de ces variations ,

Les deuxièmes figures montrent l'influence de la richesse sur la variation de la concentration des moles formées de chaque espèce, que vous pouvez conclure, que la richesse fait toujours tendre les variations des concentrations des moles formées dans le même sens (augmentation ou diminution) .

VI - 2 CONCLUSION

L'étude et les méthodes de calcul de l'état des gaz de fin de combustion (compositions et température), ainsi que les estimations théoriques des grandeurs nécessaires aux calculs ont fait l'objet de cette thèse .

Les résultats obtenus ont permis d'expliquer le processus de combustion du kérosène avec l'air dans la chambre, ainsi de les représentés en graphique sur les figures, en vue de se rendre compte de l'influence de plusieurs paramètres tels que la richesse, la température d'entrée , la température d'équilibre .

Il convient de rappeler que tous les calculs exposés dans cette thèse sont fondés sur l'hypothèse de l'équilibre thermodynamique ; néanmoins lorsque les évolutions sont très rapides, il peut être alors nécessaire de tenir compte des écarts à l'équilibre. Il s'agit alors de problèmes de cinétique propres.

00000000 -----000000000000
0
0 ORGANIGRAMME DE CALCUL
00000000 -----000000000000

1. INTRODUCTION

Dans les chapitres precedents nous avons presente les etapes necessaires a l'obtention de la temperature d'equilibre et la composition de fin de combustion. Dans celui-ci notre objectif est d'essayer d'aider le lecteur a franchir les frontiere entre la theorie et la mise en application de la methode de calcul sur ordinateur .

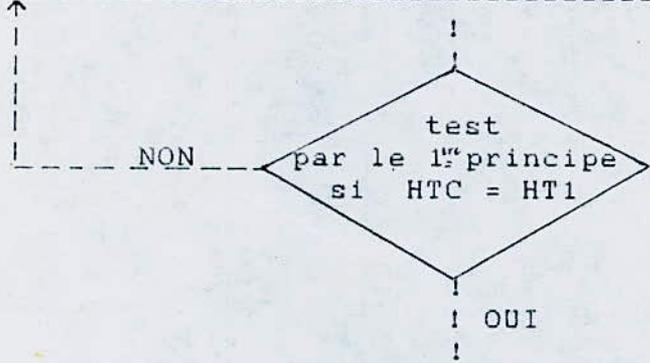
```
!-----!  
!   DEBUT   !  
!-----!  
!  
!  
!
```

```
!-----!  
! Introduction des donnees :                               !  
! -coefficients Ain du polynome de la chaleur specifique cp !  
!                                $cp = \text{som } A_{in} (T/1000)^{**} n$  !  
! -enthalpie de formation de chaque espece                !  
! -entropie standart de chaque espece.                   !  
! -la temperature d'entree T1.                             !  
! -la richesse du melange.                                 !  
!-----!
```

```
!  
!  
!  
!-----!  
! 1.Calcul de la temperature de combustion complete !  
!  
!  
!-----!
```

```
!-----!  
!1.1 Calcul de l'enthalpie des reactifs a l'entree HT1    !  
!-----!
```

```
!-----!  
!1.2 Calcul de l'enthalpie des produits HTC .             !  
! - par une boucle de calcul.                             !  
! TC=1000,3500,.05    Tp de combustion complete         !  
! HTC : enthalpie de combustion complete .                !  
!-----!
```



```
!-----!  
! IMPRIMER TC      !  
!-----!
```

Suite 1

! 2. Pour une combustion adiabatique (avec dissociation) !
! !
! !

! 2.1 Interpolation de la temperature TC entre !
! TC1(1) & TC1(2) !
! TC1(1)=TC TC1(2)=TC-0.1(TC-T1) !
! !

! 2.2 calculs des enthalpies et entropie de chaque espece pour !
! les deux temperatures. S(I) & H(I) !
! !

! 2.3 Introduction des equations fictives !
! !

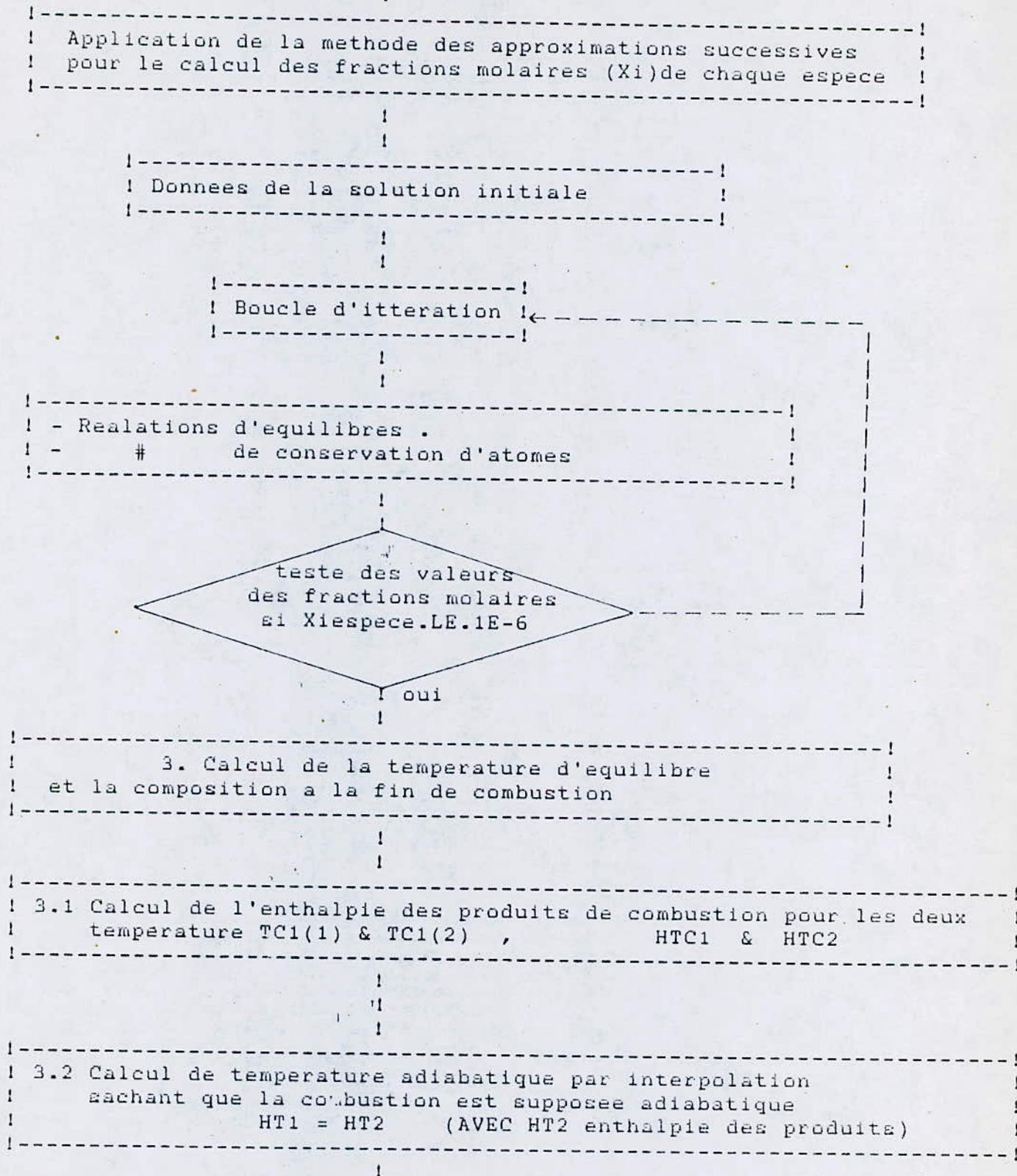
! 2.4 Calculs de la variation d'enthalpie et d'entropie de !
! chaque equation fictive DELTAH(I) & DELATS(I) !
! !

! 2.5 Calculs de la variation d'enthalpie libre pour chaque !
! equation fictive DELTAG(I) !
! !

! 2.6 Calcul des constantes d'equilibre (KP) POUR CHAQUE !
! equation fictive !
! !

! 2.6 Resolution du systeme d'equations forme par : !
! - relations d'equilibre !
! - # de conservation d'atomes !
! !

Suite 2



Suite 3.

Suit 3

```
!-----!  
! TC1 -----> HTC1 !  
! T2 -----> HT2 !  
! TC2 -----> HTC2 !  
!-----!
```

```
!-----!  
! 3.3 Calcul de la composition a la temperature d'equilibre !  
!-----!
```

```
!-----!  
! 4. Impression des resultats !  
! sous de versions (voir fichire des resultats) !  
!-----!
```

* SOUS PROGRAMME FUNCTION :

```
!-----!  
! sous programme function pour le calcul de l'enthalpie de n'importe !  
! quel espece !  
!-----!
```

```
!-----!  
! sous programme function pour le calcul de l'entropie de n'importe !  
! quel espece !  
!-----!
```

----///// FIN DE PROGRAMME /////----

C !		!	!	!	!
C !	TC	!	K	!	TEMPERATURE DE COMBUSTION COMPLETE . !
C !		!		!	!
C !	TC1(1),TC1(2)	!	K	!	TEMPERATURES D'INTERPOLATIONS . !
C !		!		!	!
C !	TC1(3)=T2	!	K	!	TEMPERATURE D'EQUILIBRE . !
C !		!		!	!
C !	HTC	!	KJ	!	ENTHALPIE DES PRODUITS A TC . !
C !		!		!	!
C !	HT1	!	KJ	!	ENTHALPIE DES PRODUITS A T1 . !
C !		!		!	!
C !	HTC1,HTC2	!	KJ	!	ENTHALPIE DES PRODUITS A TC1 ET TC2. !
C !		!		!	!
C !	HT2	!	KJ	!	ENTHALPIE DES PRODUITS A T2 . !
C !		!		!	!
C !	N , M	!	--	!	NOMBRES D'ATOMES DE L'HYDROGENE ET !
C !		!		!	DE CARBONE DANS L'HYDROCARBURE . !
C !		!		!	!
C !	NN,NC,NO,NH	!	--	!	NOMBRES TOTAUX D'ATOMES RESPECTIVEM- !
C !		!		!	ENT D'AZOTE ,DE CARBONE ,D'OXYGENE !
C !		!		!	ET D'HYDROGENE . !
C !		!		!	!
C !	NT	!	--	!	NOMBRE DE MOLE TOTAL . !
C !		!		!	!
C !	XO2,XH2O,XN2,	!		!	FRACTIONS MOLAIRES DE : O2,H2O,N2, !
C !	XCO2,XH2,XOH,	!	--	!	CO2,H2,OH,CO,NO,O,H . !
C !	XCO ,XNO,XO,XH1	!		!	!
C !		!		!	!
C !		!		!	!

-----&

&-----DEFINITIONS-----&

INDICE	ESPECE
1	CO2
2	CO
3	H2O
4	O2
5	N2
6	H2
7	OH
8	H
9	O
10	NO
11	C8H18

-----&

```

REAL A1(1:6),A2(1:6),A3(1:6),A4(1:6),A5(1:6),A6(1:6)
REAL A7(1:6),A8(1:6),A9(1:6),A10(1:6),A11(1:6)
REAL HO(11),SO(11),H(11),S(11),DELTAH(6),DELTAS(6),DELTAG(6)
REAL KP(6),T1,X(10),TC1(3),RC
REAL XCO2(100),XCO(100),XH2O(100),XO2(100),XN2(100),XH2(100)
REAL XOH(100),XH(100),XO(100),XNO(100),NT(100),A(100),B(100)
REAL C(100),D(100)

```

```

C ..... DONNEES DE CO2.....
DATA HO(1),SO(1),(A1(I),I=1,6)/-94.05,51.061,5.275,15.61,
1 -11.87,4.942,-1.074,0.09520/
C .....DONNEES DE O2.....
DATA HO(4),SO(4),(A4(I),I=1,6)/0.,49.003,5.126,6.942,-5.861,
1 2.684,-0.6100,0.05467/
C .....DONNEES DE N2.....
DATA HO(5),SO(5),(A5(I),I=1,6)/0.,45.767,6.455,0.5954,1.980,
1 -1.672,0.5120,-0.05573/
C .....DONNEES DE H2O.....
DATA HO(3),SO(3),(A3(I),I=1,6)/-57.80,45.06,8.049,-1.620,
1 6.414,-3.895,0.9993,-0.09627/
C .....DONNEES DE CO .....
DATA HO(2),SO(2),(A2(I),I=1,6)/-26.42,47.301,6.07,2.155,0.1937,
1 -0.729,0.2733,-0.03227/
C .....DONNEES DE H2 .....
DATA HO(6),SO(6),(A6(I),I=1,6)/0.,31.211,7.136,-1.444,2.395,
1 -1.066,0.2148,-0.01695/
C .....DONNEES DE OH .....
DATA HO(7),SO(7),(A7(I),I=1,6)/9.492,43.888,8.076,-4.488,6.405,
1 -3.430,0.8507,-0.08133/
C .....DONNEES DE H .....
DATA HO(8),SO(8),(A8(I),I=1,6)/52.10,27.393,4.968,0.,0.,0.,0.,0./
C .....DONNEES DE O .....
DATA HO(9),SO(9),(A9(I),I=1,6)/59.55,38.469,5.568,-1.507,1.549,
1 -0.7883,0.1962,-0.01888/
C .....DONNEES DE NO .....
DATA HO(10),SO(10),(A10(I),I=1,6)/21.58,50.339,5.839,3.642,
1 -1.617,0.2387,0.02933,-0.008533/
C .....DONNEES DE C8H18.....
DATA HO(11),SO(11),(A11(I),I=1,6)/-53.46,110.82,-5.004,207.0,
1 -143.6,57.51,-12.97,1.237/

```



```

C @-----@
C @ 2.1.2 _   CALCULS DE DELTAH(I) ET DE DELTAS(I) @
C @           POUR CHAQUE EQUATION FICTIVE ..... @
C @-----@

```

```

C @-----DELTAH...(VARIATION D'ENTHALPIE)-----@
DELTAH(1)=H(9)-(0.5*H(4))
DELTAH(2)=H(7)-(0.5*H(3))-(0.25*H(4))
DELTAH(3)=H(8)-(0.5*H(3))+(0.25*H(4))
DELTAH(4)=H(2)-H(1)+(0.5*H(4))
DELTAH(5)=H(6)-H(3)+(0.5*H(4))
DELTAH(6)=H(10)-(0.5*H(5))-(0.5*H(4))

```

```

C @-----DELTAS...(VARIATION D'ENTROPIE)-----@
DELTAS(1)=S(9)-(0.5*S(4))
DELTAS(2)=S(7)-(0.5*S(3))-(0.25*S(4))
DELTAS(3)=S(8)-(0.5*S(3))+(0.25*S(4))
DELTAS(4)=S(2)-S(1)+(0.5*S(4))
DELTAS(5)=S(6)-S(3)+(0.5*S(4))
DELTAS(6)=S(10)-(0.5*S(5))-(0.5*S(4))

```

```

C @-----@
C @ 2.1.3_   CALCULS DE DELTAG...(VARIATION D'ENTHALPIE LIBRE) @
C @           DE CHAQUE EQUATION FICTIVE @
C @-----@

```

```

DO 95 J=1,6
DELTAG(J)=DELTAH(J)-(TC1(JJ)*DELTAS(J))

```

```

C @-----KP...(CONSTANTES D'EQUILIBRES)-----@
C @-----DE CHAQUE EQUATION FICTIVE-----@
C

```

```

R=8.314E-03
KP(J)=EXP((-1./(R*TC1(JJ)))*DELTAG(J))
CONTINUE

```

```

95 @-----@
C

```

```

C @-----@
C @ 2.2_   RESOLUTION DU SYSTEME @
C @-----SYSTEME DES EQUATIONS EST FORME PAR :-----@
C @-----* - RELATIONS D'EQUILIBRES @
C @-----* - RELATIONS DE CONSERVATION D'ATOMES @
C @-----RESOLUTION : PAR APPROXIMATIONS SUCCESSIVES @
C @--SOLUTIONS INITIALES: VALEURS DE LA COMBUSTION COMPLETE @
C @-----@

```

```

C @--SOLUTIONS INITIALES: VALEURS DE LA COMBUSTION COMPLETE @
N=8.
M=18.
NN=2*(N+M/4)*3.76
NC=RC*N
NO=2*(N+M/4)

```

```

NH=RC*M
NT(1)=RC*(M/4)+(N+M/4)*4.76
XO2(1)=((N+M/4)*(1-RC))/NT(1)
XH2O(1)=(RC*M/2)/NT(1)
XN2(1)=((N+M/4)*3.76)/NT(1)
XCO2(1)=RC*N/NT(1)
XH2(1)=0.
XOH(1)=0.
XCO(1)=0.
XNO(1)=0.
A(1)=2*XCO2(1)+XH2O(1)+2*XO2(1)
B(1)=2*XH2O(1)
C(1)=XCO2(1)
D(1)=2*XN2(1)
DO 305 I=1,99

```

C @-----* 2.2.2_ RELATIONS D'EQUILIBRES -----@

```

XO(I+1)=KP(1)*(XO2(I)**0.5)
XOH(I+1)=KP(2)*((XH2O(I)**0.5)*(XO2(I)**0.25))
XH(I+1)=KP(3)*((XH2O(I)**0.5)*(XO2(I)**(-0.25)))
XCO(I+1)=KP(4)*(XCO2(I)*(XO2(I)**(-0.5)))
XH2(I+1)=KP(5)*(XH2O(I)*(XO2(I)**(-0.5)))
XNO(I+1)=KP(6)*((XN2(I)**0.5)*(XO2(I)**0.5))

```

C @-----*2.2.3_ RELATIONS DE CONSERVATION D'ATOMES -----@

```

A(I+1)=(NO/NT(I))-XCO(I+1)-XOH(I+1)-XO(I+1)-XNO(I+1)
B(I+1)=(NH/NT(I))-XOH(I+1)-2*XH2(I+1)-XH(I+1)
C(I+1)=(NC/NT(I))-XCO(I+1)
XO2(I+1)=(A(I+1)/2)-(B(I+1)/4)-C(I+1)
XH2O(I+1)=B(I+1)/2
XCO2(I+1)=C(I+1)
XN2(I+1)=1-XH2O(I+1)-XCO2(I+1)-XO2(I+1)-XCO(I+1)-XOH(I+1)-XH(I+1)
1 -XO(I+1)-XNO(I+1)-XH2(I+1)
D(I+1)=2*XN2(I+1)
NT(I+1)=NN/(2*XN2(I+1)+XNO(I+1))

```

C @-----FIN DU SYSTEME-----@

```

C @-----* 2.2.4_TESTE DES VALEURS-----@
  IF((XO(I+1)-XO(I)).LE.1E-6) GOTO290
  GOTO305
290  IF((XOH(I+1)-XOH(I)).LE.1E-6) GOTO291
  GOTO305
291  IF((XH(I+1)-XH(I)).LE.1E-6) GOTO292
  GOTO305
292  IF((XCO(I+1)-XCO(I)).LE.1E-6) GOTO293
  GOTO305
293  IF((XH2(I+1)-XH2(I)).LE.1E-6) GOTO294
  GOTO305
294  IF((XNO(I+1)-XNO(I)).LE.1E-6) GOTO295
  GOTO305
295  IF((A(I+1)-A(I)).LE.1E-6) GOTO296
  GOTO305
296  IF((B(I+1)-B(I)).LE.1E-6) GOTO297
  GOTO305
297  IF((C(I+1)-C(I)).LE.1E-6) GOTO298
  GOTO305
298  IF((XO2(I+1)-XO2(I)).LE.1E-6) GOTO300
  GOTO305
300  IF((XH20(I+1)-XH20(I)).LE.1E-6) GOTO301
  GOTO305
301  IF((XCO2(I+1)-XCO2(I)).LE.1E-6) GOTO302
  GOTO305
302  IF((XN2(I+1)-XN2(I)).LE.1E-6) GOTO303
  GOTO305
303  IF((D(I+1)-D(I)).LE.1E-6) GOTO304
  GOTO305
304  IF((NT(I+1)-NT(I)).LE.1E-6) GOTO306
305  CONTINUE
306  IF(JJ.EQ.3)GOTO402

```



```

WRITE (2,350) T2,HT2
350  FORMAT (2X,66(1H-),/,2X,1H!,2X,'LA TEMPERATURE D''EQUILIBRE EST:',
*2X,'T2=',F8.2,2X,'[K]',12X,1H!/,2X,66(1H-),/,2X,1H!,2X,'L''ENTHALP
*IE DES PRODUITS A L''EQUILIBRE :',2X,'HT2=',F9.3,2X,'[KJ]',3X,
*1H!/,2X,66(1H-))

```

```

C @-----CALCUL DE LA COMPOSITION A LA TEMPERATURE -----@
C @-----D'EQUILIBRE -----@

```

```

JJ=3
TC1(3)=T2
GOTO92
402  WRITE (2,307) I
307  FORMAT (2X,66(1H-),/,2X,1H!,2X,'NOMBRE D ''ITERATIONS=',I3,
1 38X,1H!/,2X,66(1H-))
WRITE (2,308) NT(I)
308  FORMAT (2X,1H!,2X,'NOMBRE DE MOLES TOTAL=',F6.3,
1 34X,1H!/,2X,66(1H-),/)
WRITE(2,399)
399  FORMAT(2X,66(1H-),/,2X,1H!, ' LES CONCENTRATIONS DES ELEMENTS A
1 L''EQUILIBRE:',16X,1H!/,2X,66(H-))
WRITE(2,400)
400  FORMAT(2X,1H!,' XO ',1H!,' XOH ',1H!,'
1 ' XH ',1H!,' XCO ',1H!,' XH2 ',
2 1H!/,2X,66(1H-))
WRITE(2,309) XO(I),XOH(I),XH(I),XCO(I),XH2(I)
WRITE(2,401)
401  FORMAT(2X,1H!,' XNO ',1H!,' XO2 ',1H!,'
1 ' XH2O ',1H!,' XCO2 ',1H!,' XN2 ',
2 1H!/,2X,66(1H-))
309  FORMAT(2X,1H!,5(1X,E10.4,1X,1H!),/,2X,66(1H-))
WRITE(2,309) XNO(I),XO2(I),XH2O(I),XCO2(I),XN2(I)
1100  CONTINUE
1000  CONTINUE

```

```

C @-----@
CALL FIN
STOP
END
C @-----FIN DU PROGRAMME PRINCIPAL -----@

```

```

C @----- FONCTION DE CALCUL DE L'ENTHALPIE -----@
REAL FUNCTION HP(X,T,HOO)
REAL X(1:6),HOO,T
TO=298.16
S=HOO
DO 10 I=1,6
S=S+(X(I)/(I))*(((T/1000)**(I))-((TO/1000)**(I)))
10  CONTINUE
HP=S*4.18
RETURN
END
C @-----@

```

```

C @----- FONCTION DE CALCUL DE L'ENTROPIE -----@
REAL FUNCTION SP(X,T,S00)
REAL X(1:6),S00,T
TO=298.16
S1=S00+X(1)*(LOG(T/TO))
DO 10 I=2,6
S1=S1+(X(I)/(I-1))*(((T/1000)**(I-1))-((TO/1000)**(I-1)))
10 CONTINUE
SP=S1*4.1855*1E-3
RETURN
END
C @-----@

```

```

SUBROUTINE CALCUL
PRINT*, '1'
PRINT*, CHAR(27), '[2J'
PRINT*, char(27), '[5m'
PRINT*, CHAR(27), '#3*****'
PRINT*, CHAR(27), '#4*****'
PRINT*, char(27), '#3* -----CALCUL EN COURS. *'
PRINT*, char(27), '#4* -----CALCUL EN COURS. *'
PRINT*, char(27), '#3* ----- PATIENTEZ! *'
PRINT*, char(27), '#4* ----- PATIENTEZ! *'
PRINT*, CHAR(27), '#3*****'
PRINT*, CHAR(27), '#4*****'
WRITE(*,1)
FORMAT(///)
PRINT*, char(27), '[0m'
RETURN
END
SUBROUTINE FIN
PRINT*, '1'
PRINT*, CHAR(27), '[2J'
PRINT*, char(27), '[5m'
PRINT*, CHAR(27), '#3*****'
PRINT*, CHAR(27), '#4*****'
PRINT*, char(27), '#3* -----FIN DE VISITE. MERCI *'
PRINT*, char(27), '#4* -----FIN DE VISITE. MERCI *'
PRINT*, CHAR(27), '#3*****'
PRINT*, CHAR(27), '#4*****'
PRINT*, CHAR(27), '[0m'
RETURN
END
1

```



```

-----
! LA TEMPERATURE DU MELANGE A L'ENTREE: T1= 300.00 [K] !
-----
! LA RICHESSE DU MELANGE A L'ENTREE : RC= 0.600 !
-----
! LA TEMPERATURE DE COMBUSTION COMPTETE EST: TC= 1711.06 [K] !
-----
! LA TEMPERATURE D'EQUILIBRE EST: T2= 1591.41 [K] !
-----
! L'ENTHALIE DES PRODUITS A L'EQUILIBRE : HT2= -130.772 [KJ] !
-----
! NOMBRE D 'ITERATIONS= 7 !
-----
! NOMBRE DE MOLES TOTAL=59.502 !
-----

```

```

-----
! LES CONCENTRATIONS DES ELEMENTS A L'EQUILIBRE: !
-----
! XO | XOH | XH | XCO | XH2 |
-----
! 0.4104E-05 | 0.1243E-03 | 0.6568E-07 | 0.4050E-05 | 0.1663E-05 |
-----
! XNO | XO2 | XH2O | XCO2 | XN2 |
-----
! 0.1297E-02 | 0.9176E-01 | 0.8397E-01 | 0.6722E-01 | 0.7556E+00 |
-----

```

-----//---
-----//---

```

-----
! LA TEMPERATURE DU MELANGE A L'ENTREE: T1= 300.00 [K] !
-----
! LA RICHESSE DU MELANGE A L'ENTREE : RC= 0.700 !
-----
! LA TEMPERATURE DE COMBUSTION COMPTETE EST: TC= 1897.45 [K] !
-----
! LA TEMPERATURE D'EQUILIBRE EST: T2= 1825.01 [K] !
-----
! L'ENTHALIE DES PRODUITS A L'EQUILIBRE : HT2= -153.083 [KJ] !
-----
! NOMBRE D 'ITERATIONS= 10 !
-----
! NOMBRE DE MOLES TOTAL=60.014 !
-----

```

```

-----
! LES CONCENTRATIONS DES ELEMENTS A L'EQUILIBRE: !
-----
! XO | XOH | XH | XCO | XH2 |
-----
! 0.4059E-04 | 0.6027E-03 | 0.2322E-05 | 0.8841E-04 | 0.2642E-04 |
-----
! XNO | XO2 | XH2O | XCO2 | XN2 |
-----
! 0.2610E-02 | 0.6523E-01 | 0.9965E-01 | 0.8323E-01 | 0.7485E+00 |
-----

```

```

! LA TEMPERATURE DU MELANGE A L'ENTREE: T1= 300.00 [K]
! LA RICHESSE DU MELANGE A L'ENTREE : RC= 0.800
! LA TEMPERATURE DE COMBUSTION COMPTETE EST: TC= 2074.92 [K]
! LA TEMPERATURE D'EQUILIBRE EST: T2= 2034.32 [K]
! L'ENTHALIE DES PRODUITS A L'EQUILIBRE : HT2= -175.395 [KJ]

```

```

! NOMBRE D 'ITERATIONS= 10
! NOMBRE DE MOLES TOTAL=60.566

```

```

! LES CONCENTRATIONS DES ELEMENTS A L'EQUILIBRE:

```

XO	XOH	XH	XCO	XH2
0.1778E-03	0.1722E-02	0.3071E-04	0.8827E-03	0.2142E-03
XNO	XO2	XH2O	XCO2	XN2
0.3727E-02	0.3945E-01	0.1145E+00	0.9818E-01	0.7411E+00

```

-----////-
-----////-

```

```

! LA TEMPERATURE DU MELANGE A L'ENTREE: T1= 300.00 [K]
! LA RICHESSE DU MELANGE A L'ENTREE : RC= 0.950
! LA TEMPERATURE DE COMBUSTION COMPTETE EST: TC= 2326.26 [K]
! LA TEMPERATURE D'EQUILIBRE EST: T2= 2219.98 [K]
! L'ENTHALIE DES PRODUITS A L'EQUILIBRE : HT2= -208.862 [KJ]

```

```

! NOMBRE D 'ITERATIONS= 12
! NOMBRE DE MOLES TOTAL=61.567

```

```

! LES CONCENTRATIONS DES ELEMENTS A L'EQUILIBRE:

```

XO	XOH	XH	XCO	XH2
0.3684E-03	0.3205E-02	0.2493E-03	0.6468E-02	0.1493E-02
XNO	XO2	XH2O	XCO2	XN2
0.3387E-02	0.1355E-01	0.1348E+00	0.1072E+00	0.7292E+00

```

-----
| LA TEMPERATURE DU MELANGE A L'ENTREE: T1= 400.00 [K] |
-----
| LA RICHESSE DU MELANGE A L'ENTREE : RC= 0.600 |
-----
| LA TEMPERATURE DE COMBUSTION COMPTETE EST: TC= 1787.49 [K] |
-----
| LA TEMPERATURE D'EQUILIBRE EST: T2= 1671.53 [K] |
-----
| L'ENTHALIE DES PRODUITS A L'EQUILIBRE : HT2= 52.971 [KJ] |
-----
| NOMBRE D 'ITERATIONS= 7 |
-----
| NOMBRE DE MOLES TOTAL=59.504 |
-----

```

```

-----
| LES CONCENTRATIONS DES ELEMENTS A L'EQUILIBRE: |
-----
| XO | XOH | XH | XCO | XH2 |
-----
| 0.1030E-04 | 0.2242E-03 | 0.2339E-06 | 0.1116E-04 | 0.4122E-05 |
-----
| XNO | XO2 | XH2O | XCO2 | XN2 |
-----
| 0.1796E-02 | 0.9148E-01 | 0.8391E-01 | 0.6721E-01 | 0.7554E+00 |
-----

```

-----//---
-----//---

```

-----
| LA TEMPERATURE DU MELANGE A L'ENTREE: T1= 400.00 [K] |
-----
| LA RICHESSE DU MELANGE A L'ENTREE : RC= 0.700 |
-----
| LA TEMPERATURE DE COMBUSTION COMPTETE EST: TC= 1972.42 [K] |
-----
| LA TEMPERATURE D'EQUILIBRE EST: T2= 1899.76 [K] |
-----
| L'ENTHALIE DES PRODUITS A L'EQUILIBRE : HT2= 32.835 [KJ] |
-----
| NOMBRE D 'ITERATIONS= 10 |
-----
| NOMBRE DE MOLES TOTAL=60.023 |
-----

```

```

-----
| LES CONCENTRATIONS DES ELEMENTS A L'EQUILIBRE: |
-----
| XO | XOH | XH | XCO | XH2 |
-----
| 0.7836E-04 | 0.9179E-03 | 0.5782E-05 | 0.1822E-03 | 0.5070E-04 |
-----
| XNO | XO2 | XH2O | XCO2 | XN2 |
-----
| 0.3288E-02 | 0.6485E-01 | 0.9945E-01 | 0.8312E-01 | 0.7481E+00 |
-----

```

! LA TEMPERATURE DU MELANGE A L'ENTREE: T1= 400.00 [K] !
! LA RICHESSE DU MELANGE A L'ENTREE : RC= 0.800 !
! LA TEMPERATURE DE COMBUSTION COMPLETE EST: TC= 2148.64 [K] !

! LA TEMPERATURE D'EQUILIBRE EST: T2= 2101.46 [K] !
! L'ENTHALIE DES PRODUITS A L'EQUILIBRE : HT2= 12.700 [KJ] !

! NOMBRE D 'ITERATIONS= 10
! NOMBRE DE MOLES TOTAL=60.602

! LES CONCENTRATIONS DES ELEMENTS A L'EQUILIBRE:

XO	XOH	XH	XCO	XH2
0.2873E-03	0.2335E-02	0.5973E-04	0.1484E-02	0.3438E-03
XNO	XO2	XH2O	XCO2	XN2
0.4407E-02	0.3925E-01	0.1140E+00	0.9752E-01	0.7403E+00

! LA TEMPERATURE DU MELANGE A L'ENTREE: T1= 400.00 [K] !
! LA RICHESSE DU MELANGE A L'ENTREE : RC= 0.950 !
! LA TEMPERATURE DE COMBUSTION COMPLETE EST: TC= 2398.33 [K] !

! LA TEMPERATURE D'EQUILIBRE EST: T2= 2271.41 [K] !
! L'ENTHALIE DES PRODUITS A L'EQUILIBRE : HT2= -17.503 [KJ] !

! NOMBRE D 'ITERATIONS= 12
! NOMBRE DE MOLES TOTAL=61.671

! LES CONCENTRATIONS DES ELEMENTS A L'EQUILIBRE:

XO	XOH	XH	XCO	XH2
0.5188E-03	0.3954E-02	0.3775E-03	0.8624E-02	0.1959E-02
XNO	XO2	XH2O	XCO2	XN2
0.3891E-02	0.1435E-01	0.1337E+00	0.1049E+00	0.7277E+00

```

-----
! LA TEMPERATURE DU MELANGE A L'ENTREE: T1= 500.00 [K] !
-----
! LA RICHESSE DU MELANGE A L'ENTREE : RC= 0.600 !
-----
! LA TEMPERATURE DE COMBUSTION COMPTETE EST: TC= 1866.67 [K] !
-----
! LA TEMPERATURE D'EQUILIBRE EST: T2= 1753.76 [K] !
-----
! L'ENTHALIE DES PRODUITS A L'EQUILIBRE : HT2= 244.358 [KJ] !
-----
! NOMBRE D 'ITERATIONS= 7 !
-----
! NOMBRE DE MOLES TOTAL=59.508 !
-----

```

```

-----
! LES CONCENTRATIONS DES ELEMENTS A L'EQUILIBRE: !
-----
! XO | XOH | XH | XCO | XH2 | !
-----
! 0.2425E-04 | 0.3882E-03 | 0.7645E-06 | 0.2864E-04 | 0.9607E-05 | !
-----
! XNO | XO2 | XH2O | XCO2 | XN2 | !
-----
! 0.2431E-02 | 0.9112E-01 | 0.8382E-01 | 0.6719E-01 | 0.7550E+00 | !
-----

```

```

-----
----//---
-----//---
-----

```

```

-----
! LA TEMPERATURE DU MELANGE A L'ENTREE: T1= 500.00 [K] !
-----
! LA RICHESSE DU MELANGE A L'ENTREE : RC= 0.700 !
-----
! LA TEMPERATURE DE COMBUSTION COMPTETE EST: TC= 2050.30 [K] !
-----
! LA TEMPERATURE D'EQUILIBRE EST: T2= 1975.80 [K] !
-----
! L'ENTHALIE DES PRODUITS A L'EQUILIBRE : HT2= 226.887 [KJ] !
-----
! NOMBRE D 'ITERATIONS= 10 !
-----
! NOMBRE DE MOLES TOTAL=60.039 !
-----

```

```

-----
! LES CONCENTRATIONS DES ELEMENTS A L'EQUILIBRE: !
-----
! XO | XOH | XH | XCO | XH2 | !
-----
! 0.1453E-03 | 0.1361E-02 | 0.1364E-04 | 0.3589E-03 | 0.9353E-04 | !
-----
! XNO | XO2 | XH2O | XCO2 | XN2 | !
-----
! 0.4082E-02 | 0.6440E-01 | 0.9915E-01 | 0.8292E-01 | 0.7475E+00 | !
-----

```

```

-----
! LA TEMPERATURE DU MELANGE A L'ENTREE: T1= 500.00 [K] !
-----
! LA RICHESSE DU MELANGE A L'ENTREE : RC= 0.800 !
-----
! LA TEMPERATURE DE COMBUSTION COMPTETE EST: TC= 2225.42 [K] !
-----
! LA TEMPERATURE D'EQUILIBRE EST: T2= 2167.94 [K] !
-----
! L'ENTHALIE DES PRODUITS A L'EQUILIBRE : HT2= 209.415 [KJ] !
-----
| NOMBRE D 'ITERATIONS= 10 |
-----
| NOMBRE DE MOLES TOTAL=60.654 |
-----

```

```

-----
| LES CONCENTRATIONS DES ELEMENTS A L'EQUILIBRE: |
-----
| XO | XOH | XH | XCO | XH2 |
-----
| 0.4491E-03 | 0.3098E-02 | 0.1107E-03 | 0.2391E-02 | 0.5321E-03 |
-----
| XNO | XO2 | XH2O | XCO2 | XN2 |
-----
| 0.5153E-02 | 0.3913E-01 | 0.1133E+00 | 0.9653E-01 | 0.7393E+00 |
-----

```

```

-----
-----//---
-----//---
-----

```

```

-----
! LA TEMPERATURE DU MELANGE A L'ENTREE: T1= 500.00 [K] !
-----
! LA RICHESSE DU MELANGE A L'ENTREE : RC= 0.950 !
-----
! LA TEMPERATURE DE COMBUSTION COMPTETE EST: TC= 2473.76 [K] !
-----
! LA TEMPERATURE D'EQUILIBRE EST: T2= 2323.67 [K] !
-----
! L'ENTHALIE DES PRODUITS A L'EQUILIBRE : HT2= 183.208 [KJ] !
-----
| NOMBRE D 'ITERATIONS= 14 |
-----
| NOMBRE DE MOLES TOTAL=61.800 |
-----

```

```

-----
| LES CONCENTRATIONS DES ELEMENTS A L'EQUILIBRE: |
-----
| XO | XOH | XH | XCO | XH2 |
-----
| 0.7277E-03 | 0.4858E-02 | 0.5627E-03 | 0.1126E-01 | 0.2530E-02 |
-----
| XNO | XO2 | XH2O | XCO2 | XN2 |
-----
| 0.4476E-02 | 0.1536E-01 | 0.1323E+00 | 0.1020E+00 | 0.7259E+00 |
-----

```

! LA TEMPERATURE DU MELANGE A L'ENTREE: T1= 600.00 [K] !
 ! LA RICHESSE DU MELANGE A L'ENTREE : RC= 0.600 !
 ! LA TEMPERATURE DE COMBUSTION COMPLETE EST: TC= 1948.35 [K] !
 ! LA TEMPERATURE D'EQUILIBRE EST: T2= 1837.52 [K] !
 ! L'ENTHALIE DES PRODUITS A L'EQUILIBRE : HT2= 442.797 [KJ] !
 ! NOMBRE D 'ITERATIONS= 5 !
 ! NOMBRE DE MOLES TOTAL=59.514 !

! LES CONCENTRATIONS DES ELEMENTS A L'EQUILIBRE:
 ! XO | XOH | XH | XCO | XH2 |
 ! 0.5364E-04 | 0.6452E-03 | 0.2294E-05 | 0.6855E-04 | 0.2106E-04 |
 ! XNO | XO2 | XH2O | XCO2 | XN2 |
 ! 0.3217E-02 | 0.9066E-01 | 0.8367E-01 | 0.6714E-01 | 0.7545E+00 |

! LA TEMPERATURE DU MELANGE A L'ENTREE: T1= 600.00 [K] !
 ! LA RICHESSE DU MELANGE A L'ENTREE : RC= 0.700 !
 ! LA TEMPERATURE DE COMBUSTION COMPLETE EST: TC= 2130.82 [K] !
 ! LA TEMPERATURE D'EQUILIBRE EST: T2= 2052.16 [K] !
 ! L'ENTHALIE DES PRODUITS A L'EQUILIBRE : HT2= 428.410 [KJ] !
 ! NOMBRE D 'ITERATIONS= 10 !
 ! NOMBRE DE MOLES TOTAL=60.064 !

! LES CONCENTRATIONS DES ELEMENTS A L'EQUILIBRE:
 ! XO | XOH | XH | XCO | XH2 |
 ! 0.2581E-03 | 0.1962E-02 | 0.3030E-04 | 0.6726E-03 | 0.1652E-03 |
 ! XNO | XO2 | XH2O | XCO2 | XN2 |
 ! 0.4988E-02 | 0.6391E-01 | 0.9873E-01 | 0.8257E-01 | 0.7467E+00 |

```

-----
! LA TEMPERATURE DU MELANGE A L'ENTREE: T1= 600.00 [K] !
-----
! LA RICHESSE DU MELANGE A L'ENTREE : RC= 0.800 !
-----
! LA TEMPERATURE DE COMBUSTION COMPTETE EST: TC= 2304.99 [K] !
-----
! LA TEMPERATURE D'EQUILIBRE EST: T2= 2232.85 [K] !
-----
! L'ENTHALIE DES PRODUITS A L'EQUILIBRE : HT2= 414.023 [KJ] !
-----

```

```

-----
| NOMBRE D 'ITERATIONS= 10 |
-----
| NOMBRE DE MOLES TOTAL=60.726 |
-----

```

```

-----
| LES CONCENTRATIONS DES ELEMENTS A L'EQUILIBRE: |
-----

```

XO	XOH	XH	XCO	XH2
0.6781E-03	0.4013E-02	0.1950E-03	0.3680E-02	0.7922E-03
XNO	XO2	XH2O	XCO2	XN2
0.5956E-02	0.3913E-01	0.1124E+00	0.9512E-01	0.7381E+00

```

-----
-----
-----
-----
-----
-----

```

```

-----
! LA TEMPERATURE DU MELANGE A L'ENTREE: T1= 600.00 [K] !
-----
! LA RICHESSE DU MELANGE A L'ENTREE : RC= 0.950 !
-----
! LA TEMPERATURE DE COMBUSTION COMPTETE EST: TC= 2552.08 [K] !
-----
! LA TEMPERATURE D'EQUILIBRE EST: T2= 2376.33 [K] !
-----
! L'ENTHALIE DES PRODUITS A L'EQUILIBRE : HT2= 392.442 [KJ] !
-----

```

```

-----
| NOMBRE D 'ITERATIONS= 16 |
-----
| NOMBRE DE MOLES TOTAL=61.957 |
-----

```

```

-----
| LES CONCENTRATIONS DES ELEMENTS A L'EQUILIBRE: |
-----

```

XO	XOH	XH	XCO	XH2
0.1013E-02	0.5928E-02	0.8234E-03	0.1439E-01	0.3211E-02
XNO	XO2	XH2O	XCO2	XN2
0.5145E-02	0.1655E-01	0.1306E+00	0.9859E-01	0.7237E+00

```

-----
! LA TEMPERATURE DU MELANGE A L'ENTREE: T1= 700.00 [K] !
-----
! LA RICHESSE DU MELANGE A L'ENTREE : RC= 0.600 !
-----
! LA TEMPERATURE DE COMBUSTION COMPTETE EST: TC= 2032.28 [K] !
-----
! LA TEMPERATURE D'EQUILIBRE EST: T2= 1922.17 [K] !
-----
! L'ENTHALIE DES PRODUITS A L'EQUILIBRE : HT2= 647.701 [KJ] !
-----
! NOMBRE D 'ITERATIONS= 8 !
-----
! NOMBRE DE MOLES TOTAL=59.525 !
-----

```

```

-----
! LES CONCENTRATIONS DES ELEMENTS A L'EQUILIBRE: !
-----
! XO | YOH | XH | XCO | XH2 | !
-----
! 0.1115E-03 | 0.1030E-02 | 0.6325E-05 | 0.1531E-03 | 0.4343E-04 | !
-----
! XNO | XO2 | XH2O | XCO2 | XN2 | !
-----
! 0.4160E-02 | 0.9011E-01 | 0.8344E-01 | 0.6705E-01 | 0.7539E+00 | !
-----

```

```

-----
----//---
-----//---
-----

```

```

-----
! LA TEMPERATURE DU MELANGE A L'ENTREE: T1= 700.00 [K] !
-----
! LA RICHESSE DU MELANGE A L'ENTREE : RC= 0.700 !
-----
! LA TEMPERATURE DE COMBUSTION COMPTETE EST: TC= 2213.80 [K] !
-----
! LA TEMPERATURE D'EQUILIBRE EST: T2= 2127.84 [K] !
-----
! L'ENTHALIE DES PRODUITS A L'EQUILIBRE : HT2= 636.760 [KJ] !
-----
! NOMBRE D 'ITERATIONS= 10 !
-----
! NOMBRE DE MOLES TOTAL=60.101 !
-----

```

```

-----
! LES CONCENTRATIONS DES ELEMENTS A L'EQUILIBRE: !
-----
! XO | XOH | XH | XCO | XH2 | !
-----
! 0.4377E-03 | 0.2743E-02 | 0.6315E-04 | 0.1195E-02 | 0.2785E-03 | !
-----
! XNO | XO2 | XH2O | XCO2 | XN2 | !
-----
! 0.5994E-02 | 0.6340E-01 | 0.9815E-01 | 0.8200E-01 | 0.7457E+00 | !
-----

```

```

-----
! LA TEMPERATURE DU MELANGE A L'ENTREE: T1= 700.00 [K] !
-----
! LA RICHESSE DU MELANGE A L'ENTREE : RC= 0.800 !
-----
! LA TEMPERATURE DE COMBUSTION COMPTETE EST: TC= 2387.07 [K] !
-----
! LA TEMPERATURE D'EQUILIBRE EST: T2= 2293.74 [K] !
-----
! L'ENTHALIE DES PRODUITS A L'EQUILIBRE : HT2= 625.819 [KJ] !
-----
! NOMBRE D 'ITERATIONS= 12 !
-----
! NOMBRE DE MOLES TOTAL=60.818 !
-----

```

```

-----
! LES CONCENTRATIONS DES ELEMENTS A L'EQUILIBRE: !
-----

```

XO	XOH	XH	XCO	XH2
0.9791E-03	0.5047E-02	0.3214E-03	0.5347E-02	0.1122E-02
XNO	XO2	XH2O	XCO2	XN2
0.6783E-02	0.3928E-01	0.1113E+00	0.9331E-01	0.7365E+00

```

-----
//
-----

```

```

-----
! LA TEMPERATURE DU MELANGE A L'ENTREE: T1= 700.00 [K] !
-----
! LA RICHESSE DU MELANGE A L'ENTREE : RC= 0.900 !
-----
! LA TEMPERATURE DE COMBUSTION COMPTETE EST: TC= 2552.84 [K] !
-----
! LA TEMPERATURE D'EQUILIBRE EST: T2= 2408.58 [K] !
-----
! L'ENTHALIE DES PRODUITS A L'EQUILIBRE : HT2= 614.879 [KJ] !
-----
! NOMBRE D 'ITERATIONS= 15 !
-----
! NOMBRE DE MOLES TOTAL=61.768 !
-----

```

```

-----
! LES CONCENTRATIONS DES ELEMENTS A L'EQUILIBRE: !
-----

```

XO	XOH	XH	XCO	XH2
0.1337E-02	0.6754E-02	0.9620E-03	0.1550E-01	0.3217E-02
XNO	XO2	XH2O	XCO2	XN2
0.6079E-02	0.2039E-01	0.1224E+00	0.9783E-01	0.7255E+00

```

-----
! LA TEMPERATURE DU MELANGE A L'ENTREE: T1= 800.00 [K] !
-----
! LA RICHESSE DU MELANGE A L'ENTREE : RC= 0.600 !
-----
! LA TEMPERATURE DE COMBUSTION COMPTETE EST: TC= 2118.21 [K] !
-----
! LA TEMPERATURE D'EQUILIBRE EST: T2= 2006.90 [K] !
! L'ENTHALIE DES PRODUITS A L'EQUILIBRE : HT2= 858.501 [KJ] !
-----
| NOMBRE D 'ITERATIONS= 8 |
-----
| NOMBRE DE MOLES TOTAL=59.543 |
-----

```

```

-----
| LES CONCENTRATIONS DES ELEMENTS A L'EQUILIBRE: |
-----
| XO | XOH | XH | XCO | XH2 |
-----
| 0.2179E-03 | 0.1578E-02 | 0.1604E-04 | 0.3191E-03 | 0.8429E-04 |
-----
| XNO | XO2 | XH2O | XCO2 | XN2 |
-----
| 0.5259E-02 | 0.8944E-01 | 0.8309E-01 | 0.6686E-01 | 0.7531E+00 |
-----

```

```

-----
----//---
-----//---
-----

```

```

-----
! LA TEMPERATURE DU MELANGE A L'ENTREE: T1= 800.00 [K] !
-----
! LA RICHESSE DU MELANGE A L'ENTREE : RC= 0.700 !
-----
! LA TEMPERATURE DE COMBUSTION COMPTETE EST: TC= 2298.89 [K] !
-----
! LA TEMPERATURE D'EQUILIBRE EST: T2= 2201.88 [K] !
! L'ENTHALIE DES PRODUITS A L'EQUILIBRE : HT2= 851.317 [KJ] !
-----
| NOMBRE D 'ITERATIONS= 10 |
-----
| NOMBRE DE MOLES TOTAL=60.157 |
-----

```

```

-----
| LES CONCENTRATIONS DES ELEMENTS A L'EQUILIBRE: |
-----
| XO | XOH | XH | XCO | XH2 |
-----
| 0.7085E-03 | 0.3718E-02 | 0.1233E-03 | 0.2007E-02 | 0.4473E-03 |
-----
| XNO | XO2 | XH2O | XCO2 | XN2 |
-----
| 0.7084E-02 | 0.6293E-01 | 0.9737E-01 | 0.8111E-01 | 0.7445E+00 |
-----

```

```

-----
! LA TEMPERATURE DU MELANGE A L'ENTREE: T1= 800.00 [K] !
-----
! LA RICHESSE DU MELANGE A L'ENTREE : RC= 0.800 !
-----
! LA TEMPERATURE DE COMBUSTION COMPTETE EST: TC= 2471.41 [K] !
-----
! LA TEMPERATURE D'EQUILIBRE EST: T2= 2355.07 [K] !
-----
! L'ENTHALIE DES PRODUITS A L'EQUILIBRE : HT2= 844.134 [KJ] !
-----

```

```

| NOMBRE D 'ITERATIONS= 12 |
-----
| NOMBRE DE MOLES TOTAL=60.940 |
-----

```

```

| LES CONCENTRATIONS DES ELEMENTS A L'EQUILIBRE: |
-----
| XO | XOH | XH | XCO | XH2 |
-----
| 0.1394E-02 | 0.6279E-02 | 0.5167E-03 | 0.7561E-02 | 0.1557E-02 |
-----
| XNO | XO2 | XH2O | XCO2 | XN2 |
-----
| 0.7694E-02 | 0.3960E-01 | 0.1099E+00 | 0.9090E-01 | 0.7346E+00 |
-----

```

```

-----
|   |   |   |   |   |
-----
|   |   |   |   |   |
-----

```

```

-----
! LA TEMPERATURE DU MELANGE A L'ENTREE: T1= 800.00 [K] !
-----
! LA RICHESSE DU MELANGE A L'ENTREE : RC= 0.900 !
-----
! LA TEMPERATURE DE COMBUSTION COMPTETE EST: TC= 2636.52 [K] !
-----
! LA TEMPERATURE D'EQUILIBRE EST: T2= 2460.70 [K] !
-----
! L'ENTHALIE DES PRODUITS A L'EQUILIBRE : HT2= 836.950 [KJ] !
-----

```

```

| NOMBRE D 'ITERATIONS= 16 |
-----
| NOMBRE DE MOLES TOTAL=61.965 |
-----

```

```

| LES CONCENTRATIONS DES ELEMENTS A L'EQUILIBRE: |
-----
| XO | XOH | XH | XCO | XH2 |
-----
| 0.1809E-02 | 0.8084E-02 | 0.1365E-02 | 0.1925E-01 | 0.4000E-02 |
-----
| XNO | XO2 | XH2O | XCO2 | XN2 |
-----
| 0.6890E-02 | 0.2173E-01 | 0.1204E+00 | 0.9372E-01 | 0.7228E+00 |
-----

```

```

-----
! LA TEMPERATURE DU MELANGE A L'ENTREE: T1= 823.00 [K] !
-----
! LA RICHESSE DU MELANGE A L'ENTREE : RC= 0.600 !
-----
! LA TEMPERATURE DE COMBUSTION COMPTETE EST: TC= 2138.23 [K] !
-----
! LA TEMPERATURE D'EQUILIBRE EST: T2= 2026.31 [K] !
-----
! L'ENTHALIE DES PRODUITS A L'EQUILIBRE : HT2= 907.761 [KJ] !
-----
! NOMBRE D 'ITERATIONS= 8 !
-----
! NOMBRE DE MOLES TOTAL=59.548 !
-----

```

```

-----
! LES CONCENTRATIONS DES ELEMENTS A L'EQUILIBRE: !
-----
! XO | XOH | XH | XCO | XH2 |
-----
! 0.2520E-03 | 0.1731E-02 | 0.1963E-04 | 0.3741E-03 | 0.9735E-04 |
-----
! XNO | XO2 | XH2O | XCO2 | XN2 |
-----
! 0.5533E-02 | 0.8928E-01 | 0.8299E-01 | 0.6680E-01 | 0.7529E+00 |
-----

```

```

-----
----//---
-----//---
-----

```

```

-----
! LA TEMPERATURE DU MELANGE A L'ENTREE: T1= 823.00 [K] !
-----
! LA RICHESSE DU MELANGE A L'ENTREE : RC= 0.700 !
-----
! LA TEMPERATURE DE COMBUSTION COMPTETE EST: TC= 2318.71 [K] !
-----
! LA TEMPERATURE D'EQUILIBRE EST: T2= 2218.60 [K] !
-----
! L'ENTHALIE DES PRODUITS A L'EQUILIBRE : HT2= 901.480 [KJ] !
-----
! NOMBRE D 'ITERATIONS= 10 !
-----
! NOMBRE DE MOLES TOTAL=60.172 !
-----

```

```

-----
! LES CONCENTRATIONS DES ELEMENTS A L'EQUILIBRE: !
-----
! XO | XOH | XH | XCO | XH2 |
-----
! 0.7865E-03 | 0.3970E-02 | 0.1425E-03 | 0.2243E-02 | 0.4955E-03 |
-----
! XNO | XO2 | XH2O | XCO2 | XN2 |
-----
! 0.7345E-02 | 0.6282E-01 | 0.9716E-01 | 0.8085E-01 | 0.7442E+00 |
-----

```

! LA TEMPERATURE DU MELANGE A L'ENTREE: T1= 823.00 [K] !

! LA RICHESSE DU MELANGE A L'ENTREE : RC= 0.800 !

! LA TEMPERATURE DE COMBUSTION COMPTETE EST: TC= 2491.13 [K] !

! LA TEMPERATURE D'EQUILIBRE EST: T2= 2369.01 [K] !

! L'ENTHALIE DES PRODUITS A L'EQUILIBRE : HT2= 895.200 [KJ] !

| NOMBRE D 'ITERATIONS= 12 |

| NOMBRE DE MOLES TOTAL=60.972 |

| LES CONCENTRATIONS DES ELEMENTS A L'EQUILIBRE: |

| XO | XOH | XH | XCO | XH2 |

| 0.1507E-02 | 0.6587E-02 | 0.5734E-03 | 0.8146E-02 | 0.1672E-02 |

| XNO | XO2 | XH2O | XCO2 | XN2 |

| 0.7913E-02 | 0.3970E-01 | 0.1096E+00 | 0.9026E-01 | 0.7341E+00 |

-----//---
-----//---

! LA TEMPERATURE DU MELANGE A L'ENTREE: T1= 823.00 [K] !

! LA RICHESSE DU MELANGE A L'ENTREE : RC= 0.900 !

! LA TEMPERATURE DE COMBUSTION COMPTETE EST: TC= 2656.09 [K] !

! LA TEMPERATURE D'EQUILIBRE EST: T2= 2470.11 [K] !

! L'ENTHALIE DES PRODUITS A L'EQUILIBRE : HT2= 888.920 [KJ] !

| NOMBRE D 'ITERATIONS= 18 |

| NOMBRE DE MOLES TOTAL=62.004 |

| LES CONCENTRATIONS DES ELEMENTS A L'EQUILIBRE: |

| XO | XOH | XH | XCO | XH2 |

| 0.1909E-02 | 0.8343E-02 | 0.1452E-02 | 0.1997E-01 | 0.4154E-02 |

| XNO | XO2 | XH2O | XCO2 | XN2 |

| 0.7046E-02 | 0.2199E-01 | 0.1200E+00 | 0.9293E-01 | 0.7222E+00 |

APPENDICE D

FICHER DES RESULTATS 2^{eme} VERSION

FICHER DES RESULTATS DE L'ORGANIGRAMME

2eme version du programme

-----DONNEES-----

LA TEMPERATURE DU MELANGE A L'ENTREE :T1= 300.00 k

LA RICHESSE DU MELANGE A L'ENTREE :RC= 0.900

-----DEFINITIONS-----

INDICE	ESPECE
1	CO2 anhydride carbonique
2	CO oxyde de carbone
3	H2O eau
4	O2 oxygene
5	N2 azote
6	H2 hydrogene
7	OH hydroxyle
8	H hydrogene atomique
9	O oxygene atomique
10	NO oxyde nitreux
11	C8H18 octane n (kerosene)

----- 1ere partie -----

----- calcul de la temperature de combustion complete -----

ENTHALPIE DES REACTIFS (kj):

O2:H(4)= 0.0519 (Kj/mol)
 N2:H(5)= 0.0521
 C8H18:H(11)= -223.1129

ENTHALPIE DES REACTIFS..... : HT1=-197.706 kj

ENTHALPIES DES PRODUITS A TC:

H(1)= -286.9746 (Kj/mol)
 H(3)= -156.3266 "
 H(4)= 68.3594 "
 H(5)= 64.8772 "

ENTHALPIE DES PRODUITS.....: HTC= -197.7827 kj

*** par le principe de conservation d'energie HT1=HTC ***

LA TEMPERATURE DE COMBUSTION COMPLETE EST:

TC= 2244.33 k

&----- 2eme partie-----&
 & INTERPOLATION DE LA TEMPERATURE D'EQUILIBRE &
 & Par : TC1(1)=TC et TC1(2)=TC - 0.1(TC -T1) &
 &-----&

@--'POUR LA TEMPERATURE TC1(1) : 2244.33 k ----@

CALCUL DE L'ENTHALPIE DE CHAQUE ESPECE [KJ/MOL]:

```

-----
! H( 1) ! -286.9745 !
-----
! H( 2) ! -44.9118 !
-----
! H( 3) ! -156.3266 !
-----
! H( 4) ! 68.3594 !
-----
! H( 5) ! 64.8772 !
-----
! H( 6) ! 61.2155 !
-----
! H( 7) ! 101.9538 !
-----
! H( 8) ! 258.1927 !
-----
! H( 9) ! 289.7361 !
-----
! H(10) ! 156.9219 !
-----
  
```

CALCUL DE L'ENTROPIE DE CHAQUE ESPECE [KJ/MOL.K] :

```

-----
! S( 1) ! 0.3163 !
-----
! S( 2) ! 0.2631 !
-----
! S( 3) ! 0.2705 !
-----
! S( 4) ! 0.2729 !
-----
! S( 5) ! 0.2561 !
-----
! S( 6) ! 0.1921 !
-----
! S( 7) ! 0.2464 !
-----
! S( 8) ! 0.1566 !
-----
! S( 9) ! 0.2037 !
-----
! S(10) ! 0.2771 !
-----
  
```

CALCUL DE LA VARIATION D'ENTHALPIE DE CHAQUE EQUATION FICTIVE (kj) :

DELTAH(1)= 255.5564
DELTAH(2)= 163.0273
DELTAH(3)= 353.4459
DELTAH(4)= 276.2425
DELTAH(5)= 251.7218
DELTAH(6)= 90.3036

CALCUL DE LA VARIATION D'ENTROPIE DE CHAQUE EQUATION FICTIVE (kj/k) :

DELTAS(1)= 0.0673
DELTAS(2)= 0.0430
DELTAS(3)= 0.0896
DELTAS(4)= 0.0832
DELTAS(5)= 0.0581
DELTAS(6)= 0.0126

CALCUL DE LA VARIATION D'ENTHALPIE LIBRE DE CHAQUE EQUATION FICTIVE (kj) :

DELTAG(1)= 104.59261
DELTAG(2)= 66.61488
DELTAG(3)= 152.30751
DELTAG(4)= 89.50052
DELTAG(5)= 121.39464
DELTAG(6)= 62.06317

CONSTANTES D'EQUILIBRES DE CHAQUE EQUATION FICTIVE :

KP(1)=.368E-02
KP(2)=.282E-01
KP(3)=.285E-03
KP(4)=.826E-02
KP(5)=.149E-02
KP(6)=.359E-01

| NOMBRE D 'ITERATIONS= 12 |

| NOMBRE DE MOLES TOTAL=61.335 |

| LES CONCENTRATIONS DES ELEMENTS APRES LA COMBUSTION SONT: |

| XO | XOH | XH | XCO | XH2 |

| 0.4837E-03 | 0.3639E-02 | 0.2802E-03 | 0.6743E-02 | 0.1444E-02 |

| XNO | XO2 | XH2O | XCO2 | XN2 |

| 0.4042E-02 | 0.1729E-01 | 0.1270E+00 | 0.1074E+00 | 0.7317E+00 |

| ENTHALPIE DES PRODUITS A TC1(1): HTC1= - 62.2830 kj |

@--'POUR LA TEMPERATURE TC1(2): 2049.90 k ----@

ENTHALPIE DE CHAQUE ESPECE [KJ/MOL]:

! H(1) ! -298.7632 !

! H(2) ! -51.9902 !

! H(3) ! -166.4279 !

! H(4) ! 60.9562 !

! H(5) ! 57.8477 !

! H(6) ! 54.4567 !

! H(7) ! 95.1400 !

! H(8) ! 254.1551 !

! H(9) ! 285.6897 !

! H(10) ! 149.7693 !

ENTROPIE DE CHAQUE ESPECE [KJ/MOL.K] :

! S(1) ! 0.3108 !

! S(2) ! 0.2598 !

! S(3) ! 0.2658 !

! S(4) ! 0.2695 !

! S(5) ! 0.2528 !

! S(6) ! 0.1889 !

! S(7) ! 0.2432 !

! S(8) ! 0.1547 !

! S(9) ! 0.2018 !

! S(10) ! 0.2737 !

VARIATION D'ENTHALPIE DE CHAQUE EQUATION FICTIVE (kj) :

DELTAH(1)= 255.2116
DELTAH(2)= 163.1149
DELTAH(3)= 352.6081
DELTAH(4)= 277.2510
DELTAH(5)= 251.3627
DELTAH(6)= 90.3674

VARIATION D'ENTROPIE DE CHAQUE EQUATION FICTIVE (kj/k):

DELTAS(1)= 0.0671
DELTAS(2)= 0.0430
DELTAS(3)= 0.0892
DELTAS(4)= 0.0837
DELTAS(5)= 0.0579
DELTAS(6)= 0.0126

VARIATION D'ENTHALPIE LIBRE DE CHAQUE EQUATION FICTIVE (kj):

DELTA G(1)= 117.65643
DELTA G(2)= 74.97139
DELTA G(3)= 169.69705
DELTA G(4)= 105.72237
DELTA G(5)= 132.67012
DELTA G(6)= 64.51258

CONSTANTE D'EQUILIBRE DE CHAQUE EQUATION FICTIVE :

KP(1)=.100E-02
KP(2)=.123E-01
KP(3)=.474E-04
KP(4)=.202E-02
KP(5)=.416E-03
KP(6)=.227E-01

```

-----
| NOMBRE D 'ITERATIONS= 12                                     |
-----
| NOMBRE DE MOLES TOTAL=61.099                               |
-----
| LES CONCENTRATIONS DES ELEMENTS APRES LA COMBUSTION SONT: |
-----
|      XO      |      XOH      |      XH      |      XCO      |      XH2      |
-----
| 0.1263E-03 | 0.1570E-02 | 0.4812E-04 | 0.1813E-02 | 0.4291E-03 |
-----
|      XNO      |      XO2      |      XH2O     |      XCO2     |      XN2      |
-----
| 0.2448E-02 | 0.1582E-01 | 0.1297E+00 | 0.1128E+00 | 0.7353E+00 |
-----
| ENTHALPIE DES PRODUITS A TC1(2): HTC2= - 689.0755  kj   |
-----

```

```

&-----DERNIERE ETAPE-----&
& la température d'équilibre est déterminer par interpolation &
&          -! &
& TC1(1) -----> HTC1 ! (TC1(1)-TC1(2))*(HT2-HTC2) &
& TC1(2) -----> HTC2 !----> T2=TC(2)+ ----- &
& T2 -----> HT2 ! (HTC1 - HTC2) &
&          -! &
&-----&

```

LA TEMPERATURE D'EQUILIBRE EST:

T2= 2202.26 k

@-- 'POUR LA TEMPERATURE D'EQUILIBRE T2: 2202.26 k ----@
 &-- CALCUL DES FRACTIONS MOLAIRES ----&

ENTHALPIE DE CHAQUE ESPECE [KJ/MOL]:

```

-----
! H( 1) ! -289.5332 !
-----
! H( 2) ! -46.4475 !
-----
! H( 3) ! -158.5309 !
-----
! H( 4) ! 66.7500 !
-----
! H( 5) ! 63.3517 !
-----

```

```

-----
! H( 6) !      59.7422 !
-----
! H( 7) !     100.4711 !
-----
! H( 8) !     257.3190 !
-----
! H( 9) !     288.8604 !
-----
! H(10) !     155.3707 !
-----

```

ENTROPIE DE CHAQUE ESPECE [KJ/MOL.K] :

```

-----
! S( 1) !      0.3152 !
-----
! S( 2) !      0.2624 !
-----
! S( 3) !      0.2695 !
-----
! S( 4) !      0.2722 !
-----
! S( 5) !      0.2554 !
-----
! S( 6) !      0.1914 !
-----
! S( 7) !      0.2458 !
-----
! S( 8) !      0.1562 !
-----
! S( 9) !      0.2033 !
-----
! S(10) !      0.2764 !
-----

```

VARIATION D'ENTHALPIE DE CHAQUE EQUATION FICTIVE (kj) :

```

-----
DELTAH(1)= 255.4854
DELTAH(2)= 163.0491
DELTAH(3)= 353.2719
DELTAH(4)= 276.4607
DELTAH(5)= 251.6481
DELTAH(6)=  90.3199

```

VARIATION D'ENTROPIE DE CHAQUE EQUATION FICTIVE (kj/k):

```

-----
DELTAS(1)=  0.0672
DELTAS(2)=  0.0430
DELTAS(3)=  0.0895
DELTAS(4)=  0.0833
DELTAS(5)=  0.0580
DELTAS(6)=  0.0126

```

VARIATION D'ENTHALPIE LIBRE DE CHAQUE EQUATION FICTIVE (kj):

DELTA(1)= 107.42226
DELTA(2)= 68.42254
DELTA(3)= 156.07707
DELTA(4)= 93.00336
DELTA(5)= 123.83752
DELTA(6)= 62.59258

CONSTANTE D'EQUILIBRE DE CHAQUE EQUATION FICTIVE :

KP(1)=.283E-02
KP(2)=.238E-01
KP(3)=.199E-03
KP(4)=.622E-02
KP(5)=.116E-02
KP(6)=.328E-01

| NOMBRE D 'ITERATIONS= 12 |

| NOMBRE DE MOLES TOTAL=61.263 |

| LES CONCENTRATIONS DES ELEMENTS APRES LA COMBUSTION SONT: |

XO	XOH	XH	XCO	XH2
0.3669E-03	0.3066E-02	0.1972E-03	0.5236E-02	0.1139E-02
XNO	XO2	XH2O	XCO2	XN2
0.3634E-02	0.1679E-01	0.1278E+00	0.1090E+00	0.7327E+00

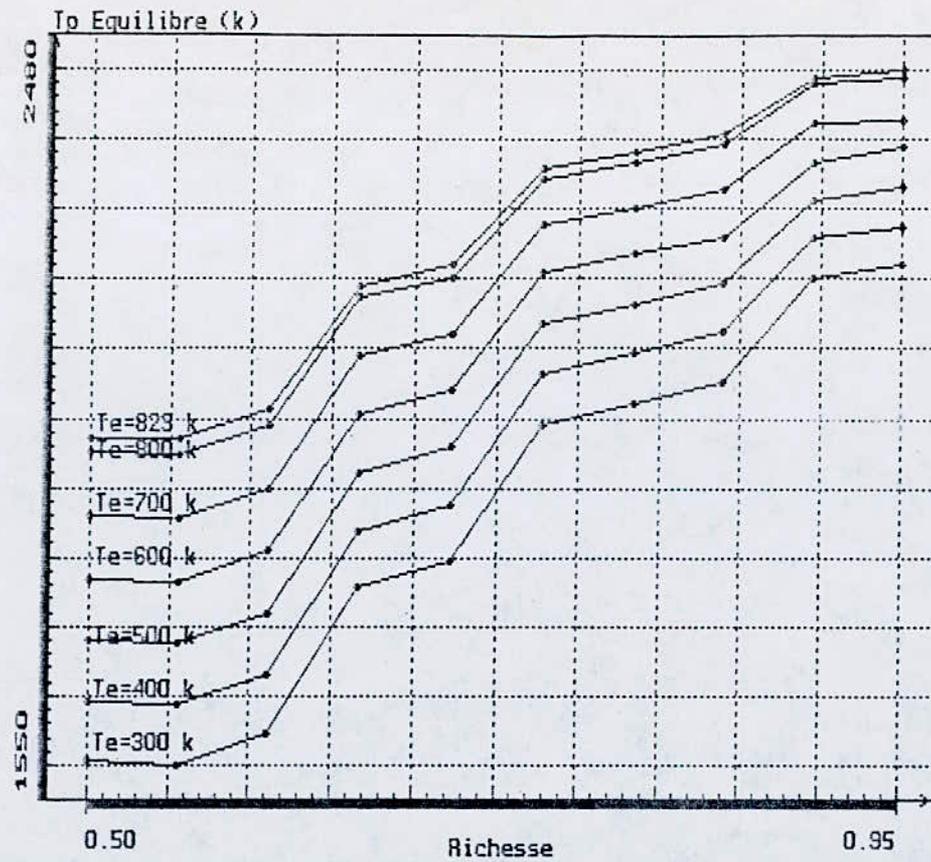


fig (I.I). Influence de la température d'entrée T_e sur la variation
de la température d'équilibre T_{eq} en fonction de la richesse
($P = 1$ atm)

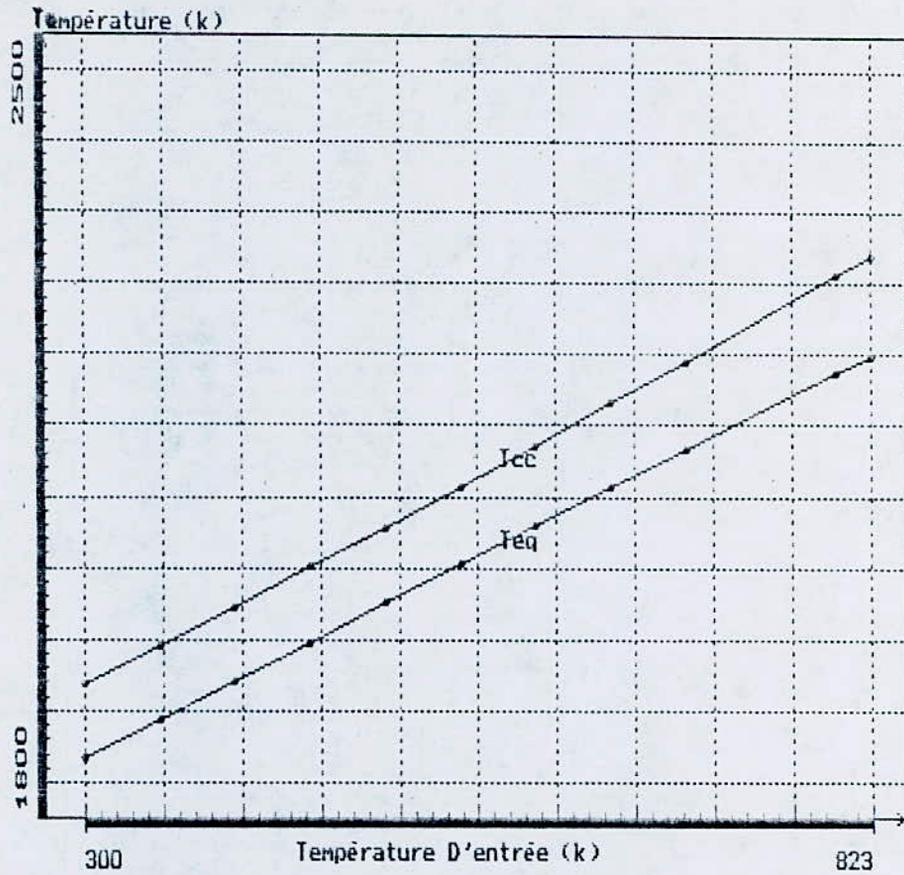


fig (I.2). Température théorique de combustion des mélanges AIR-KEROSENE

T_{eq} : avec dissociation ; T_c : sans dissociation

($P = 1 \text{ atm}$; $R_c = 0.7$)

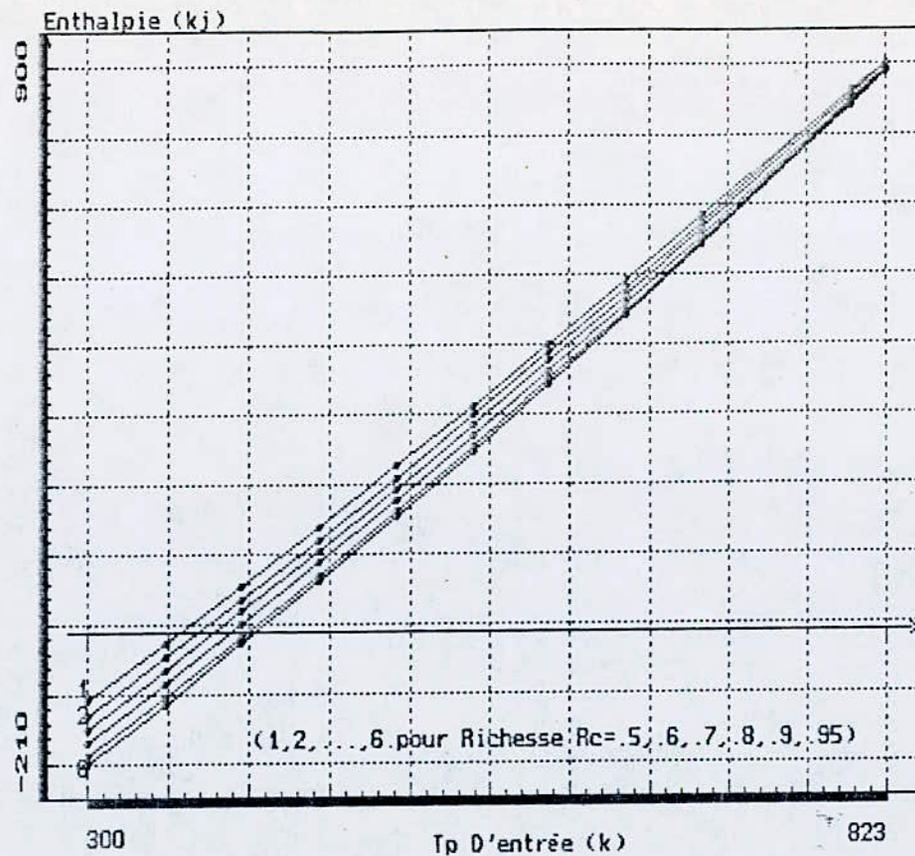


fig (I.3). Variation de l'enthalpie des produits de combustion en fonction de la température d'entrée .

($P=1atm$; $R_c = 0.5 ; 0.6 , 0.7 , 0.8 , 0.9 , 0.95$)

fig (II.I). Variation des concentrations des moles formées en fonction de la richesse (mélange air-kerosène: $p=1\text{atm}$, $T_e = 300\text{ K}$)
 T_e : température d'entrée .

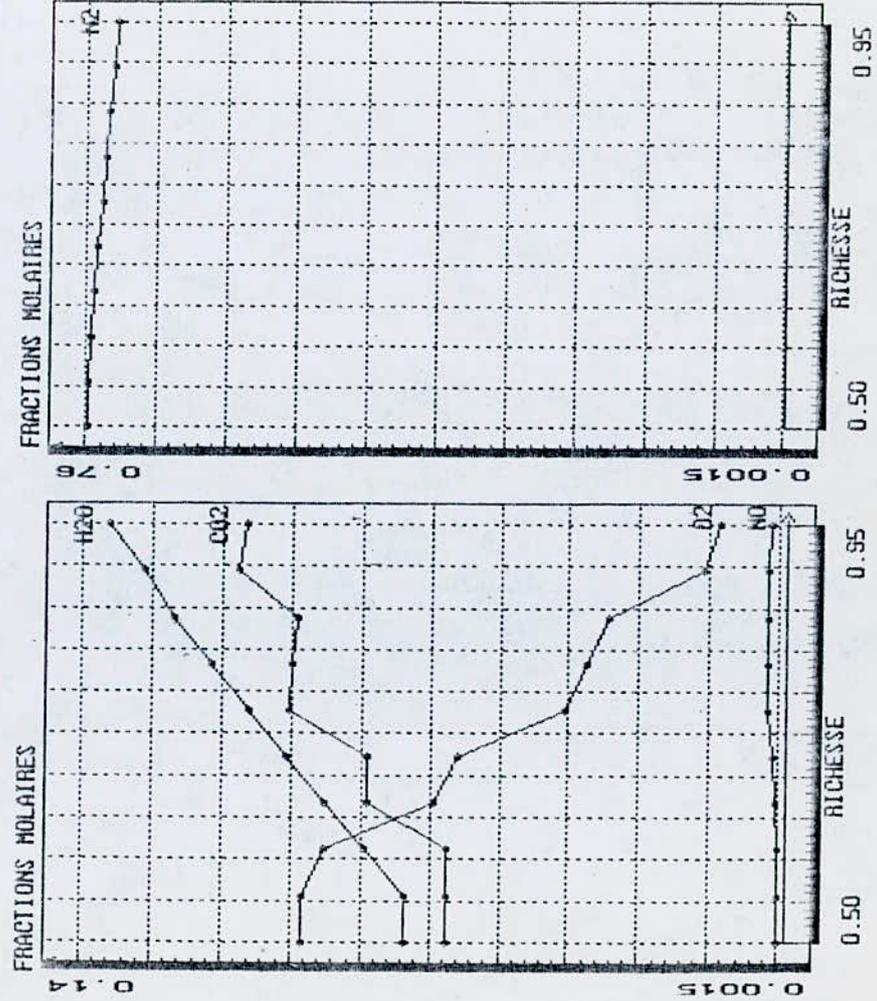
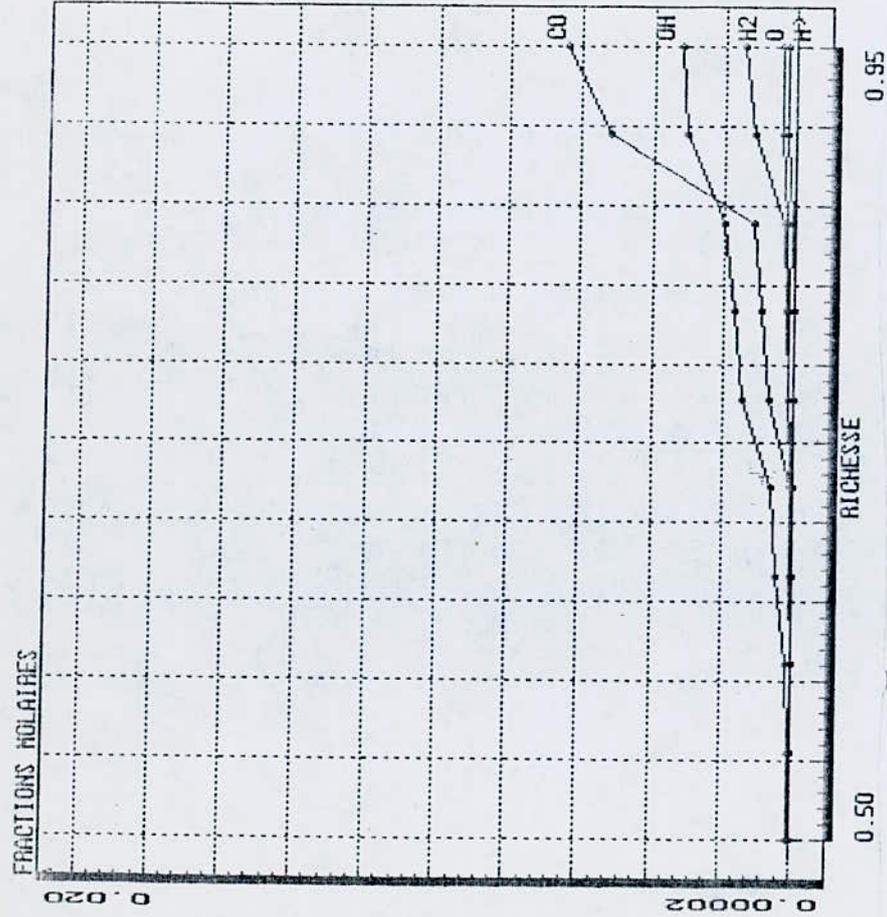


fig (II.2). Variation des concentrations des moles formées en fonction de la richesse ($P = 1 \text{ atm}$, $T_e = 500 \text{ K}$)

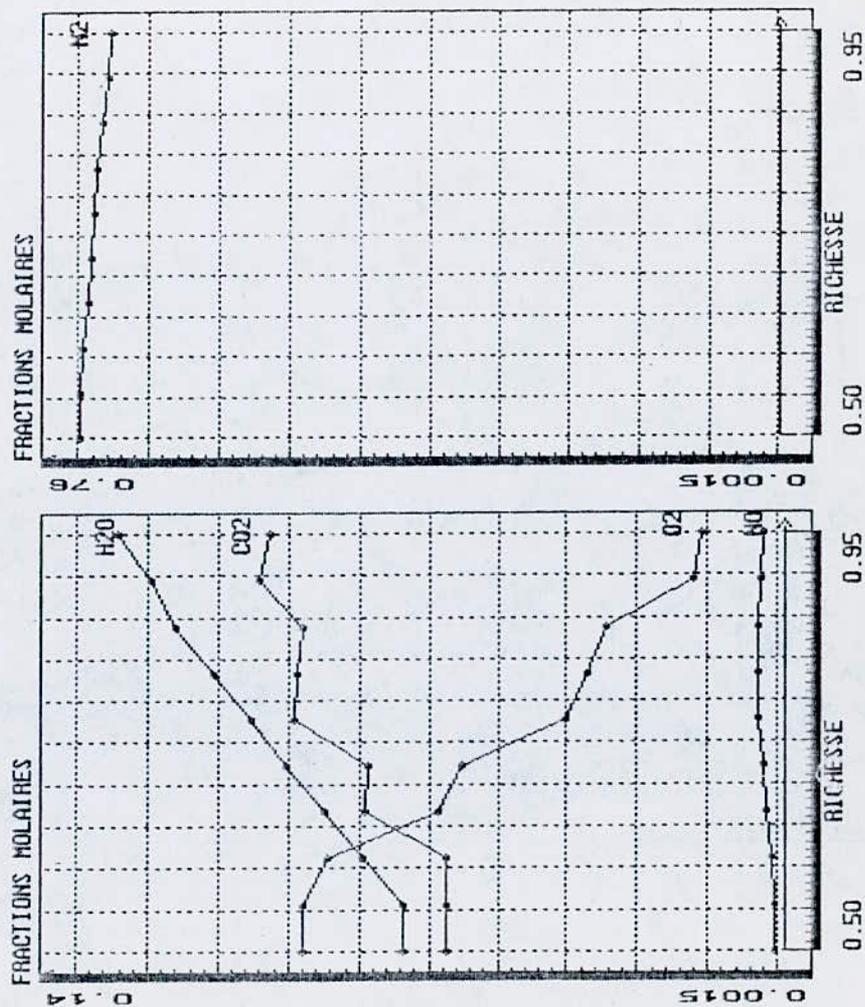
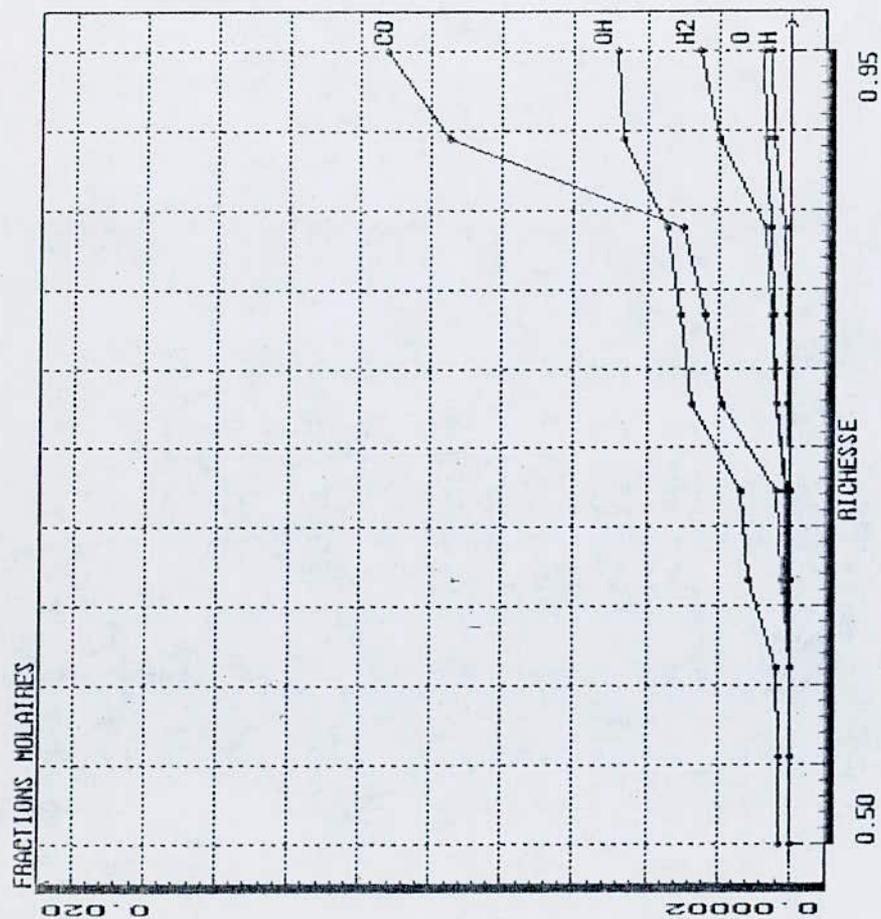
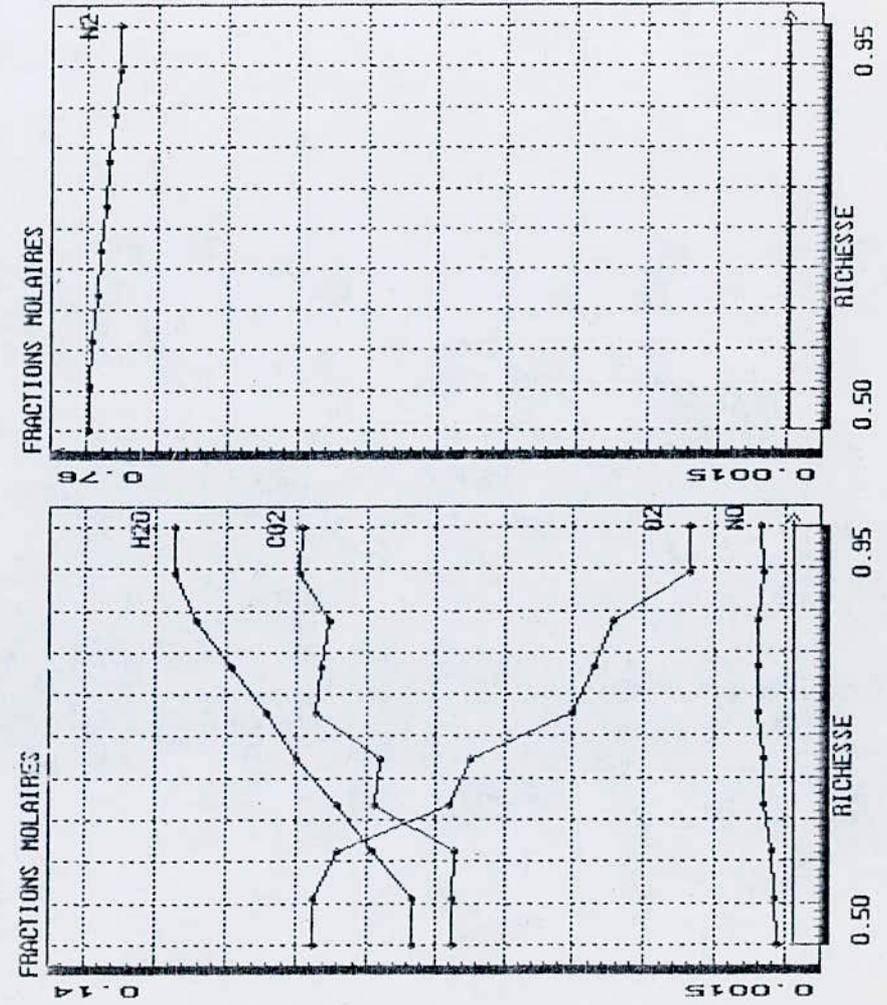
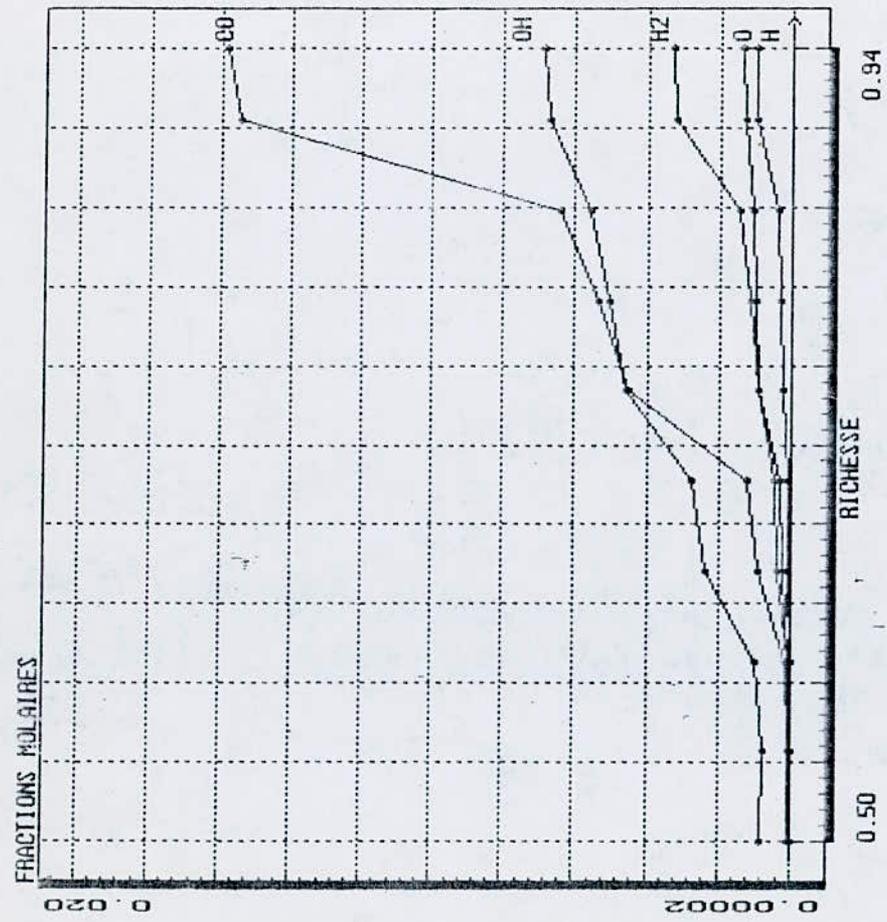


fig (II.3). Variation des concentrations des moles formées en fonction de la richesse ($P = 1 \text{ atm}$, $T_e = 700 \text{ K}$)



fig(II.4). Variation des concentration des moles formées en fonction de la richesse ($P=1\text{atm}$, $T_e=800\text{K}$)

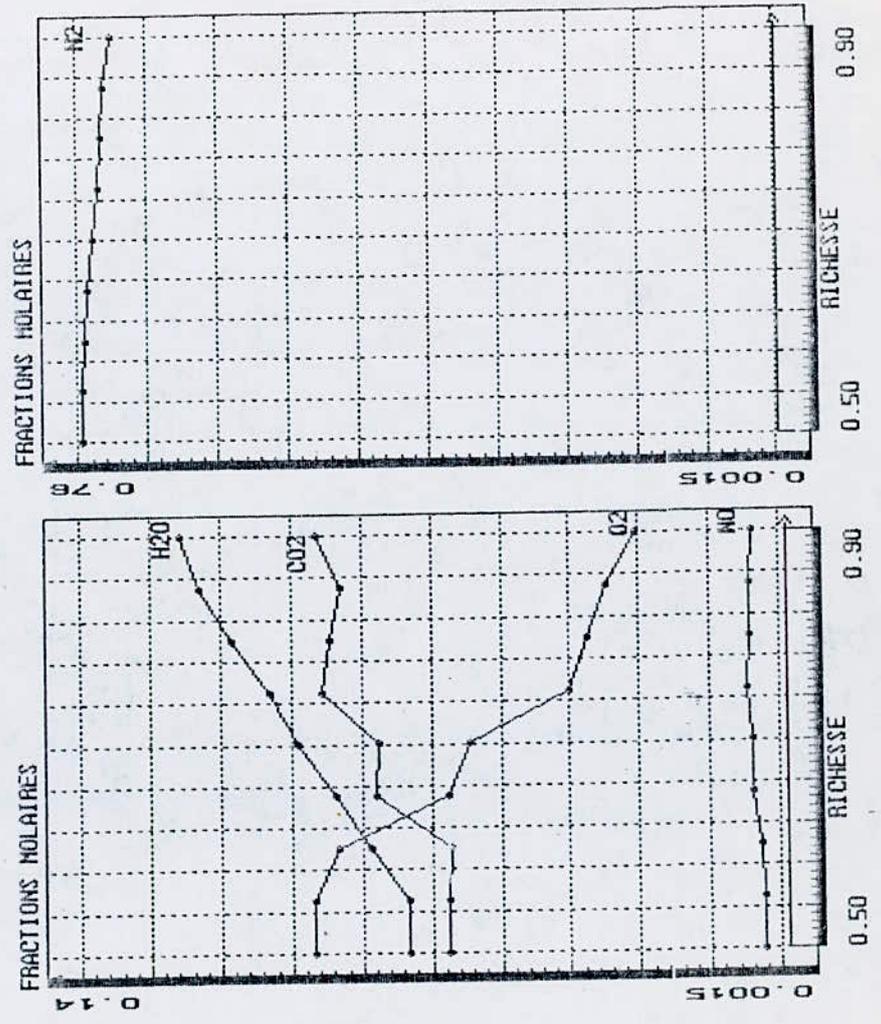
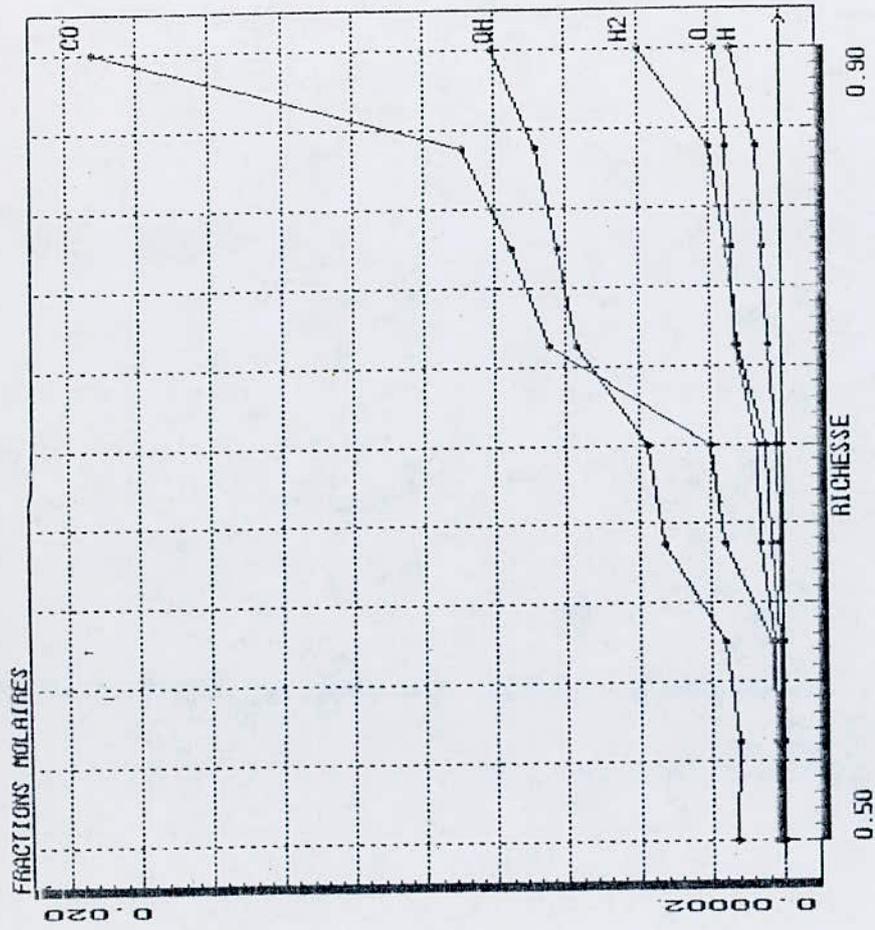
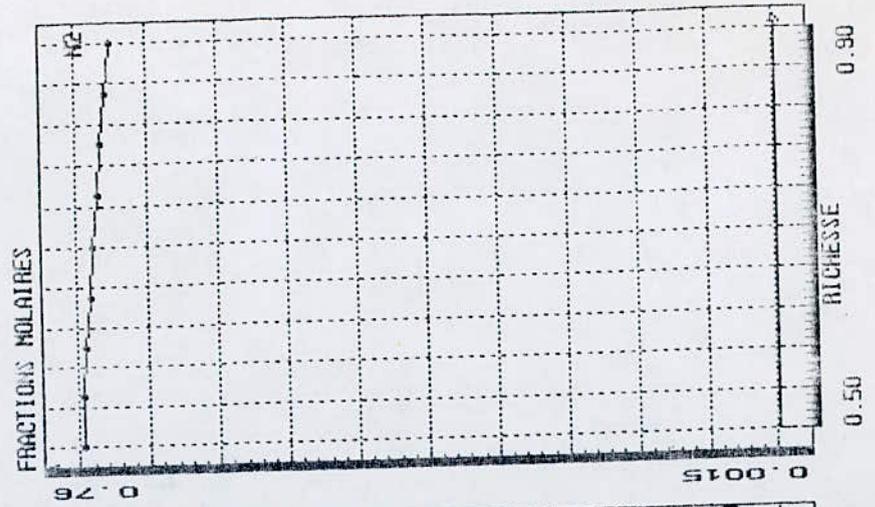
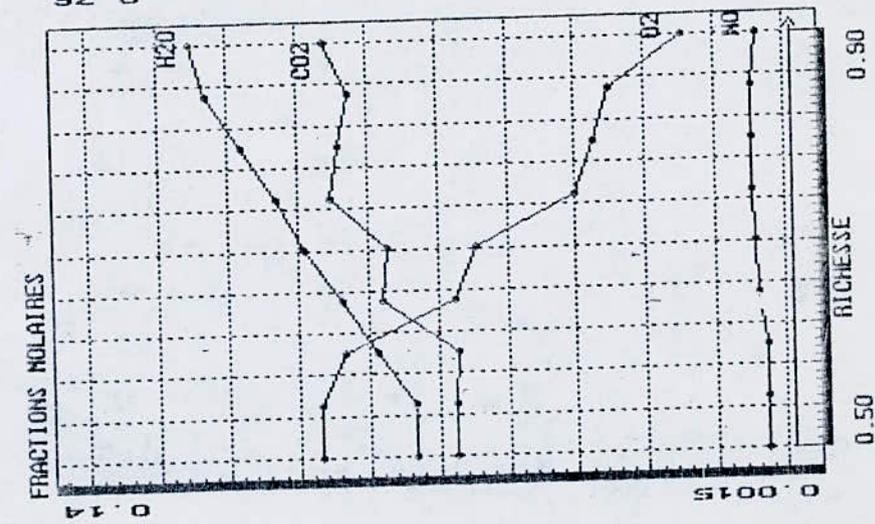
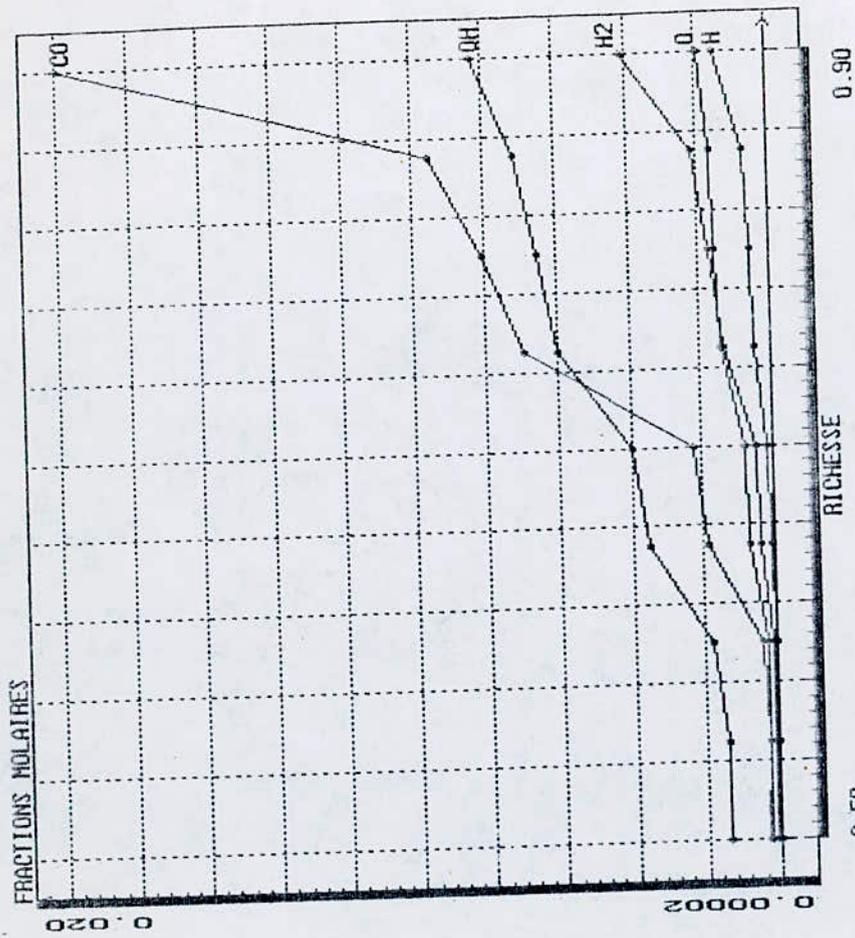


fig (II.5). Variation des concentrations des moles formées en fonction de la richesse ($P=1\text{atm}$, $T=825\text{K}$)



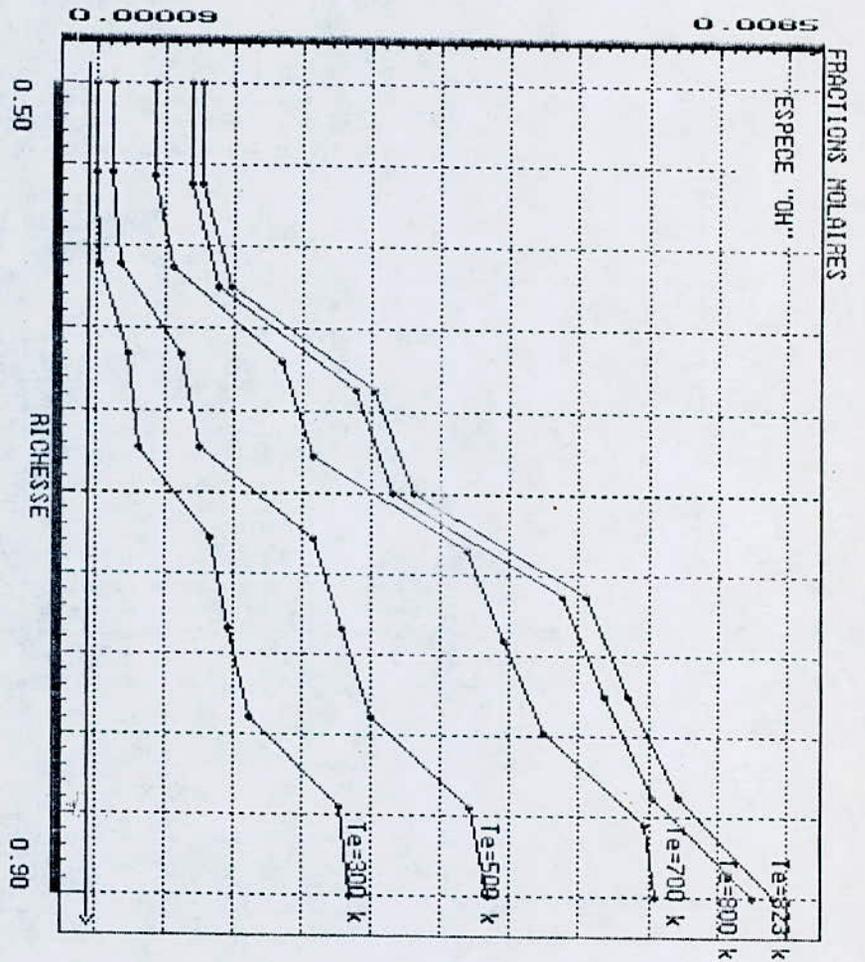


fig (III.I). Influence de la température d'entrée sur la variation de la concentration de mole formée de l'espèce "OH" en fonction de la richesse. (P = 1 atm)

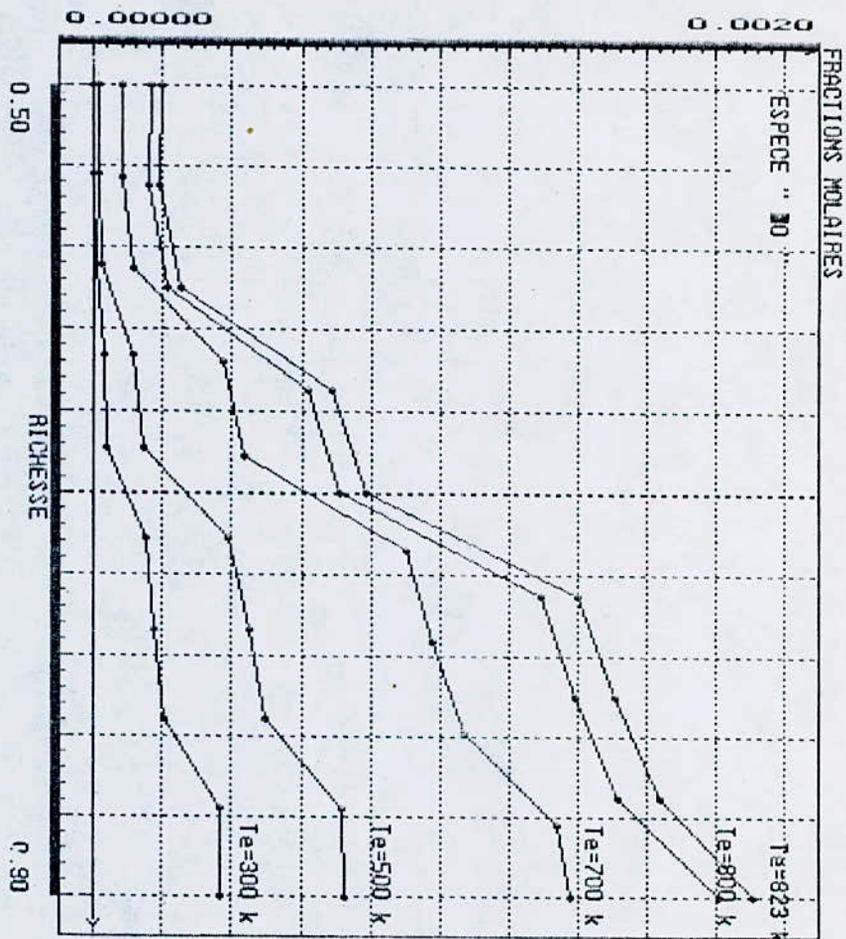


fig (III.2). influence de la température d'entrée sur la variation de la concentration de mole formée de l'espèce " O " en fonction de la richesse. (P = 1 atm)

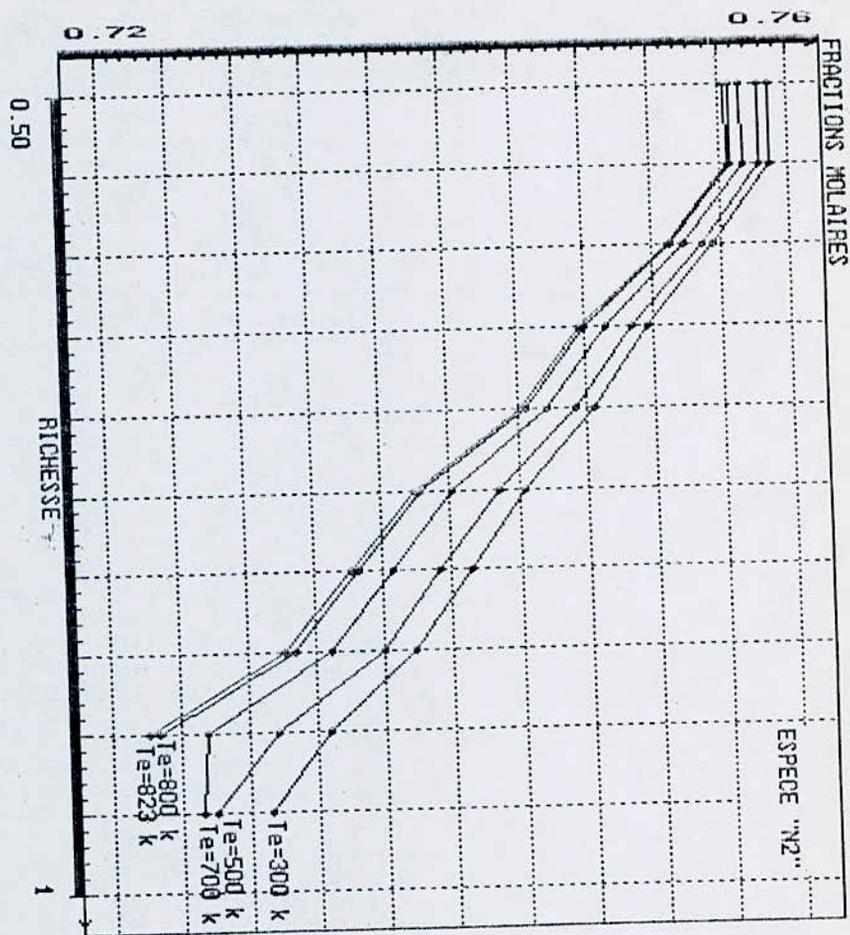


fig (III.3). Influence de la température d'entrée sur la variation de la concentration de mole formée de l'espèce " N2 " en fonction de la richesse. (P = 1 atm)

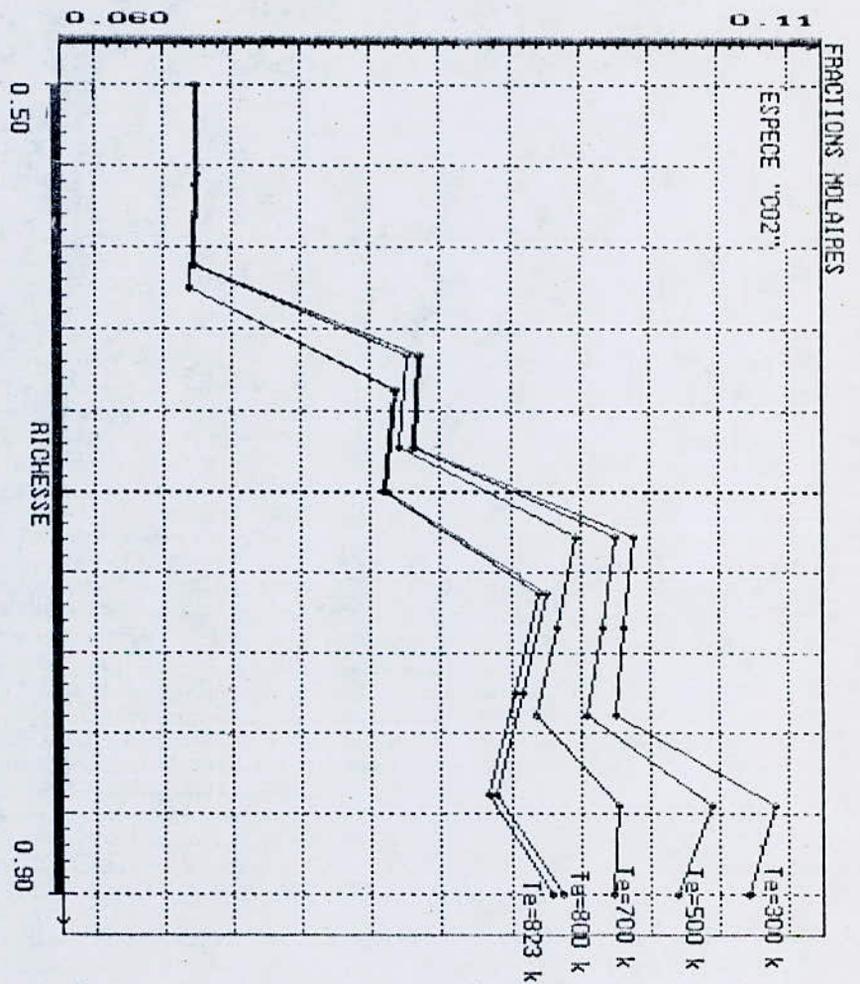


fig (III.4). Influence de la température d'entrée sur la variation de la concentration de mole formée de l'espèce " CO2 " en fonction de la richesse. (P = 1 atm)

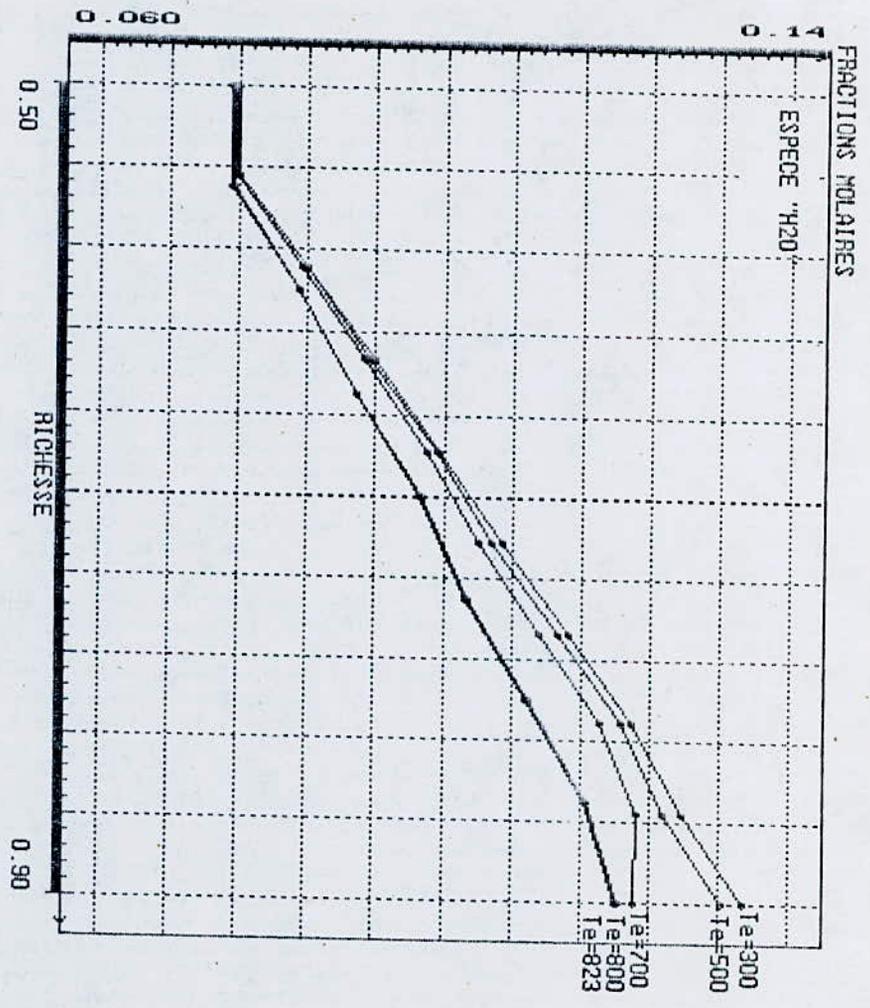


fig (III.5). Influence de la température d'entrée sur la variation de la concentration de mole formée de l'espèce " H₂O " en fonction de la richesse. (P = 1 atm)

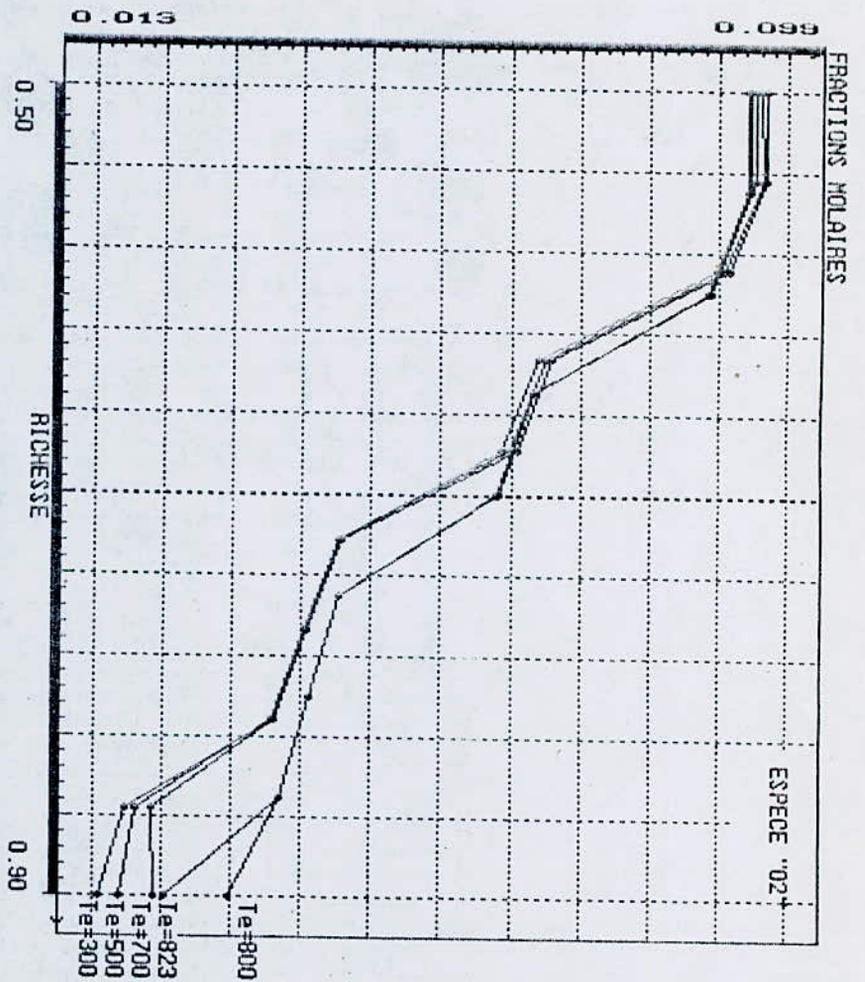


fig (III.6). Influence de la température d'entrée sur la variation de la concentration de mole formée de l'espèce " O₂ " en fonction de la richesse. (P= 1 atm)

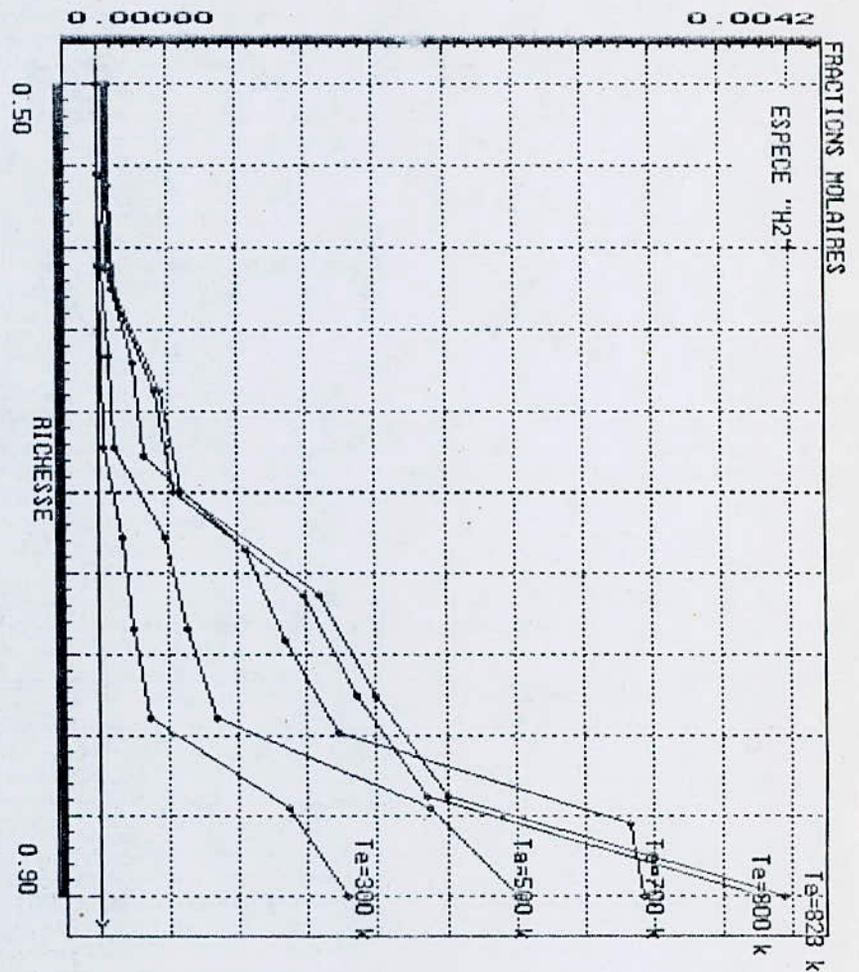


fig (III.7). Influence de la température d'entrée sur la variation de la concentration de mole formée de l'espèce "H₂" en fonction de la richesse . (P= 1 atm)

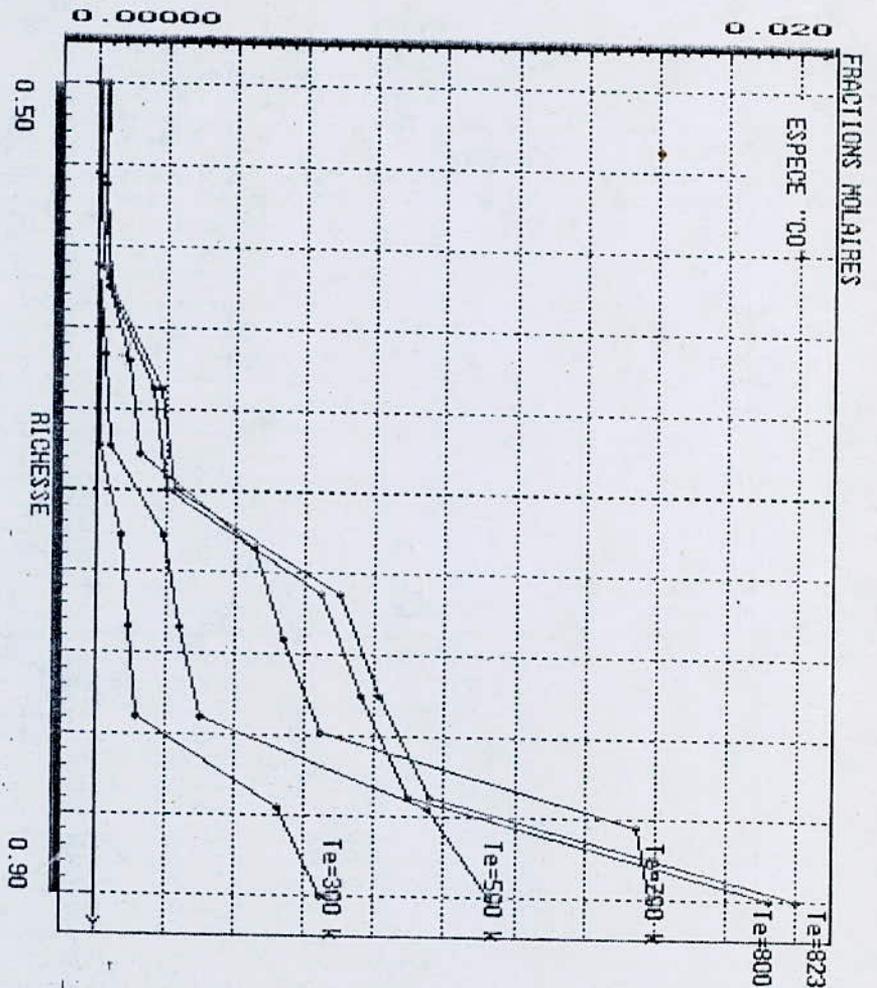


fig (III.8). Influence de la température d'entrée sur la variation de la concentration de mole formée de l'espèce " CO " en fonction de la richesse . (P = 1 atm)

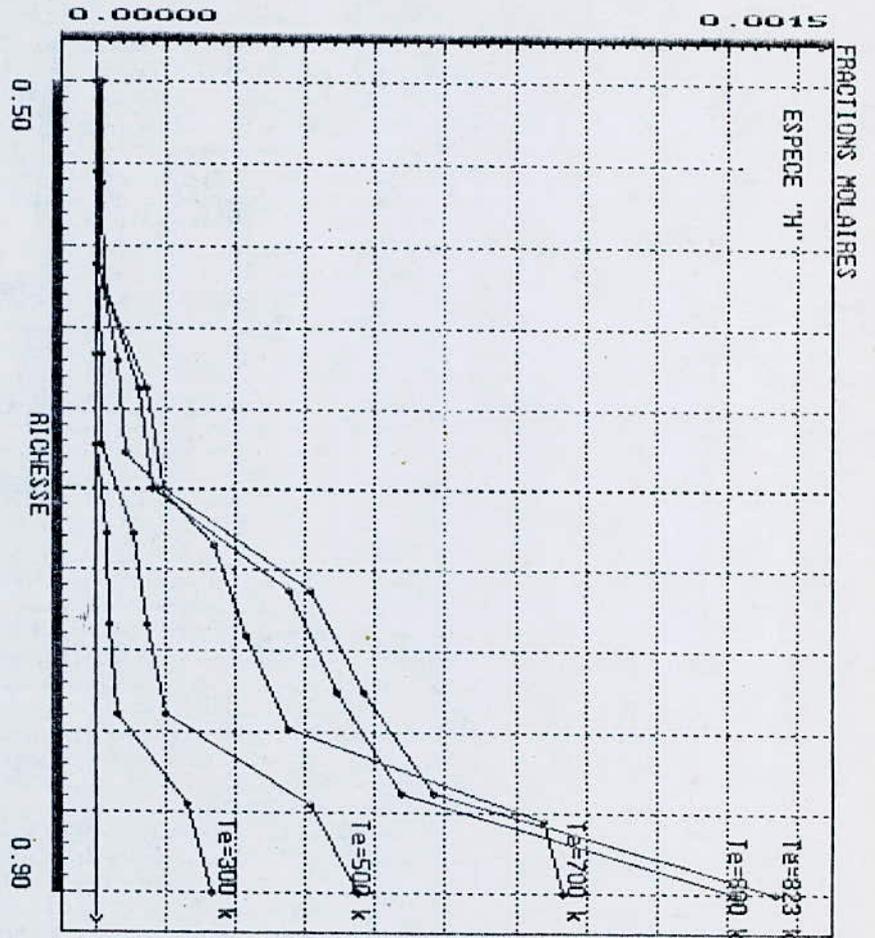


fig (III.9). Influence de la température d'entrée sur la variation de la concentration de mole formée de l'espèce " H " en fonction de la richesse. (P = 1 atm)

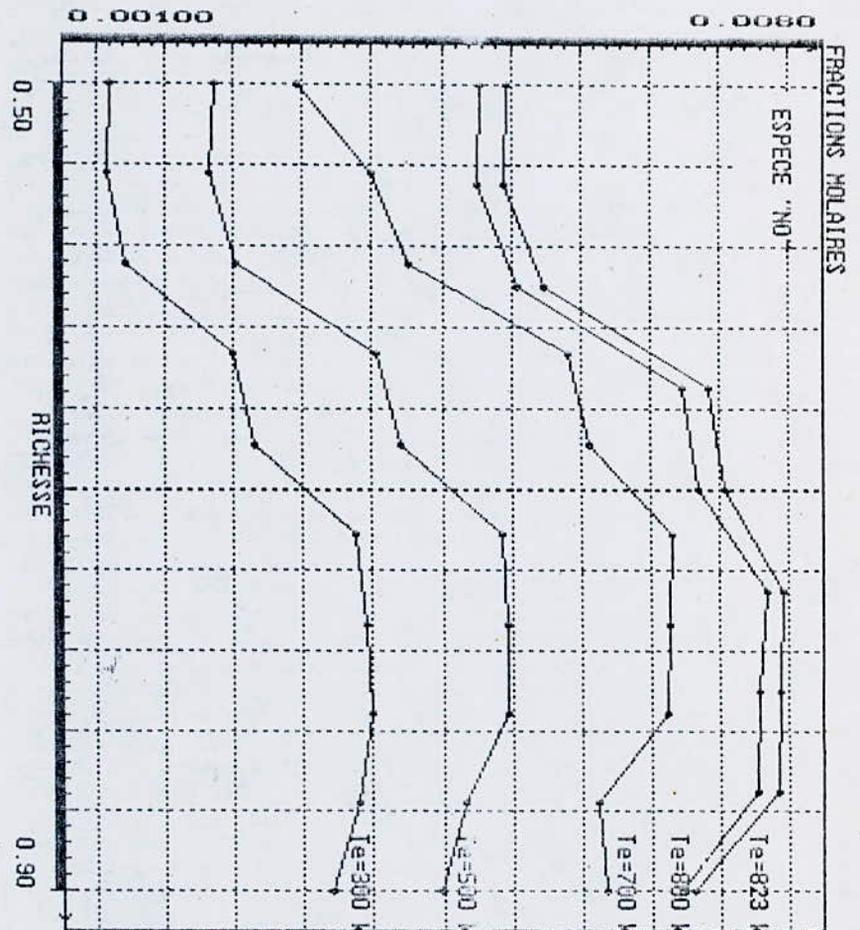


fig (III.10). Influence de la température d'entrée sur la variation de la concentration de mole formée de l'espèce " NO " en fonction de la richesse. (P = 1 atm)

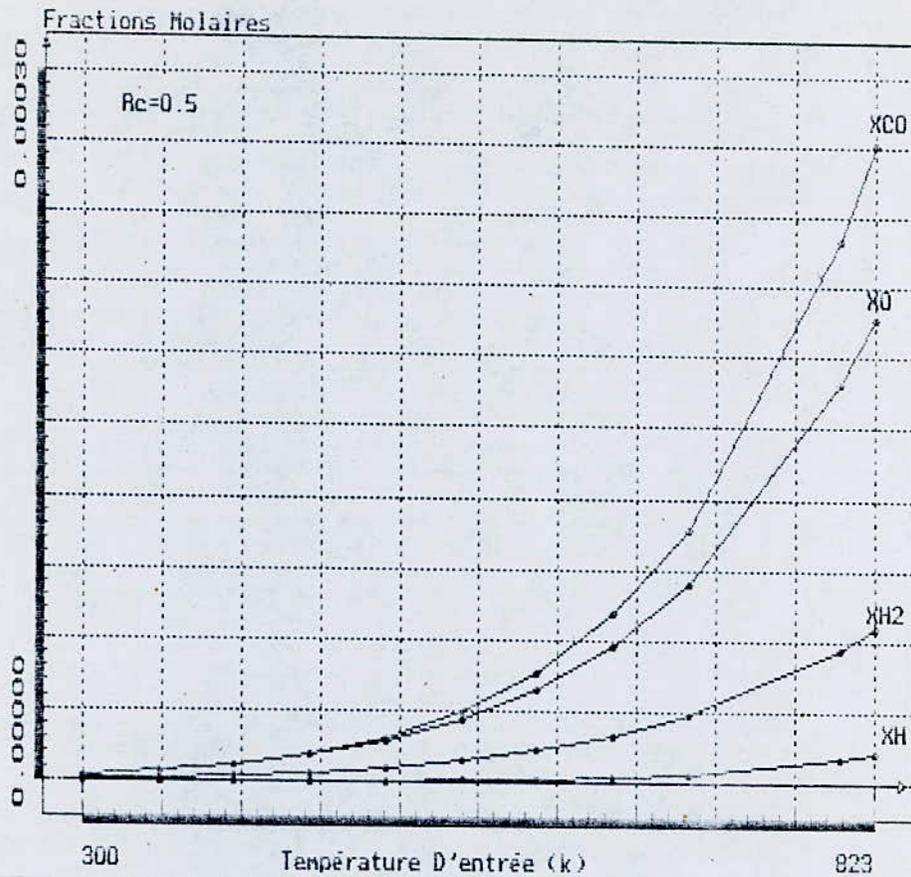


fig (IV.I). Variation des concentrations des moles formées en fonction de la température d'entrée (mélange air-kérosène: $P=1\text{atm}, R_c=0.5$) (espece : CO, O, H2, H)

fig (IV.I). Variation des concentrations des moles formées en fonction de la température d'entrée (mélange air-kérosène: $P=1atm, R_c=0.5$)
(espèce : NO , OH, O₂, H₂O , CO₂ , N₂)

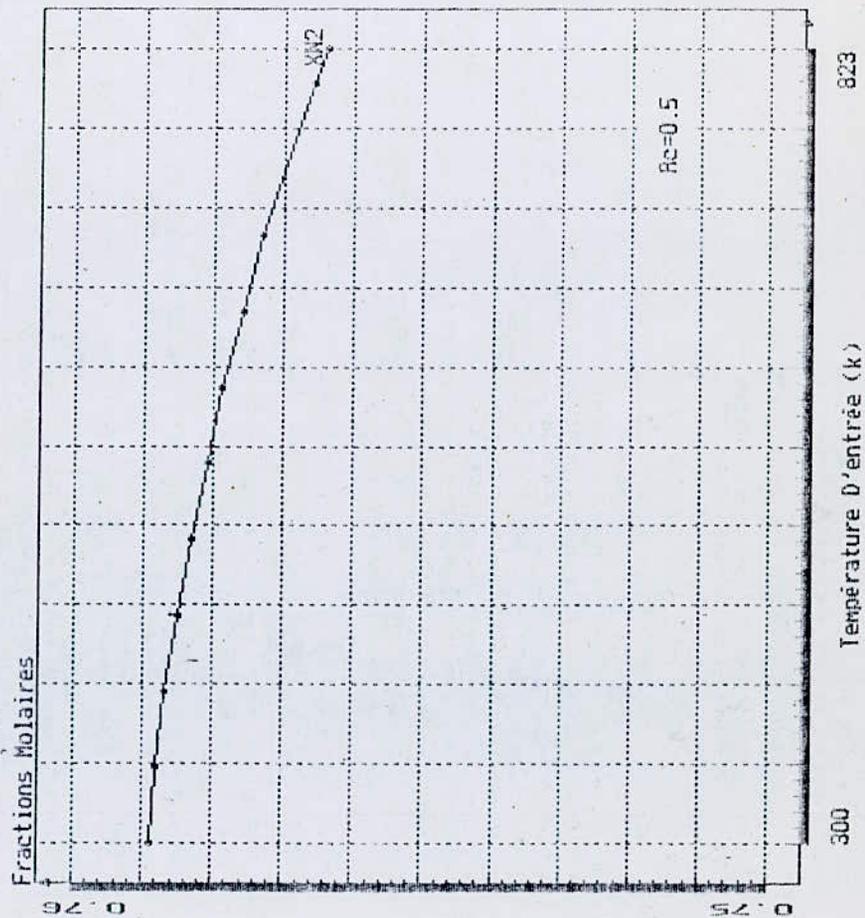
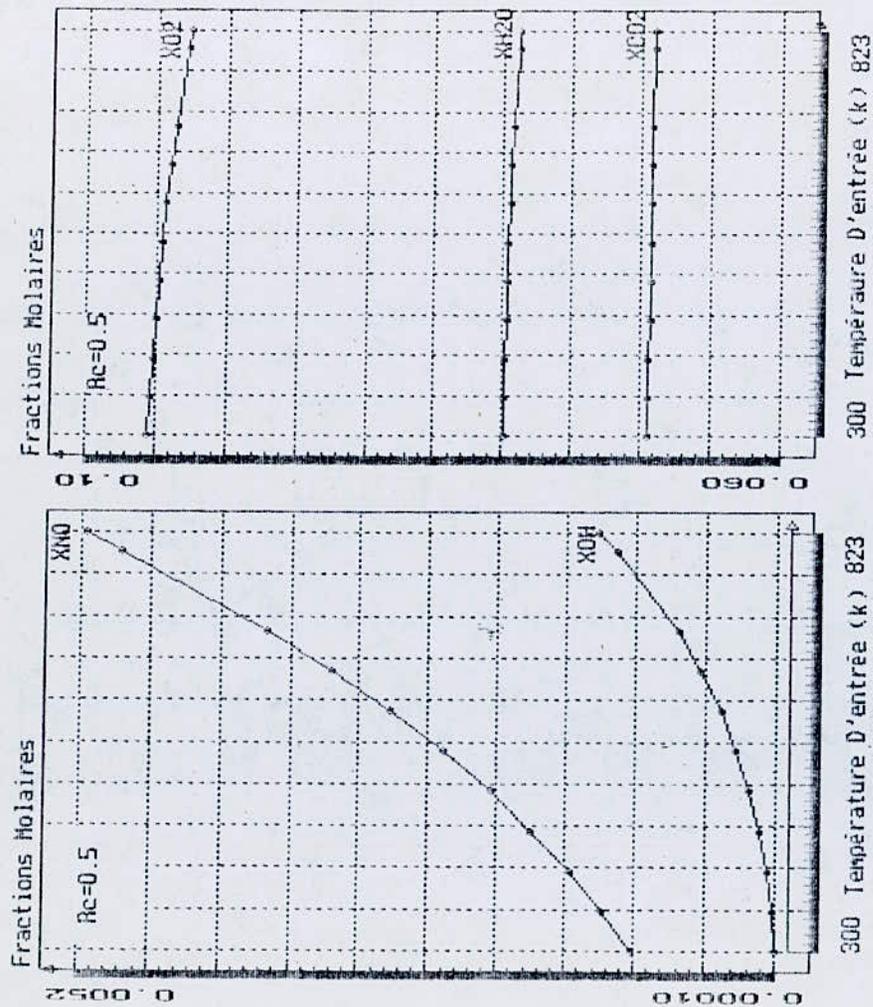


fig (V.I). Influence de la richesse sur la variation de la concentration des moles formées de l'espèce " O2 " et " H2O " en fonction de la température d'entrée T_2 .

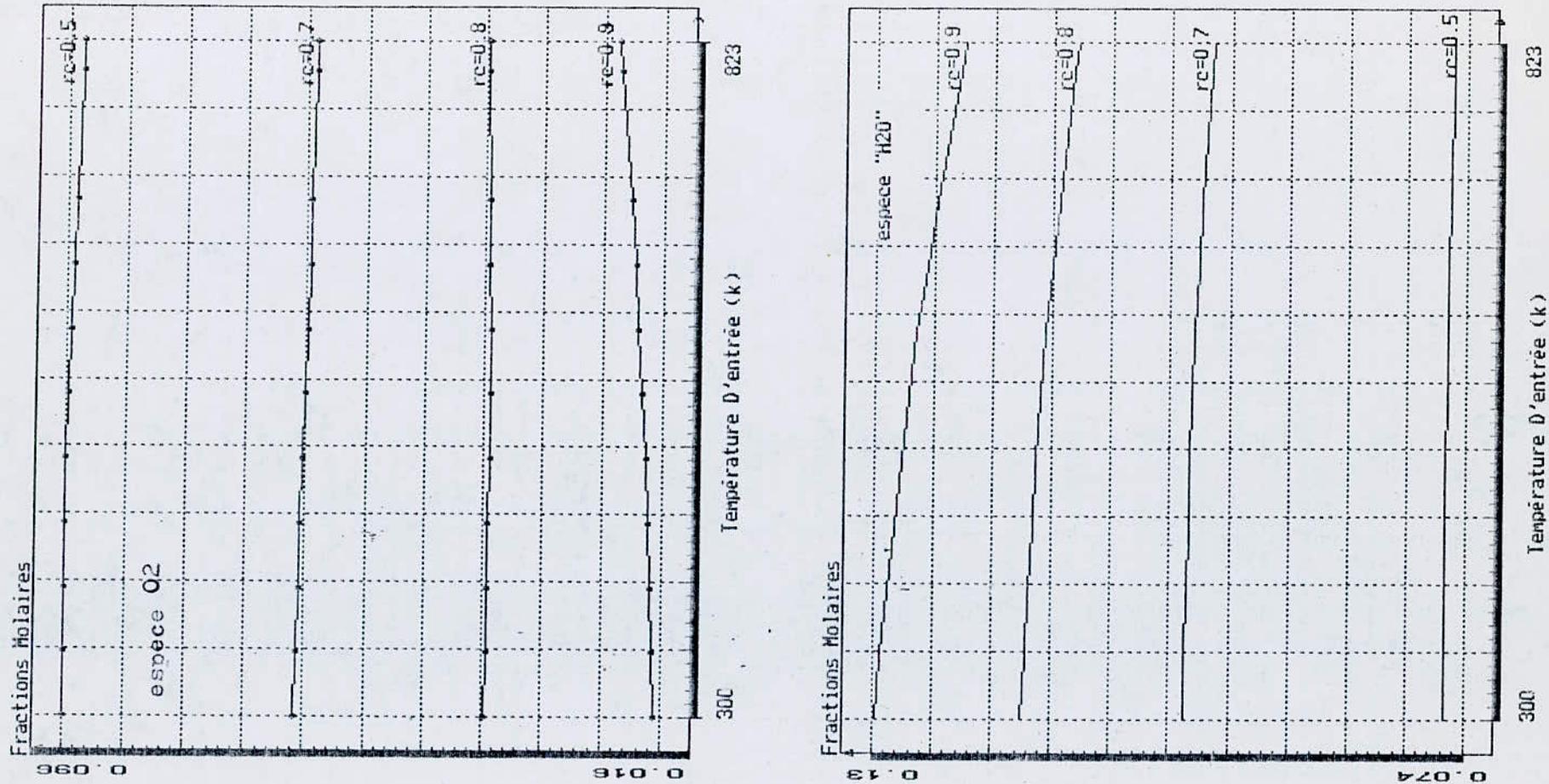


fig (V.2). Influence de la richesse sur la variation de la concentration des moles formées de l'espèce "NO" et "O" en fonction de la température d'entrée T_2 .

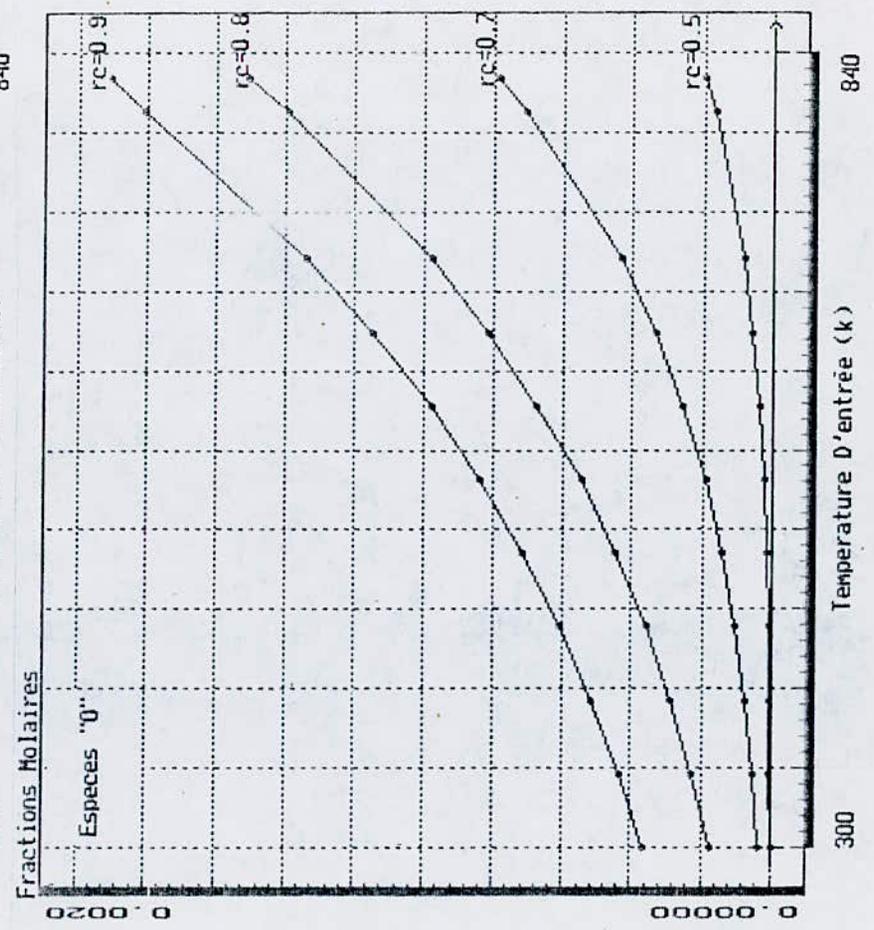
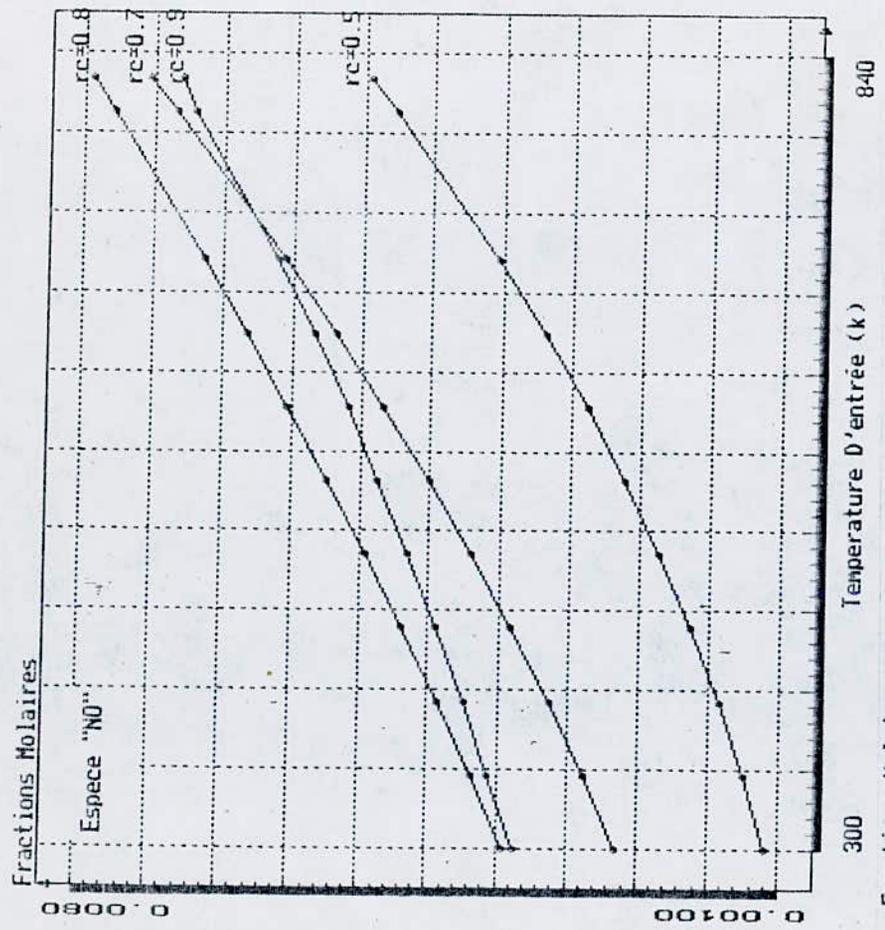


fig (V.3). Influence de la richesse sur la variation de la concentration des moles formées de l'espèce " CO " et " H2 " en fonction de la température d'entrée T_e

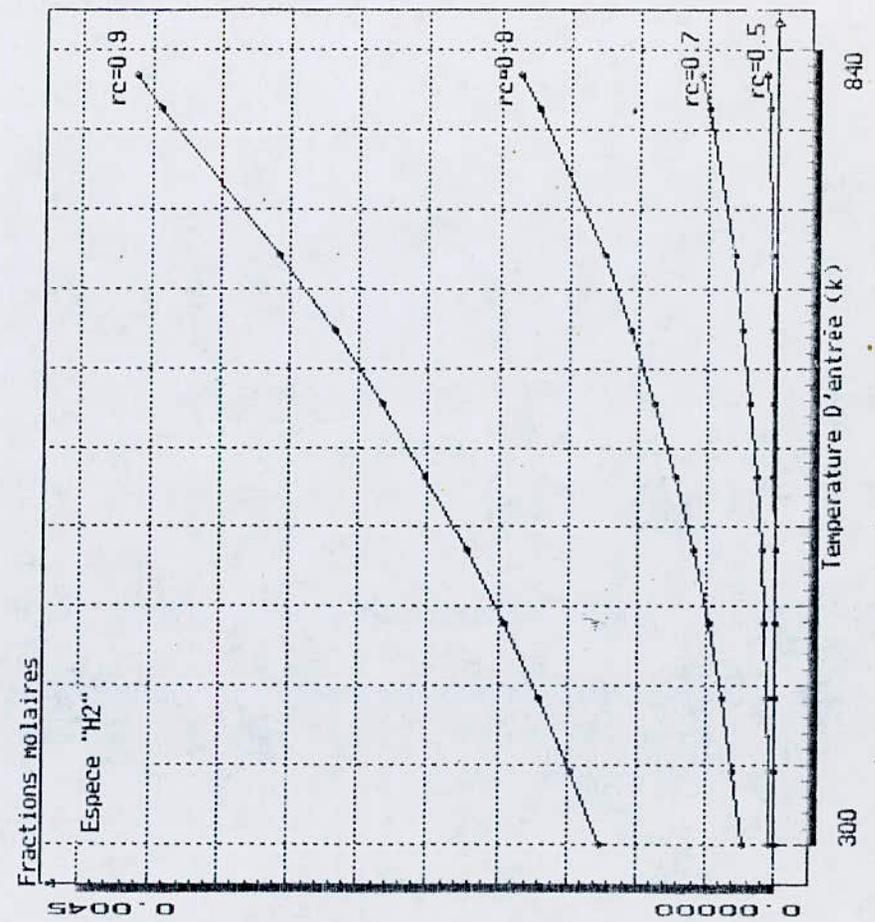
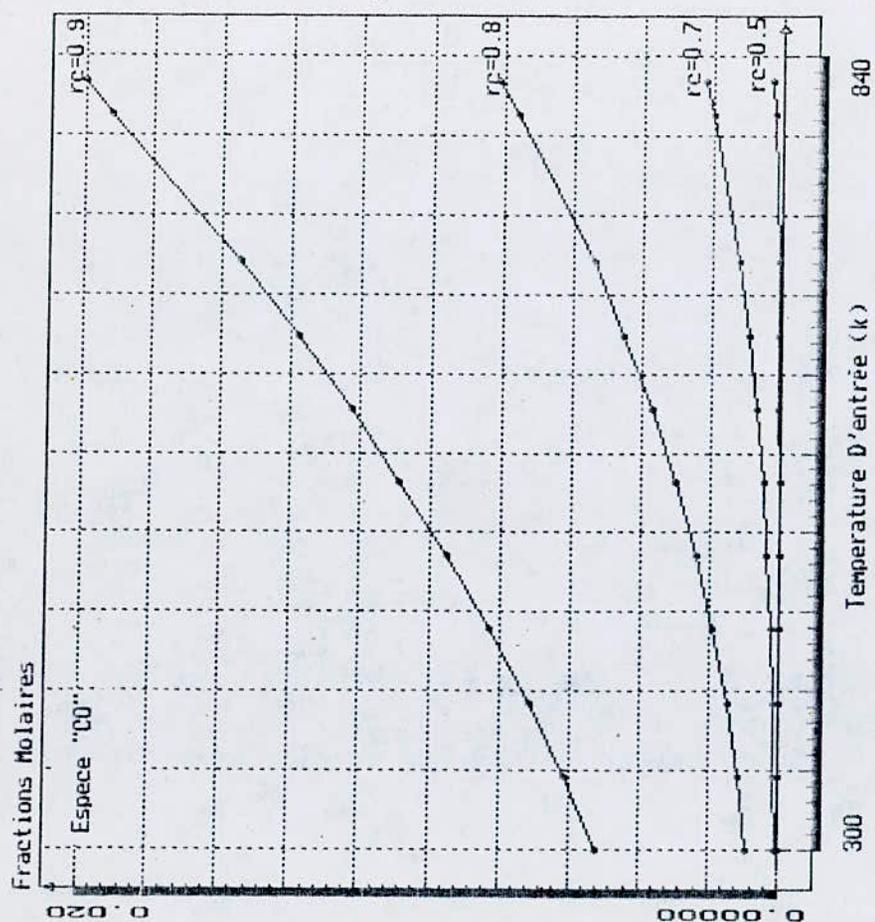


fig (V.4). Influence de la richesse sur la variation de la concentration des moles formées de l'espèce " H " et " OH " en fonction de la température d'entrée T_2

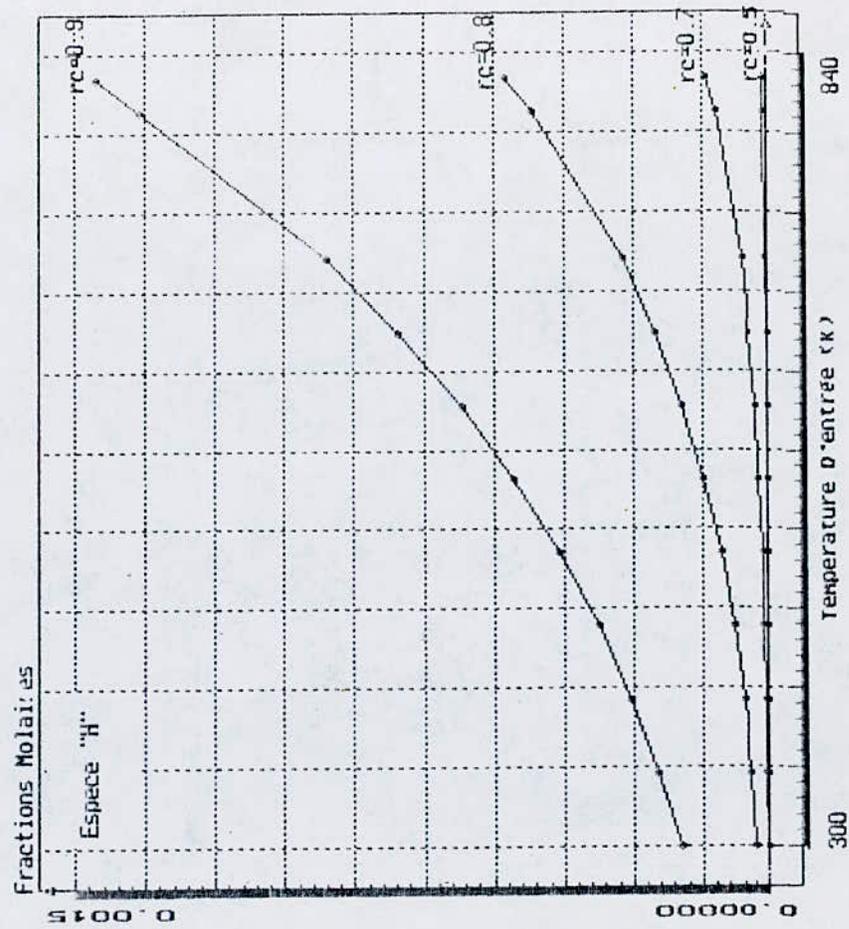
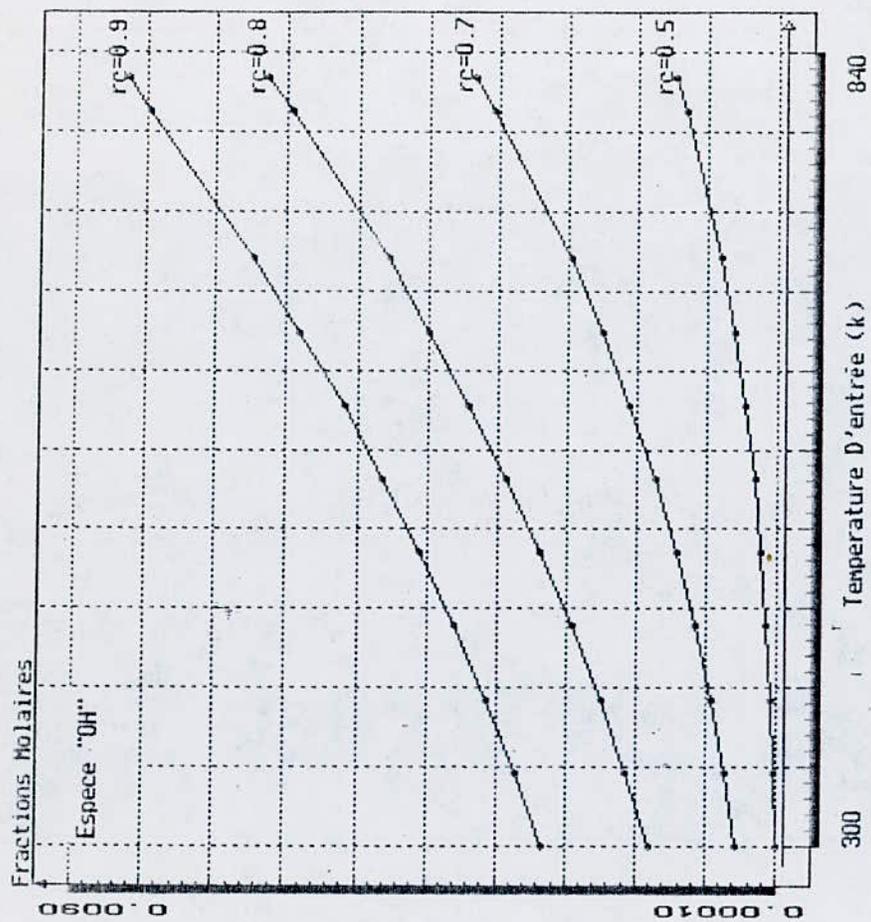
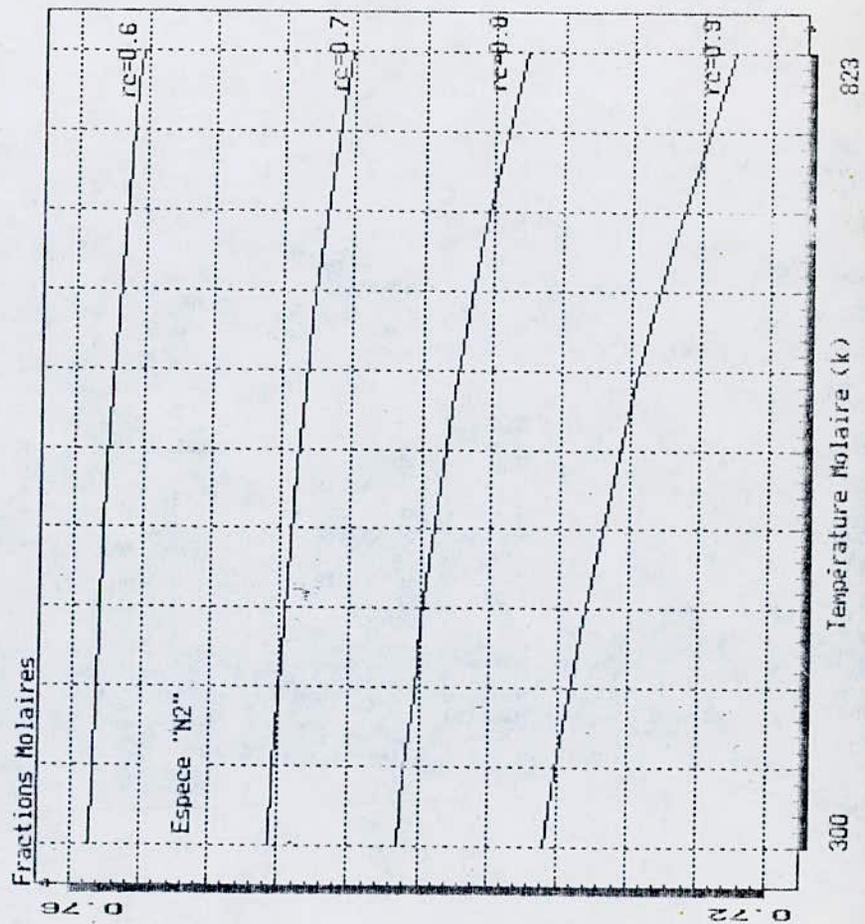
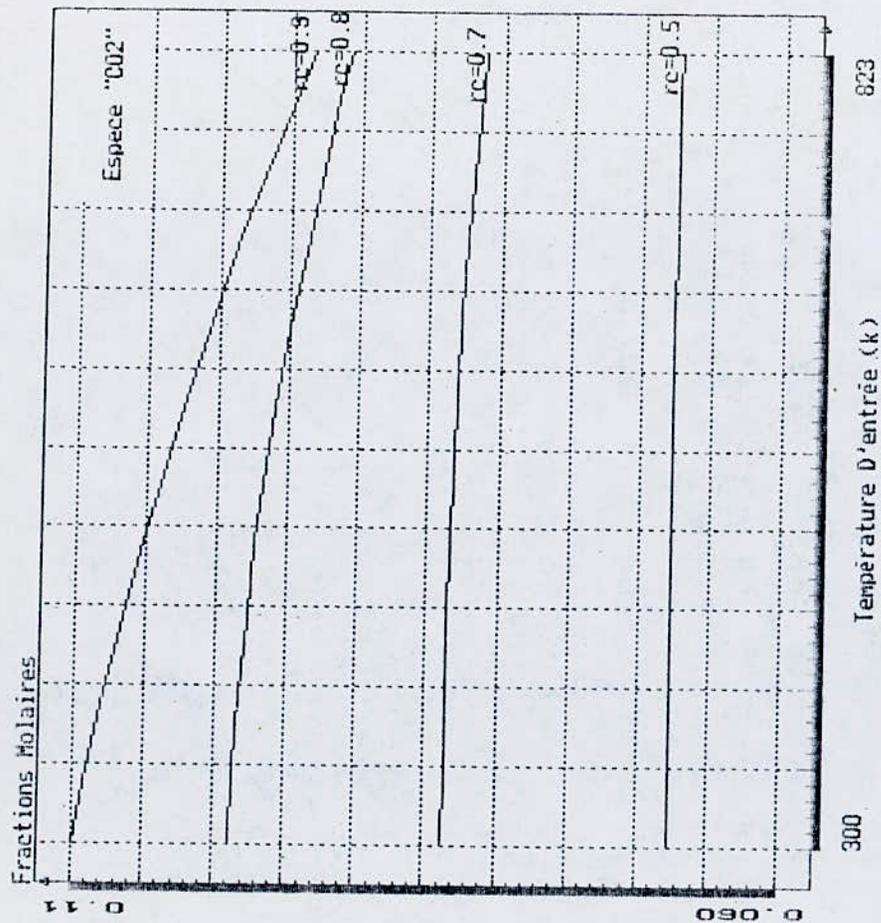


fig (V.5). Influence de la richesse sur la variation de la concentration des moles formées de l'espèce " CO2 " et " N2 " en fonction de la température d'entrée T_e .



BIBLIOGRAPHIE

- (1) PERTUIS .
" la combustion industrielle " . technip; paris. 1983
- (2) G.DE.SOETE .
" aspects fondamentaux de la combustion en phase gazeuse " . 1976
- (3) G.DE.SOETE .
" aspects physiques et chimiques de la combustion " . 1976
- (4) J.SIRUGUE & M.BARRERE .
" combustion " . 1963
- (5) A.VAN TIGGELEN
" oxydations et combustions " . tI . 1968
- (6) J.RAPPENEAU
" recherche sur la combustion d'un mélange d'hydrocarbures " . 1956
- (7) G.E.J MATTON
" considerations sur l'utilisation du méthane liquide par les avions de transport supersoniques " ; I.F.P. 1970
- (8) G. MATTON .
" combustion " ; fascicule . 1973
- (9) K. WINNACKER .
" génie chimique " . paris 1963. tI
- (10) M.L.SMITH & K.W.STINSON
"fuels and combustion " . new york 1952.
- (11) F.A.WILLIAMS .
" combustion theory " . london 1965

(I2) C.ROBERT .

" methodes de calculs thermodynamiques des équilibres en phase gazeuse " . 1957

(I3) J.DUCARME .

" progress in combustion science and technology " tI .

