

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية
RÉPUBLIQUE ALGÉRIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE

22/89

وزارة التعليم العالي
MINISTÈRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPÉRIEUR

المدرسة الوطنية المتعددة التقنيات
BIBLIOTHEQUE - المكتبة
Ecole Nationale Polytechnique

ECOLE NATIONALE POLYTECHNIQUE

Département : GENIE MECANIQUE

Projet de Fin d'Etudes

en vue de l'obtention d'un Ingénieur d'Etat

S U J E T

ETUDE ET LOGICIEL DE CALCUL
DES DEBITS D'ENERGIE DEGAGEE
PAR LA COMBUSTION ADIABATIQUE
DE L'ISO-OCTANE AVEC L'AIR

Proposé par :

Mr B. BENKOUSSAS

Etudié par :

Mr M.H. SENNOUN

Dirigé par :

Mr B. BENKOUSSAS

Promotion Juin 1989

E.N.P. : 10, Avenue Hacén Badi - EL-HARRACH - ALGER

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية
REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE

»O«

وزارة التعليم العالي
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR

المدرسة الوطنية المتعددة التقنيات
المكتبة — BIBLIOTHEQUE
Ecole Nationale Polytechnique

ECOLE NATIONALE POLYTECHNIQUE

Département : GENIE MECANIQUE

Projet de Fin d'Etudes

en vue de l'obtention d'un Ingéniorat d'Etat

S U J E T

ETUDE ET LOGICIEL DE CALCUL
DES DEBITS D'ENERGIE DEGAGEE
PAR LA COMBUSTION ADIABATIQUE
DE L'ISO - OCTANE AVEC L'AIR

Proposé par :

Mr B. BENKOUSSAS

Etudié par :

Mr M.H. SENNOUN

Dirigé par :

Mr B. BENKOUSSAS

Promotion Juin 1989

E.N.P. : 10, Avenue Hacem Badi - EL-HARRACH - ALGER

Etude de

Structure d'une
Flamme Plate

Laminaire

d' iso-octane-air

a basse pression

pour différentes
richesses

- stoechio

- riche

- pauvre

Ecole Nationale Polytechnique

المدرسة الوطنية المتعددة التقنيات
BIBLIOTHEQUE — المكتبة
Ecole Nationale Polytechnique

Departement de Genie Mecanique

Etudiant : M.H. SENNOUN

Promoteur : B. BENKOUSSAS

الموضوع : يهدف هذا المشروع إلى إعداد برنامج لإعلام آلي يسمح بوصف الظواهر الفيزيو-كيميائية ضمن الألسنة اللهبية وتحليل المعادلات الأساسية للألسنة اللهبية الصفيحية. وحيدة البعد وذلك بغية الحصول على تدفقات الطاقة الكيميائية الناتجة عن المزيج إينزو-أكتان-هواء في الحالات : مزيج مفتقر، مزيج متعادل و مزيج ثريا

Sujet: Le but de ce projet est d'élaborer un logiciel qui décrit les processus physico-chimiques dans les flammes et l'analyse des équations de base d'une flamme laminaire unidimensionnelle afin d'obtenir les débits d'énergie chimique libérée pour les mélanges iso-octane-air pauvre, stoechiométrique et riche.

Subject: The aim of the project is to write a computer program which describes the physico-chemical processes in flames. The basic equations of a unidimensional laminar flame were used, in order to derive chemical heat release rates for iso-octane-air mixtures at different equivalence ratios.

بِسْمِ اللّٰهِ الرَّحْمٰنِ الرَّحِیْمِ

الذی جعل لکم من الشجر الاُخضر نارا
فإذا أنتم منه توذون

سورة يس الآية (80)

أفرأيتم النار التي تورون ﴿٧١﴾
أنشأتم شجرتها أم نحن المنشئون ﴿٧٢﴾

سورة الواقعة الآية 71 و 72

« سبحانك لا علم لنا إلا ما علمتنا
إنا نك أنت العليم الحكيم »

Dédicaces

A mes chers parents

A mes chers frères et soeurs

A tous ceux qui m'aiment

Je dédie ce modeste mémoire

Hacin

Remerciements

Je tiens à exprimer toute ma gratitude à mon promoteur, Monsieur B.BENKOUSSAS qui m'a donné goût à la combustion.

Que tous ceux qui m'ont aidé dans ma tâche trouvent ici le témoignage de ma gratitude et ma reconnaissance.

Je remercie vivement Khaled et Ahmed.

Je ne saurai conclure sans remercier le personnel de la bibliothèque et celui du centre de calcul.

NOTATIONS ET UNITES

- Cp chaleur spécifique à pression constante, (Kj/Kg.K)
 H enthalpie spécifique, (Kj/Kg)
 H enthalpie molaire, (Kj/Kmole)
 λ conductivité thermique, (KW/m.K)
 M masse molaire, (Kg/Kmole)
 P pression, (atm)
 Pr nombre de PRANDTL
 T température absolue, (K)
 μ viscosité dynamique, (N.s/m)²
 Re nombre de REYNOLDS
 Nu nombre de NUSSELT
 h coefficient de convection, (KW/m .K)
 ρ densité, (Kg/m)³
 Xi fraction molaire
 v vitesse d'écoulement, (m/s)
 Vi vitesse de diffusion, (m/s)
 a aire de section, (m)²
 re résistivité, (Ω .cm)
 D diamètre, (m)
 ϵ/k paramètre potentiel (K)
 σ diamètre de collision (A)
 ϵ émissivité
 Ki débit de réaction (Kmole/sec.m)³
 Gi fraction du flux massique
 D_{ij} coefficient de diffusion (m)²/s)
 N densité totale des molécules (Kmole/m)³
 Li limite d'inflammabilité
 α absorption

CONSTANTES

- constante de STEFAN-BOLTZMANN
 $\sigma = 56.7 \cdot 10^{-12}$ (KW/m² K⁴)
 - constante universelle des gaz
 R_o = 8.3144 (KJ/Kmole)

INTRODUCTION

CHAPITRE I GENERALITES

I-ASPECTS GENERAUX DE LA COMBUSTION

I.1 Définitions

I.1.1 Auto-inflammation

I.1.2 Propagation

I.1.3 Limites d'inflammabilité

I.1.4 Stabilisation de la flamme

I.2 Caractérisation du milieu réactionnel

I.2.1 Composition de l'air sec

I.2.2 Combustibles

I.2.3 Proportions relatives entre le combustible et
le comburant

I.2.4 Pouvoir comburivore

I.2.5 Pouvoir fumigène

I.2.6 Pouvoir calorifique

I.2.7 Rendement thermo-chimique d'une combustion

CHAPITRE II- PROCESSUS PHYSIQUES FONDAMENTAUX DANS LES FLAMMES
ET ANALYSE DES EQUATIONS DE BASE D'UNE FLAMME
LAMINAIRE UNIDIMENSIONNELLE.

II.1 Théorie Aéro-thermo-cinétique

II.1.1 Vitesse moléculaire

- II.1.2 Densité massique
- II.1.3 Vitesse massique moyenne
- II.1.4 Equation d'état
- II.1.5 Equation de mouvement
- II.1.6 Equation de conservation d'énergie
- II.2 Equations de base simplifiées d'une flamme.
 - II.2.1 Vitesse de diffusion
 - II.2.2 Equation simplifiée de conservation des espèces
 - II.2.3 Equation simplifiée de conservation d'énergie
 - II.2.4 Débit d'énergie chimique libérée
 - II.2.4.1 Première méthode , Q_r
 - II.2.4.2 Deuxième méthode , Q_e

CHAPITRE III- METHODES DE MESURE EXPERIMENTAL ET DE CALCUL

INTRODUCTION

- III.1 Mesure des fractions molaires des espèces les plus stables
- III.2 Mesure des vitesses
- III.3 Mesure des températures
- III.4 Correction de la température
- III.5 Débit d'énergie chimique libérée
 - III.5.1 Q_e (méthode de l'équation d'énergie)
 - III.5.2 Q_r (méthode des débits de réactions)

CHAPITRE IV- COMMENTAIRES ET CONCLUSION

IV.1 Commentaires

IV.2 Conclusion

المدرسة الوطنية المتعددة التقنيات
BIBLIOTHEQUE — المكتبة
Ecole Nationale Polytechnique

APPENDICE

BIBLIOGRAPHIE

INTRODUCTION

Il y a des millénaires, l'homme acquérait "l'art du feu". Ce n'est qu'au cours de l'essor industriel du 19^e siècle que la combustion vive commençait à être valablement utilisée dans les machines pour répondre aux besoins énergétiques dans des domaines aussi divers que :

- la production d'énergie électrique ;
- le chauffage des locaux ;
- l'élaboration des matériaux de construction ;
- la sidérurgie ;
- les transports terrestres, aériens, et cosmiques ;
- la synthèse de nombreux produits chimiques au sein de la flamme (acétylène par exemple) ;
- la production des hydrocarbures à partir du pétrole brut.

La maîtrise des combustions obtenues dans des conditions aussi variées nécessite :

- la mise en oeuvre de puissants outils tels que la chimie, la thermodynamique, et l'aérodynamique .
- un savoir faire permettant une mise en oeuvre optimale tant sur le plan énergétique que sur le plan de nuisances (pollution atmosphérique, bruit).

Par exemple, dans les turbo-réacteurs, il est indispensable de contrôler la température des gaz de combustion à l'entrée de la turbine. La longueur de la chambre de combustion

est passée de 1m (1950) à une dizaine de centimètres (1987),[17]. La combustion en écoulement fortement turbulent ne fait à l'heure l'objet actuelle d'aucune théorie satisfaisante, y compris le cas le plus élémentaire d'une seule phase gazeuse et d'une cinétique chimique réduite à une seule réaction chimique. L'état des connaissances est encore plus mauvais en combustion diphasique. La simulation numérique directe d'un écoulement turbulent non réactif n'est actuellement possible sur les ordinateurs les plus puissants que pour des nombres de Reynolds de quelques centaines et pour des configurations géométriques idéales très éloignées des conditions des écoulements internes dans les chambres de combustion où le nombre de Reynolds peut dépasser 100000.

Enfin la réaction chimique du moindre hydrocarbure met en jeu plus de 300 réactions élémentaires et plus de 50 espèces intermédiaires avec des échelles de temps et d'espace de l'ordre du micron (μs et μm).

Dans la présente thèse, on s'attachera à décrire les phénomènes essentiels gouvernant le processus de combustion d'une flamme plate laminaire, ainsi que l'obtention, à travers la flamme, des débits d'énergie chimique libérée pour les mélanges iso-octane-air pauvre, stoechiométrique, et riche. Cette étude fournit des informations fondamentales de base à la modélisation des flammes turbulentes.

Une des méthodes sur laquelle travaillent les chercheurs actuellement est la méthode des flammelettes, proposée pour la première fois par K.N.C. BRAY [16] en 1981. Cette méthode consiste à représenter le milieu réactif turbulent par une collection de flammellettes de type laminaire, déplacées et étirées(plates). En étudiant séparément de telles flammelettes plus ou moins étirées, on arrive à modéliser la flamme turbulente. L'avantage d'une telle méthode est que l'on peut calculer les flammelettes séparément, et une bibliothèque de tels calculs est actuellement en cours d'établissement.

CHAPITRE 1 -GENERALITES

I.1 ASPECTS GENERAUX DE LA COMBUSTION

I.1 Définitions

La combustion est une chaîne de réactions mettant en jeu deux espèces : le comburant (oxydant) et le combustible (réducteur) dont l'ensemble constitue le milieu réactionnel. La combustion peut être soit lente soit vive . La combustion comprend deux phénomènes essentiels qui sont :

- l'auto-inflammation ;
- la propagation .

le deuxième phénomène s'il existe est la conséquence du premier . Un milieu réactionnel est défini par les trois paramètres physiques suivants :

- Pression ,P
- Température ,T
- Concentration en combustible X_i , ou plus généralement la composition des réactifs .

I.1.1 Auto-inflammation

Pour un mélange donné, si les trois paramètres P,T, X_i , atteignent ou dépassent un certain seuil critique, on a une auto-inflammation. L'oxydation lente exothermique est auto-accélérée jusqu'à l'emballement .

I.1.2 Propagation

L'auto-inflammation ayant été déclenchée, il peut y avoir ou non propagation de la réaction de combustion dans le reste du mélange. La propagation ne peut avoir lieu que si les trois paramètres P, T, X_i atteignent ou dépassent un certain seuil critique.

La propagation est dite déflagration si la vitesse est subsonique (en général quelques cm/s à quelques m/s); et elle est dite détonation si la vitesse de propagation est supersonique (quelques km/s). Dans la pratique courante, la déflagration est la forme normale et contrôlée de la propagation dans les machines thermiques : fuseés, réacteur, moteurs, fours,....etc.

1.1.3 Limites d'inflammabilité

La combustion nécessite la mise en présence de combustible et de comburant. Leur proportions relatives ne doivent pas être trop éloignées des proportions stoechiométriques correspondant à la combustion neutre. Si L représente le % de gaz combustible dans le mélange, la combustion ne peut se produire que si L est compris entre deux limites inférieure et supérieure L_i et L_s .

- si $L < L_i$ il n'y a pas assez de combustible

- si $L > L_s$ il n'y a pas assez d'oxygène.

Le rapport stoechiométrique est évidemment compris entre L_i et L_s . Lorsqu'un gaz est une combinaison de gaz combustibles sans inertes, sa limite d'inflammabilité inférieure (ou supérieure) est

donnée par la loi de LE CHATELIER :

$$\frac{1}{L} = \sum \frac{n_k}{L_k}$$

où L_k : limite d'inflammabilité inférieure (ou supérieure) du composant dont le pourcentage est n_k . Le domaine d'inflammabilité dépend de la température, la pression, la nature du comburant, les dimensions de l'enceinte, et de l'énergie d'allumage.

I.1.4. Stabilisation du front de flamme

Un front de flamme pourra se stabiliser en un point de l'espace si, en ce point, les trois conditions suivantes sont simultanément remplies :

- la concentration en combustible est comprise entre les limites d'inflammabilité ;
- l'énergie disponible est suffisante pour déclencher le mécanisme réactionnel ;
- la vitesse de déflagration est égale et opposée à la vitesse du mélange.

I.1.4 Caractérisation du milieu réactionnel

I.1.2 Composition de l'air sec

Le tableau ci-dessous donne une composition

caractéristique de l'air sec

Constituants	% en volume	% en masse
Azote	78.01	75.53
Oxygène	20.95	23.14
Argon	0.93	1.28
Anhyd Carbo	0.032	0.046
Néon	1.80E-03	1.25E-03
Hélium	5.24E-04	7.24E-05
Méthane	1.40E-04	7.75E-05
Krypton	1.14E-04	3.30E-04
Protoxyde d'Azote	5.00E-05	7.60E-05

I.2.2 Combustible

Un combustible conventionnel est un mélange complexe de composés organiques divers dans lesquels on retrouve les éléments suivants :

Elément	Masse
- Carbone	C = 12.01
- Hydrogène	H = 1.0081
- Oxygène	O = 16.000
- Azote	N = 14.008
- Soufre	S = 32.060

Ainsi d'une manière générale un combustible pourrait être représenté par la formule chimique globale : $C_n H_m O_p N_q S_t$

Le tableau ci-dessous représente quelques familles d'hydrocarbures

Famille	Formule	Structure	Satureé
Paraffinés	$C_n H_{2n+2}$	chaîne ouverte	oui
Oléfinés	$C_n H_{2n}$	chaîne ouverte	non
Dioléfinés	$C_n H_{2n-2}$	chaîne ouverte	non
Naphténés	$C_n H_{2n}$	chaîne fermée	oui
Benzene arom	$C_n H_{2n-6}$	chaîne fermée	non
Naphtalénés	$C_n H_{2n-12}$	chaîne fermée	non

1.2.3 Proportions relatives entre combustible et comburant

Un procédé commode consiste à comparer le rapport (combustible/comburant) à un rapport de référence, dit rapport de stoechiométrie. L'expression (1.2) définit la richesse du milieu réactionnel.

$$\phi = \frac{\left\{ \frac{\text{combustible}}{\text{comburant}} \right\} \text{ donnée}}{\left\{ \frac{\text{combustible}}{\text{comburant}} \right\} \text{ stoechio}} \quad (1.2)$$

- si $\phi = 1$, mélange stoechiométrique

la combustion est complète

- si $\phi < 1$, mélange pauvre

la combustion est oxydante

- si $\phi > 1$, mélange riche

la combustion est partielle (défaut de comburant).

On définit les paramètres e et d sans dimensions tels que :

- pour $\phi < 1$, on a un excès de comburant;

$$e (\%) = 100 \frac{1 - \phi}{\phi} \quad (1.3)$$

- pour $\phi > 1$, on a défaut de comburant;

$$d (\%) = 100 \frac{\phi - 1}{\phi} \quad (1.4)$$

C'est ainsi que la combustion à $\phi = 1.0$, dite combustion stoechiométrique , exprime le fait que dans le milieu réactionnel, la quantité de comburant utilisée est telle que s'y trouve présente la quantité d'oxygène, strictement nécessaire pour conduire théoriquement à l'oxydation complète du combustible, c'est à dire à la transformation de :

- C en CO_2

- H_2 en H_2O

- S en SO_2

1.2.4 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 (totale).

I.2.5 Pouvoir fumigène

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

I.2.6 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".

I.2.8 Rendement thermo-chimique d'une combustion

La quantité de chaleur que dégage la combustion réelle d'une unité de combustible 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 II- PROCESSUS PHYSIQUES FONDAMENTAUX DANS LES FLAMMES
ET ANALYSE DES EQUATIONS DE BASE D'UNE FLAMME
LAMINAIRE UNIDIMENSIONNELLE

II.1 Theorie Aéro-Thermo-cinétique

Les équations fondamentales gouvernant les phénomènes physiques dans les flammes sont très complexes et difficiles à exploiter. Par conséquent, de nombreuses simplifications doivent être introduites. Ces simplifications se regroupent en :

- 1- Les gradients des variables macroscopiques de la flamme (température, densité,...) sont si petits que la variation de ces quantités se produit sur des distances largement comparable au libre parcours moyen des molécules.
- 2- On considère que les collisions binaires car les densités des gaz sont assez faibles.
- 3- Le gaz est composé de particules qui subissent des collisions élastiques (pas de degré de liberté interne) et qui ont un champ de force symétrique et sphérique.
- 4- Les collisions des particules sont traités avec la mécanique classique.

Le concept de la fonction de distribution moléculaire $f_i(r, v_i, t)$, est donnée par :

$$dn_i = f_i (r, v_i, t). dr. dv_i \quad (2.1)$$

où, r : position

v_i : vitesse

t : temps

f_i : loi de Maxwell-Boltzmann

$$f_i = n \left\{ \frac{m_i}{2\pi kT} \right\}^{3/2} \exp \left\{ - \frac{m_i v_i^2}{2 k T} \right\} \quad (2.2)$$

où, n : densité totale des molécules

m_i :masse moléculaire de l'espèce i

k :constante de Boltzmann

v_i :valeur absolue de v_i

T :Température absolue

II.1.1 Vitesse moléculaire

$$\bar{v}_i = \frac{1}{n_i} \int v_i f_i (r, v, t) dv_i \quad (2.3)$$

II.1.2 Densité massique

$$\rho (r, t) = \sum n_i m_i \quad (2.4)$$

II.1.3 Vitesse Massique Moyenne

$$v (r, t) = \frac{1}{\rho} \sum n_i m_i \bar{v}_i \quad (2.5)$$

Il convient de définir la vitesse de diffusion V_i , qui représente l'écoulement macroscopique de l'espèce i relative à la vitesse massique moyenne;

$$V_i = \bar{v}_i - v \quad (2.6)$$

les Eqs (2.4) à (2.6) montrent que :

$$\sum_i n_i m_i V_i = \sum_i n_i m_i (\bar{v}_i - v) \quad (2.7)$$

qui affirme qu'il n'y a pas de flux massique net par diffusion.

II.1.4 Equation d'état de gaz parfait

$$P = N.R.T \quad (2.8)$$

où, N : nombre de densité molaire, et comme $N = \sum_i N_i$
 l'équation de continuité de l'espèce i est donnée par :

$$\frac{\partial N_i}{\partial t} + \nabla \cdot [N_i (v + V_i)] = K_i \quad (2.9)$$

où, K_i : taux molaire net d'apparition ou de disparition de l'espèce i par unité de volume par unité de temps du à la réaction

chimique.

La réaction chimique ne crée pas et ne détruit pas la matière, par conséquent

$$\sum_i M_i K_i = 0 \quad (2.10)$$

Si l'Eq (2.9) est multipliée par M_i et en faisant la sommation pour tous les éléments i , l'équation de continuité devient :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho v) = 0 \quad (2.11)$$

II.1.5 Equation de mouvement

En négligeant les forces externes l'équation de mouvement s'écrit comme suit;

$$\frac{\partial v}{\partial t} + v \cdot \nabla v + \frac{1}{\rho} \nabla \cdot P = 0 \quad (2.12)$$

II.1.6 Equation de conservation d'énergie

$$\frac{\partial \hat{H}}{\partial t} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial t} + v \cdot \nabla \hat{H} - \frac{1}{\rho} [\nabla \cdot (Pv) - \nabla \cdot (q + q_R)] - P \cdot \nabla v = 0 \quad (2.13)$$

où \hat{H} : enthalpie spécifique du mélange

$q + q_R$: vecteur flux d'énergie

Les équations (2.9), (2.11), et (2.13) sont les relations fondamentales gouvernant la dynamique de toute réaction d'un mélange. Dans le but d'utiliser ces équations, il est nécessaire de les simplifier, en plus de l'évaluation des paramètres tels que les coefficients de transport.

Les équations de base régissant la flamme contiennent les vitesses de diffusion des espèces V_i , le vecteur flux d'énergie $q + q_R$, et le tenseur de pression P . Ceux-ci sont associés aux flux de matière, d'énergie, et à la force.

La solution de l'équation de BOLTZMANN donne une expression de la vitesse de diffusion V_i

$$V_i = \frac{N^2}{N_i \rho} \sum_j M_j D_{ij} \left[\nabla \frac{N_i}{N} + \left(\frac{N_i}{N} - \frac{N_j M_j}{\rho} \right) \nabla \ln P \right] - \frac{1}{N_i M_i} D_i^T \nabla \ln T \quad (2.14)$$

où D_{ij} : coefficient de diffusion binaire (avec $D_{ii} = 0$)

D_i^T : coefficient de diffusion thermique

L'équation (2.14) affirme que la vitesse de

diffusion est proportionnelle au gradient de sa concentration, au gradient de sa pression, et au gradient de sa température .

D'une manière similaire, le vecteur flux d'énergie est donné par l'équation (2.15)

$$q + q_R = -\lambda \nabla T + \sum_i N_i H_i V_i + \frac{RT}{N} \sum_{i,j} \frac{N_j D_{ij}^T}{M_i D_{ij}} (V_i - V_j) + q_R \quad (2.15)$$

où H_i : enthalpie molaire de l'espèce i ;

λ : conductivité thermique

q_R : contribution du au rayonnement.

Cette relation affirme que le flux d'énergie à travers le mélange contient les contributions de, la conduction, la convection, le rayonnement, la diffusion, et la diffusion thermique réciproque (effet DUFOR).

La part du rayonnement dans le vecteur flux d'énergie est donné par l'équation (2.16)

$$\nabla \cdot q_R = R_e - R_a \quad (2.16)$$

où R_e : taux d'émission par unité de volume

R_a : taux d'absorption par unité de volume (peut être négligé).

Dans notre étude la contribution due au rayonnement sera traitée

au Chap III, section III.4

II.2 Equations de base simplifiée d'une flamme

Pour la flamme laminaire nous avons les conditions suivantes :

-Régime permanent : toutes les variables macroscopiques, en tout point de la flamme, sont indépendantes du temps .

-C'est essentiellement un système à pression constante, donc l'équation de mouvement peut être négligée, ainsi que tous les effets dus aux gradients de pression .

-Les effets dus à la viscosité, rayonnement, et forces externes sont négligeables.

-L'effet de diffusion thermique réciproque (DUFOUR) est négligé .

Avec ces restrictions les équations de base gouvernant la flamme deviennent;

* L'équation de conservation de masse

$$\nabla \cdot (\rho v) = 0 \quad (2.17)$$

affirme que le divergence du flux total de matière (kg/sec.m)² est

nul en tout point de la flamme .

* L'équation de conservation de l'espèce

$$\nabla \cdot [N_i (v + V_i)] = K_i \quad (2.18)$$

affirme que le divergence du flux d'espèce i , en tout point de la flamme, doit être égal à son taux d'apparition ou de disparition (mole/sec.m³) dû à la réaction chimique .

* L'équation de conservation d'énergie

$$\nabla \cdot (\rho \hat{H} v + \sum N_i H_i V_i - \lambda \nabla T) = 0 \quad (2.19)$$

où l'enthalpie spécifique du mélange H est donnée par

$$\hat{H} = (1/\rho) \sum_i N_i H_i \quad (2.20)$$

affirme que le divergence du flux total d'énergie ,ie, la somme des termes dus à la convection, diffusion, et conduction, doit être nul en tout point de la flamme .

* L'équation d'état

$$P = N R T \quad (2.21)$$

* La vitesse de diffusion

$$V_i = \frac{N_i^2}{N_i \rho} \sum_j M_j D_{ij} \nabla \frac{N_j}{N} - \frac{D_{ij}^T}{N_i M_i} \nabla \ln T \quad (2.22)$$

qui est la loi de FICK généralisée à trois dimensions, pour un système à multi-composants, le dernier terme est la contribution de la diffusion thermique .

Maintenant, dans toute l'analyse qui va suivre, on s'intéressera seulement à la forme unidimensionnelle de ces équations de base, du moment que les données expérimentales de la structure de la flamme ont été faite suivant l'axe vertical.

Mathématiquement, l'approximation quasi unidimensionnelle dérive du théorème suivant :

$$\iint_S \langle \nabla \cdot \mathbf{F} \rangle dx dy = \frac{d}{dz} \iint_S F_z dx dy \quad (2.23)$$

les équations (2.17) et (2.23) donnent

$$\iint_S \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) dx dy = \frac{d}{dz} \iint_S \rho v \frac{dx dy}{z}$$

ou encore

$$\iint_S \rho v dx dy = \text{constante} \quad (2.24)$$

Finalemment

$$\rho v a = \text{const} \quad (2.25)$$

Si l'indice o dénote un point de référence, comme par exemple, la limite froide d'une d'une flamme plate, l'équation (2.25) peut s'écrire comme:

$$\begin{aligned} \rho v a &= \rho_o v_o a_o \\ \rho v A &= \rho_o v_o = m \end{aligned} \quad (2.26)$$

où $A = \frac{a}{a_o}$ rapport de section

m : débit massique d'écoulement par unité de section au point de référence .

D'une manière similaire, les autres équations peuvent se réduire à une dimension pour une flamme plate réelle avec expansion latérale . L'équation (2.18) devient :

$$\frac{d}{dz} \left[N_i (v + V_i) A \right] = K_i A \quad (2.27)$$

L'équation d'énergie (2.21) devient (après intégration)

$$\rho_o v_o \hat{H} + A \sum N_i H_i V_i - A \lambda \frac{dT}{dz} = \text{const} \quad (2.28)$$

La vitesse de diffusion dans le cas unidimensionnel est :

$$V_i = \frac{N^2}{N_i \rho} \sum_j M_j D_{ij} \frac{d}{dz} \frac{N_j}{N} - \frac{D_i^T}{N_i M_i} \frac{d \ln T}{dz} \quad (2.29)$$

Les équations (2.21), (2.26), (2.27), (2.28), et (2.29) sont les équations de base pour les flammes plates réalisées en laboratoire.

Pour une flamme à géométrie symétrique et sphérique les équations de base sont les suivantes :

* L'équation de continuité

$$m = 4 \pi r^2 v = 4 \pi \rho v_0 \quad (2.30)$$

* L'équation de conservation de l'espèce

$$\frac{d}{dr} \left[r^2 N_i (v + V_i) \right] = r^2 K_i \quad (2.31)$$

* L'équation de conservation d'énergie

$$r^2 \left(\rho \hat{H} v + \sum_i N_i H_i V_i - \lambda \frac{dT}{dr} \right) = \text{const} \quad (2.32)$$

* La vitesse de diffusion radiale

$$V_i = \frac{N^2}{N_i \rho} \sum_j M_j D_{ij} \frac{d}{dr} \frac{N_j}{N} - \frac{D_i^T}{N_i M_i} \frac{d \ln T}{dr} \quad (2.33)$$

dans ces équations v est la vitesse radiale moyenne de l'espèce.

Il convient, dans l'analyse des données de la structure de la flamme, de poser;

$$G_i = \frac{N_i M_i (v + v_i)}{\rho v} \quad (2.34)$$

où G_i : fraction du flux massique de l'espèce . Il représente la fraction du flux massique total par unité de surface, qui est due à l'espèce i et renferme la contribution de la convection et de la diffusion .

Par définition de la vitesse de diffusion, on a :

$$\sum N_i M_i v_i = 0$$

et à partir de l'équation (2.34)

$$\sum G_i = 1$$

Les équations (2.21), (2.26), (2.29), et (2.34) donnent;

$$\frac{\rho_o v_o}{M_i} \frac{d G_i}{d z} = K_i A \quad (2.35)$$

$$\rho_o v_o \sum \frac{H_i G_i}{M_i} - A \lambda \frac{d T}{d z} = \rho_o v_o \hat{H}_\infty \quad (2.36)$$

car $\hat{H}_\infty = H_o$

Pour la flamme sphérique, d'après les équations (2.21), (2.30), (2.33), et (2.34) on a :

$$\frac{m_s}{4 \pi M_i} \frac{d G_i}{d r} = h^2 K_i \quad (2.37)$$

$$\sum_i \frac{H_i G_i}{M_i} - \frac{4 \pi r^2 \lambda}{m_s} \frac{d T}{d r} = \hat{H}_1^\infty \quad (2.38)$$

II.2.1 Vitesse de diffusion

Usuellement, les données de la flamme sont obtenues dans un système, où, une espèce j est un diluent présent en excès, de telle sorte que, l'autre espèce i soit traitée comme une trace dans un mélange binaire avec j . Dans ce cas, les équations (2.29) et (2.33) deviennent :

$$\text{plane : } V_i = - \frac{N D_{ij}}{N_i} \frac{d}{dz} \frac{N_i}{N} = - \frac{D_{ij}}{X_i} \frac{dX_i}{dz} \quad (2.39)$$

$$\text{sphérique : } V_i = - \frac{N D_{ij}}{N_i} \frac{d}{dr} \frac{N_i}{N} = - \frac{D_{ij}}{X_i} \frac{dX_i}{dr} \quad (2.40)$$

Pour les deux géométries, la diffusion thermique a été négligée. S'il est nécessaire et désirable d'inclure les effets de la diffusion thermique, alors, l'expression devient :

$$\text{plate : } V_i = - \frac{D_{ij}}{x_i} \left(\frac{dx_i}{dz} \pm \frac{K_T}{T} \frac{dT}{dz} \right) \quad (2.41)$$

(+) : si la trace i est plus lourde que la principale espèce.

(-) : si elle est plus légère.

où K_T : rapport de diffusion thermique défini par l'équation (2.42)

$$K_T = \pm \frac{D_i^T}{N M_i D_{ij}} \quad (2.42)$$

$D_i^T > 0$: si la trace est plus lourde que la principale espèce.

$D_i^T < 0$: si elle plus légère, de telle sorte que K_T soit toujours positif .

II.2.2 Equation simplifiée de consevation des espèces

L'équation (2.35) peut s'écrire comme suit :

$$\frac{\rho_0 v_0}{A} \frac{1}{M_i} \frac{d G_i}{d z} = K_i \quad (2.43)$$

les profils de concentration et de température entrent directement dans la détermination de la vitesse de diffusion, par le biais des gradients de concentration, et des coefficients de diffusion. Les vitesses de diffusion sont combinées aux vitesses moyennes pour obtenir G , selon l'équation (2.34).

II.2.3 Equation simplifiée de conservation d'énergie

Les équations de conservation d'énergie ont été déjà données par les relations (2.28) à (2.36). L'équation (2.28) affirme la constance du flux d'enthalpie par unité de surface du front de flamme. Les trois termes, de gauche à droite, représentent respectivement les contributions de la convection, diffusion, et conduction thermique.

L'équation (2.32) exprime la même chose pour la flamme sphérique.

En tout point de la flamme, l'enthalpie spécifique est donnée par :

$$\hat{H}_i = \sum_i \frac{N_i H_i}{\rho} \quad (2.44)$$

où H_i : enthalpie absolue

$$H_i = H_{298}^\circ + \int_j^i C_{p_i} dT \quad (2.45)$$

$$H_i = H_{298} + \int_j C_{P_i} dT \quad (2.45)$$

où C_{P_i} : chaleur spécifique à pression constante.

H_{298}° : enthalpie standard à $T = 298 \text{ K}$

II.2.4 Débit de chaleur libérée

L'intérêt principal dans l'analyse d'une flamme laminaire est la détermination du débit de chaleur libérée par unité de volume, en tout point de la flamme. Il existe deux méthodes indépendantes pour faire cela :

II.2.4.1 Première méthode, Q_r

C'est la plus simple. Elle utilise les débits nets de réaction K_i , et les enthalpies molaires absolues H_i dans la relation :

$$Q_r = \sum_i H_i K_i \quad (2.46)$$

où Q_r : débit d'énergie chimique libérée par unité de volume

II.2.4.2 Deuxième méthode, Q_e

Cette méthode combine les équations d'énergie et de

continuité des espèces . Pour une flamme plate, l'équation (2.36) peut s'écrire comme suit :

$$\frac{d}{dz} \left(\rho_0 v_0 \sum_i \frac{H_i G_i}{M_i} - A \lambda \frac{dT}{dz} \right) = 0$$

ou

$$\rho_0 v_0 \left(\sum \frac{H_i}{M_i} \frac{dG_i}{dz} + \sum \frac{G_i}{M_i} \frac{dH_i}{dz} \right) - \frac{d}{dz} \left(A \lambda \frac{dT}{dz} \right) = 0$$

Comme H_i est une fonction de la température, et par définition de la capacité calorifique à pression constante, il vient que

$$\frac{dH_i}{dz} = \frac{dH_i}{dT} \cdot \frac{dT}{dz} = C_{p_i} \frac{dT}{dz}$$

En utilisant cette dernière expression avec l'équation (2.35), on obtient

$$A \sum_i H_i K_i + \rho_0 v_0 \frac{dT}{dz} \sum_i \frac{G_i C_{p_i}}{M_i} - \frac{d}{dz} \left(A \lambda \frac{dT}{dz} \right) = 0$$

ou, en tenant compte de l'équation (2.46)

$$Q_e = - \frac{1}{A} \left\{ \rho_0 v_0 \frac{dT}{dz} + \sum_i \frac{G_i C_{p_i}}{M_i} - \frac{d}{dz} \left[A \lambda \frac{dT}{dz} \right] \right\} \quad (2.47)$$

Cette équation affirme que le débit d'énergie chimique libérée, en tout point de la flamme, doit être égal au gradient du flux d'énergie dû au transfert de masse (convection et diffusion) et à la conduction.

Pour la flamme sphérique :

$$Q_e = \frac{m_s}{4\pi r^2} \left[\rho_0 v_0 \frac{dT}{dz} + \sum_i \frac{G_i C_{p_i}}{M_i} - \frac{d}{dr} \left(\frac{4\pi r^2}{m_s} \lambda \frac{dT}{dr} \right) \right] \quad (2.48)$$

On remarque que la méthode de programmation (logicielle) de Q_r à partir de l'équation (2.46) exige seulement les débits de réaction et les enthalpies, une intégration numérique est nécessaire pour calculer les enthalpies absolues à partir de l'équation (2.45), donc c'est une évaluation directe du taux de variation de l'enthalpie, par unité de volume, dû à la réaction chimique.

Par contre, la programmation de Q_e à partir de l'équation (2.47) nécessite une dérivation des profils de température et de fraction molaire des espèces, ainsi que le calcul de (pour chaque espèce) :

- fractions du flux massique, G_i
- coefficient de diffusion, D_{ij}
- vitesses de diffusion, V_i
- chaleur spécifique à pression constante, C_{p_i}

Idéalement, bien sûr, les deux méthodes doivent donner le même résultat, cependant dans le cas pratique ce n'est malheureusement pas le cas. Plus les écarts sont faibles, plus les données expérimentales et l'analyse faite sont bonnes.

CHAPITRE III- METHODES DE MESURE ET DE CALCUL

Introduction

Les perfectionnements techniques des méthodes expérimentales ont rendu possible une investigation plus poussée et plus fine des phénomènes.

Signalons par exemple, que l'électronique a reculé la limite du temps d'observation à une durée de l'ordre de la micro-seconde, que la spectrométrie de masse et la chromatographie ont rendu possible l'analyse de mélange de grande complexité sur des échantillons absolument exclus avec les moyens ordinaires d'un laboratoire. Le contrôle des données et des interprétations est devenu plus sévère.

Pour obtenir une flamme plate, un brûleur circulaire alimenté en iso-octane-air est utilisé. Une plaque poreuse assure l'uniformité du débit gazeux à la surface du brûleur.

Le brûleur est placé au centre d'une enceinte calorifugée, voir Fig 1. Le brûleur peut se déplacer verticalement. Le modèle à développer étant unidimensionnel, la plupart des mesures ont été faites suivant l'axe du brûleur. Des dispositifs complémentaires ont permis les mesures :

- des fractions molaires
- des vitesses
- des températures

à travers la flamme, en 20 différents points avec un pas fixe de 0.5 mm.

III.1 Mesure des Fractions Molaires des Espèces les plus Stables

Les profils de concentrations fournissent des informations d'une importance capitale pour les spécialistes de la combustion. Les particules présentes dans la flamme sont communément classifiées comme molécules, radicaux libres, atomes et ions. Le terme molécule désigne les espèces polyatomiques qui sont stables tel que : H_2O , CO_2 , CO , H_2 , O_2 , N_2 , CH_4etc. Les radicaux libres sont des fragments de molécules possédant un ou plusieurs électrons célibataires donc instables ou hautement réactifs, par exemple : CH_3 , OH , C_2H_7 , CH_2etc. Les atomes instables dans la flamme sont ceux qui dérivent des éléments existants comme gaz diatomique, par exemple : H , O , Netc.

Le contrôle instantané ou continu des différents gaz constituants des gaz industriels s'effectue à l'aide d'analyseurs manuels ou automatiques. Le contrôle est indispensable si l'on veut connaître la qualité des gaz produits, déceler la présence d'impuretés provoquant souvent des incidents de marche dans les installations, vérifier la proportion de certains mélanges gazeux, surveiller la combustion dans les fours, chaudièresetc.

Pour cela, on a plusieurs méthodes, mais la plus utilisée est la chromatographie en phase gazeuse. Elle permet la séparation, l'identification, et le dosage des constituants d'un mélange gazeux.

Pour faciliter la compréhension, il est nécessaire de donner un schéma de principe d'un chromatographe en phase gazeuse. C'est l'objet de la Fig 2.

Le principe d'échantillonnage et d'analyse se resume comme suit:

a- Le mélange à séparer (soluté) est aspiré à l'aide d'une micro-sonde en quartz, puis injecté dans la chambre B.

b- Le mélange se dilue dans la phase mobile (gaz transporteur) qui l'entraîne à travers la colonne.

c- La colonne renferme un granulé poreux imprégnés d'un liquide appelé solvant, ou phase stationnaire. La phase stationnaire doit être bien choisie, les solutés sont inégalement retenus par celle ci dans la traversée de la colonne; ce phénomène est appelé "retension". Il resulte que les constituants du soluté se déplacent tous moins vite que la phase mobile et leur vitesses de déplacement sont en outre inégales. Ceci les conduit à sortir de la colonne les uns après les autres au sein de la phase mobile.

d- A la sortie de la colonne, il y a un détecteur qui dirige sur un chromatogramme (enregistreur) un signal appelé ligne de base et conduit dans le temps à l'enregistrement d'un pic au passage de chaque soluté, Fig 3.

Le temps de sortie de chaque pic (temps de rétention), son amplitude et l'aire limitée par ces pics permet de mesurer la concentration de chaque soluté dans le mélange. Pour une analyse rapide, on utilise un gaz vecteur pur qui a une faible viscosité et une diffusion élevée, tels que : He, Ar, Ne, Nz....

e- Quantitativement, l'identification des différents solutés nécessite une intégration du pic représentant le signal émis par le détecteur vers le chromatogramme. Ceci se traduit par la relation :

$$m_i = K_i A_i$$

où, m_i : masse de la substance i

k_i : facteur de proportionnalité (ou de réponse)

A_i : Aire du pic

Les Fig 7e à 9e montrent les profils de fractions molaires des huit espèces i-C₈H₁₈, CH₄, CO₂, CO, O₂, H₂, H₂O et N₂ pour des mélanges pauvre ($\phi = 0.8$), stoechiométrique ($\phi = 1.0$), et riche ($\phi = 1.24$), à la pression et température initiale de

0.2 atmosphère et 320 °K.

III.2 Mesure des Vitesses

La vitesse est mesurée par Anémométrie Doppler Laser (ADL), dont le schéma de principe est donné par la Fig 4.

Pour effectuer l'anémométrie laser, on doit ensemençer le gaz en particules réfractaires (Zicrone de dimension moyenne $2\mu\text{m}$), Fig 5. Le faisceau laser He-Ne ($\lambda = 0.6328 \mu\text{m}$) est focalisé, à l'aide d'une unité optique, au centre de la flamme. L'oscilloscope permet de visualiser le signal lumineux de la particule. Des franges d'interférences se forment au point d'intersection des deux faisceaux, l'interfrange i_f est donnée par la relation suivante:

$$i_f = \frac{\lambda \cdot D}{a} = v \cdot T$$

donc

$$v = \frac{\lambda \cdot D}{a \cdot T}$$

Où, λ : longueur d'onde du faisceau laser

T : période du signal

D : distance focale

a : espacement des fentes

Il est à remarquer que pour cette méthode de mesure

(ADL), des hublots sur les parois de l'enceinte sont indispensables pour acheminer le faisceau laser au centre vers la flamme.

III.3 Mesure des Température

La température T_j des gaz est mesurée à l'aide de couples thermoélectriques; cette technique utilise la propriété thermoélectrique des métaux. En effet, si deux fils conducteurs sont connectés électriquement à deux jonctions maintenues à différentes températures, une différence de potentiel est développée qui est proportionnelle à la différence de température. Les principaux avantages de cette technique sont :

- bonne précision des mesures électriques
- thermocouple extrêmement fin (100 μm de diamètre), donc une très haute résolution peut être faite, et une minimisation des perturbations aérodynamiques.
- résiste aux températures élevées.

La principale source d'erreur est la perte par rayonnement, qui va être traitée dans la section III.4. L'erreur peut être complètement éliminée en utilisant la "null method" dans laquelle le thermocouple est électriquement chauffé pour équilibrer les pertes par rayonnement.

Les principaux inconvénients de cette technique sont :

- correction de l'émissivité
- élimination des recombinaisons catalytiques à la surface du

thermocouple. La précision des mesures de températures dans les flammes exige l'utilisation de très petits thermocouples. Leur fabrication est très ennuyeuse et se fait en deux opérations:

- soudure de la jonction bout à bout
- revêtir le couple final pour réduire les erreurs catalytiques.

La température T_j des gaz est mesurée à l'aide du thermocouple Pt20%Rh/Pt40%Rh, recouvert de silica, en fil de diamètre de $100\mu\text{m}$ soudés bout à bout, avec des supports suffisamment écartés pour que les effets de conduction puissent être négligés, Fig 6.

III.4 Correction de la Température

La Fig 6 montre un profil généralisé de la température à travers un thermocouple. Le support en A, à cause des pertes par rayonnement et conduction, sera à une température inférieure à celle du gaz et du fil du thermocouple. Le profil ABC montre l'effet de refroidissement, dû au support, par conduction, le long du fil, qui devient négligeable en C. Le profil CD montre le fil à une température stable, inférieure à celle du gaz. La jonction du thermocouple a un diamètre plus grand que celui des fils, cette augmentation de diamètre crée une perte d'énergie par rayonnement relativement large comparée au gain d'énergie par convection, et la température de la jonction est inférieure à celle des fils. Ceci est montré au point E de la Fig 6. La courbe FGHJ représente

le profil de la température pour l'autre composant.

Pour corriger la température mesurée T_j , l'équation d'énergie suivante est utilisée (technique de Bell.1969)

$$h (T - T_j) - \sigma (\epsilon T_j^4 - \alpha_{\nu} T_{\nu}^4) = 0 \quad (3.1)$$

où, h : coefficient de convection

T_j : température mesurée

T : température réelle du gaz

ϵ : émissivité

σ : constante de Stefan-Boltzmann = $5.669 \cdot 10^{-8} \text{ W m}^{-2} \text{ K}^{-4}$

α : absorptivité de la paroi

T_{ν} : température de paroi

le terme d'absorption αT_{ν}^4 est négligeable devant ϵT_j^4

$$T = T_j + \frac{\sigma}{h} (\epsilon T_j^4 - \alpha_{\nu} T_{\nu}^4) \quad (3.2)$$

donc

$$T = T_j + \Delta T \quad (3.3)$$

où

$$\Delta T = \frac{\sigma}{h} (\epsilon T_j^4 - \alpha_{\nu} T_{\nu}^4) \quad (3.4)$$

La valeur de ΔT est d'une importance cruciale pour des valeurs élevées de T_j , voir Fig 8 à 11. La température du mur de l'enceinte est 320 K.

L'équation (3.4) peut être simplifiée, sans grande erreur, pour devenir

$$\Delta T = \frac{\sigma \varepsilon}{h} T_j \quad (3.5)$$

III.4.1 Emissivité ε

On peut obtenir les valeur de l'émissivité en se basant sur les résistivités électriques, d'après DAVISSON et WEEKS [1] et BRADLEY [6]

$$\varepsilon = 0.751 (T_j r_{e_j})^{1/2} - 0.632 (T_j r_{e_j})^2 + 0.670 (T_j r_{e_j})^{3/2} - 0.607 (T_j r_{e_j}) \quad (3.6)$$

où, r_{e_j} : résistivité électrique du thermocouple

Les résistivité des alliages Pt-Rh ont été estimé par les données présentées par WISE et VINES [14]

$$r_{e_j} = r_{e_o} (1 + \alpha (T_j - T_o)) \quad (3.7)$$

où, α : coefficient de résistivité à la température T_o

$$(\alpha = 0.0014 \text{ pour } T_o = 320 \text{ K})$$

r_{e_o} : résistivité du thermocouple

$$(r_{e0} = 20.8 \mu \Omega \text{ cm} \quad \text{pour } T_0 = 320 \text{ K})$$

III.4.2 Coefficient de Convection

Le coefficient de convection h de l'équation (3.5) est déterminé d'après l'expression de KRAMER et HINZE [2]

$$Nu = \frac{h D}{\lambda_m} = 0.42 Pr^{0.2} + 0.57 Pr^{0.99} Re^{0.5} \quad (3.8)$$

expression de transfert de chaleur entre un gaz et un cylindre perpendiculaire à la direction de l'écoulement valable pour

$$0.01 < Re < 10000$$

où, Nu nombre de NUSSELT

λ_m conductivité thermique du mélange

D diamètre du fil

Pr nombre de PRANTL

Re nombre de REYNOLDS

Pour l'air, entre 300 et 2000 K, $Pr = 0.7$, finalement

$$h = (0.3911 + 0.444 Re^{0.5}) \frac{\lambda_m}{D} \quad (3.9)$$

Le nombre de REYNOLDS est donné par l'expression

$$Re = \frac{\rho_m v D}{\mu_m} \quad (3.10)$$

où, ρ_m densité du mélange
 u vitesse d'écoulement
 D diamètre
 μ_m viscosité du mélange

La densité du mélange est donnée par l'équation (3.11) d'après DRAPER, M [3]

$$\rho = \frac{P}{\bar{R} T} \sum_i X_i M_i \quad (3.11)$$

où, P pression (Pa)
 T température (K)
 \bar{R} constante universelle des gaz $\bar{R} = 8.3144$ Kj/kmole
 M_i masse molaire de l'espèce i (Kg/kmole)

la Fig 30 donne le profil de la densité pour différentes richesses (voir tableaux 4 à 6).

La viscosité dynamique du mélange de l'équation (3.10) est donnée d'après DRAPPER, M [3], évaluée selon l'expression de WILKE [13], voir Fig 28

$$\mu_m = \sum_{i=1}^n \frac{M_i}{1 + \frac{1}{X_i} \sum_{j=1}^n X_j \Phi_{ij}} \quad (3.12)$$

où, Φ_{ij} est donné par

$$\Phi_{ij} = \frac{\left\{ 1 + \left[\frac{\mu_i}{\mu_j} \right]^{0.5} \left[\frac{M_j}{M_i} \right]^{1/4} \right\}^2}{(8) \left\{ 1 + \frac{M_i}{M_j} \right\}^{1/2}} \quad (3.13)$$

μ_i et μ_j sont les viscosités des espèces, i, et le diluent j (N₂)

Le coefficient de viscosité dynamique d'une espèce pure est donné d'après HIRSHFELDER, 1954 [9], par l'équation (3.14)

$$\mu \cdot 10^7 = 266.93 \frac{(MT)^{1/2}}{\sigma^2 \Omega} \quad (3.14)$$

où, μ viscosité dynamique de l'espèce (g/cm. sec)

T température (K)

M masse moléculaire de l'espèce (Kg/kmole)

σ diamètre de collision (°A)

Ω intégral de collision

Il convient de définir une température réduite T^* par

$$T^* = \frac{k}{\epsilon} T$$

où, $\frac{\epsilon}{k}$ est le paramètre potentiel

Les paramètres potentiels (ϵ/k) et les diamètres de collision σ sont tabulés dans plusieurs ouvrages, (EDWARDS, 1973; SVEHLA, 1962; MASON, 1962; KENNARD, 1938; et WESTENBERG,

1957), voir tableau 7.

L'équation (3.15) de SVEHLA [4] a été utilisée pour estimer Ω_v

$$\Omega_v = \frac{A}{T^* B} + \frac{C}{\exp(D T^*)} + \frac{E}{\exp(F T^*)} \quad (3.15)$$

où, T^* température réduite

$$A = 1.16145$$

$$B = 0.14874$$

$$C = 0.52487$$

$$D = 0.77320$$

$$E = 2.16178$$

$$F = 2.43787$$

L'équation (3.15) est valable si et seulement si

$$0.3 < T^* < 100$$

Pour l'iso-octane, il n'y a pas de valeurs tabulées de σ et de ε/k . Ces dernières ont été estimées à partir des propriétés critiques de l'iso-octane. Les équations (3.16) et (3.17) de SVEHLA [4], utilisant les propriétés d'ébullition, ont permis d'estimer σ et ε/k pour i-C₈H₁₈.

$$\frac{\varepsilon}{k} = 0.75 T_c \quad (3.16)$$

$$\frac{2}{3} \pi N_A \sigma^2 = 2V_b - 5 \quad (3.17)$$

où, T_c : température réduite (271.1 °c pour i-C₆H₁₄)

N_A : nombre d'AVOGADRO

V_b : volume molaire au point d'ébullition ($V_b = M/\rho$)_b

III.4.3 Conductivité Thermique du Mélange

L'équation (3.18) de MASON et SAXENA, 1958 [5], donne la conductivité thermique du mélange, voir Fig 29

$$\lambda_m = \sum \frac{\lambda_i}{1 + \frac{1}{X_i} \sum_{j=1}^n X_j G_{ij}} \quad (3.18)$$

où,

$$G_{ij} = 1.065 \frac{\left\{ 1 + (\mu_i / \mu_j)^{1/2} (M_j / M_i)^{1/4} \right\}^2}{(8)^{1/2} \left(1 + \frac{M_i^{1/2}}{M_j} \right)} \quad (3.19)$$

En comparant (3.13) et (3.19) il vient que

$$G_{ij} = 1.065 \Phi_{ij} \quad (3.20)$$

Finalement,

$$\lambda_m = \sum \frac{\lambda_i}{1 + 1.065 \frac{1}{X_i} \sum X_i \Phi_{ij}} \quad (3.21)$$

où, λ_i conductivité thermique de l'espèce i

X_i, X_j fraction molaire de l'espèce i, et du diluent j
(N₂)

M_i, M_j masse moléculaire

μ_i, μ_j viscosité dynamique

L'équation (3.22) de SVEHLA,[4], donne la conductivité thermique d'une espèce pure

$$\lambda_i \cdot 10^6 = (\mu_i \cdot 10^6) \frac{R}{M} \left\{ \frac{15}{4} + 1.32 \left(\frac{Cp_i}{R} - \frac{5}{2} \right) \right\} \quad (3.22)$$

où, λ_i conductivité thermique de l'espèce i, (cal/cm.sec.k)

M_i masse moléculaire de l'espèce i, (g/mole)

Cp_i chaleur spécifique à pression constante, (cal/mole.k)

μ_i viscosité dynamique de l'espèce i, (g/cm.sec)

Les chaleurs spécifique à pression constante ont été évaluées pour chaque espèce, et en tout point de la flamme, par l'équation (3.23) de WESTBROOK, 1985,

$$Cp_i = \sum a_{i,n} \cdot (T/1000)^n \quad (3.23)$$

les coefficients $a_{i,1}$ $a_{i,2}$ $a_{i,3}$ $a_{i,4}$ $a_{i,5}$ et $a_{i,8}$ propres à chaque espèce sont regroupés dans le tableau 8.

III.5.1' Q_e (méthode de l'équation d'énergie)

Le débit d'énergie chimique libérée à travers une flamme a été obtenu à partir des profils de températures corrigées (voir Fig 11 à 14), de vitesse (voir Fig 10), et des fractions molaires des espèces (voir Fig 7 à 9), pour différentes richesses du mélange, en utilisant l'équation d'énergie (2.47) .

Le débit d'énergie chimique libérée, Q_e, est donné par FRISTOM et WESTENBERG, 1965, (12) par :

$$Q_e = \rho_o v_o \frac{dT}{dz} \sum_{i=1}^n \frac{G_i \cdot C_{pi}}{M_i} - \frac{d}{dz} \left\{ \lambda_i \frac{dT}{dz} \right\} \quad (3.24)$$

le premier terme est dû à la convection et à la diffusion, le second représente la contribution de la conduction. WESTBROOK, 1985, a proposé un polynome en fonction de la température pour les valeurs des chaleurs spécifiques à pression constante C_p, voir équation (3.23).

Les conductivités thermiques ont été calculées selon l'équation (3.21).

La fraction du flux massique G_i de l'équation (3.24) a été évaluée pour chaque espèce, à partir de sa vitesse de diffusion et la vitesse d'écoulement du gaz v . L'équation (2.39) donne la vitesse de diffusion . Les coefficients de diffusion D_{ij} ont été calculés, pour chaque espèces, à partir du potentiel

$$D_{ij} = 1.858 \cdot 10^{-9} \cdot T^{1.5} \frac{\left\{ \frac{M_i + M_j}{M_i M_j} \right\}^{1/2}}{P \sigma_{ij}^2 \Omega_D} \quad (3.25)$$

- où D_{ij} coefficient de diffusion (cm²/sec)
 T température (K)
 P pression (atm)
 σ_{ij} diamètre de collision (Å)
 Ω_D intégral de collision (diffusion)

Comme pour l'équation (3.14), les valeurs de σ et ϵ_i/k pour les espèces CH₄, CO₂, CO, O₂, H₂O, et N₂ sont tabulées dans (9), le tableau 7 regroupe toutes ces valeurs. Pour le combustible i-C₈H₁₈ σ_i et ϵ_i/k sont évalués à partir des équations (3.16) et (3.17). L'intégral de collision Ω_D est donnée, d'après SHERWOOD [15], par :

$$\Omega_D = \frac{A}{T^* B} + \frac{C}{\exp(DT^*)} + \frac{E}{\exp(FT^*)} + \frac{G}{\exp(HT^*)} \quad (3.26)$$

où, T* température réduite

$$T^* = \frac{k}{\epsilon_{ij}} T \quad (3.27)$$

$$A = 1.06036$$

$$B = 0.15610$$

$$D_{ij} = 1.858 \cdot 10^{-9} T^{1.5} \frac{\left\{ \frac{M_i + M_j}{M_i M_j} \right\}^{1/2}}{P \sigma_{ij}^2 \Omega_D} \quad (3.25)$$

- où D_{ij} coefficient de diffusion (cm²/sec)
 T température (K)
 P pression (atm)
 σ_{ij} diamètre de collision (Å)
 Ω_D intégral de collision (diffusion)

Comme pour l'équation (3.14), les valeurs de σ et ϵ/k pour les espèces CH₄, CO₂, CO, O₂, H₂O, et N₂ sont tabulées dans (9), le tableau 7 regroupe toutes ces valeurs. Pour le combustible i-C₈H₁₈ σ et ϵ/k sont évalués à partir des équations (3.16) et (3.17). L'intégral de collision Ω_D est donnée, d'après SHERWOOD [15], par :

$$\Omega_D = \frac{A}{T^* B} + \frac{C}{\exp(DT^*)} + \frac{E}{\exp(FT^*)} + \frac{G}{\exp(HT^*)} \quad (3.26)$$

où, T* température réduite

$$T^* = \frac{k}{\epsilon_{ij}} T \quad (3.27)$$

$$A = 1.06036$$

$$B = 0.15610$$

$$C = 0.19300$$

$$D = 0.47635$$

$$E = 1.03587$$

$$F = 1.52996$$

$$G = 1.76474$$

$$H = 3.89411$$

Les équations (3.28) et (3.29) évaluent respectivement σ_{ij} et ε_{ij} mentionnés dans les équations (3.25) et (3.27)

$$\sigma_{ij} = (1/2)(\sigma_i + \sigma_j) \quad (3.28)$$

et

$$\varepsilon_{ij} = (\varepsilon_i \varepsilon_j)^{1/2} \quad (3.29)$$

Le calcul du débit de chaleur libérée par chaque espèce fait intervenir les gradients de température et de concentration des espèces chimiques. Une évaluation adéquate dépend d'une bonne discrétisation. Une interpolation quadratique (QUICK) a été utilisée pour discrétiser la première dérivée de la température de l'équation (3.24) en un point p

$$\left\{ \frac{dT}{dz} \right\}_p = \frac{3T_p + 3T_E - 7T_W + T_{WW}}{8h} \quad (3.30)$$

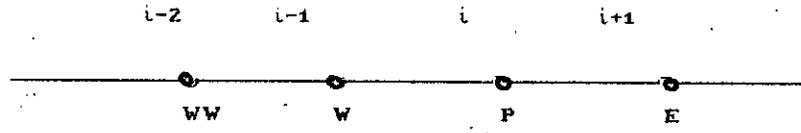
où, h pas = 0.5 mm

E est (East) du pont p

W ouest (West) du point p

WW ouest-ouest du point p

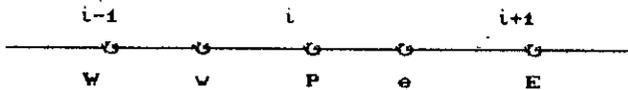
Finalement,



$$\left\{ \frac{dT}{dz} \right\}_i = \frac{3 T_i + 3 T_{i+1} - 7 T_{i-1} + T_{i-2}}{8 h} \quad (3.31)$$

Pour le terme de conduction de l'équation (3.24), la procédure de PANTANKAR (1980) propose :

$$\left\{ \frac{d}{dz} \left\{ \lambda \frac{dT}{dz} \right\} \right\} = \frac{\lambda_e (T_E - T) - \lambda_w (T - T_W)}{h^2}$$



où, $\lambda_e = (1/5) (\lambda_i + \lambda_{i+1})$ (3.32)

$$\lambda_w = (1/5) (\lambda_i + \lambda_{i-1}) \quad (3.33)$$

Le terme $\rho_o v_o \frac{dT}{dz} \sum_{i=1}^n \frac{G_{i,i} C_{p,i}}{M_i}$ de l'équation d'énergie (3.24) englobe la contribution de la convection et de la diffusion. Nous allons évaluer séparément les contributions des transferts convectif et diffusif, qui à coté de la contribution du

transfert conductif, permet de connaître lequel parmi ces trois modes de transfert l'emporte sur les autres.

D'après l'équation (2.36) la fraction du flux massique est donnée par

$$G_i = \frac{N_i M_i}{\rho \cdot v} (v + V_i)$$

où, la densité ρ du mélange est exprimée par

$$\rho = \sum_i N_i M_i$$

en combinant ces deux dernières équations, il vient que

$$G_i = \frac{N_i M_i}{\sum_i N_i M_i} \left(1 + \frac{V_i}{v} \right) \quad (3.34)$$

en divisant le numérateur et le dénominateur de l'équation (3.34) par N la fraction du flux massique G_i devient :

$$G_i = \frac{X_i M_i}{\sum_i X_i M_i} \left(1 + \frac{V_i}{v} \right) \quad (3.35)$$

En combinant les équations (3.28), (2.27), et (3.11), et en substituant dans l'équation d'énergie (3.24), on obtient finalement

$$Q_e = \left\{ \frac{P}{\bar{R}T} \sum_i X_i C_{p,i} v_i \frac{dT}{dz} \right\} + \left\{ \frac{P}{\bar{R}T} \sum_i X_i C_{p,i} V_i \frac{dT}{dz} \right\} -$$

$$- \left\{ \frac{d}{dz} \left\{ \lambda_i \frac{dT}{dz} \right\} \right\} \quad (3.36)$$

où, le premier terme est la contribution du transfert convectif, le second celle du transfert diffusif, et enfin le troisième et dernier terme représente la contribution du transfert conductif.

Finalement on a

$$Q \text{ (convection)} = \frac{P}{R T} \sum_{i=1}^n X_i C_{p_i} v_i \frac{dT}{dz} \quad (3.37)$$

$$Q \text{ (diffusion)} = \frac{P}{R T} \sum_{i=1}^n X_i C_{p_i} V_i \frac{dT}{dz} \quad (3.38)$$

$$Q \text{ (conduction)} = - \frac{d}{dz} \left(\lambda \frac{dT}{dz} \right) \quad (3.39)$$

Les vitesses de diffusion V_i sont obtenues directement en utilisant les équations (2.41) et la méthode de discrétisation, équation (3.31), pour évaluer la première dérivée de la concentration

$$\left\{ \frac{dX}{dz} \right\} = (1/8h) (3X_i + 3X_{i+1} - 7X_{i-1} + X_{i-2}) \quad (3.40)$$

où, h est le pas

En substituant l'équation (3.40) dans l'expression de la vitesse de diffusion, on obtient :

$$V_i = - \frac{D_{ij}}{8h X_i} (3X_i + 3X_{i+1} - 7X_{i-1} + X_{i-2}) \quad (3.41)$$

Sur les Figures 22 à 24 sont illustrées les profils des vitesses de diffusion pour toutes les espèces.

Les contributions des transferts convectif, diffusif, et conductif dans l'équation d'énergie Q_e , sont représentées sur les Figures 16 à 21.

Le débit total d'énergie libérée, qui n'est autre que la sommation de Q (convection), Q (diffusion), et Q (conduction), est illustré sur les Figures 31 à 35.

III.5.1 Q_r (méthode des débits de réaction)

Le débit de chaleur libérée Q_r peut être évalué à partir des enthalpies absolues et des débits de réaction de chaque espèce.

$$Q_r = \sum H_i K_i$$

les enthalpies molaires absolues sont évaluées pour chaque espèce d'après l'équation (2.47)

$$H_{i,T} = H_{i,298} + \int_{298}^T C_{p_i} dT \quad (3.42)$$

Les chaleurs spécifiques C_{p_i} sont calculées selon l'expression de WESTBROOK (1985), équation (3.23). Le tableau 7 fournit le enthalpie standard $H_{i,298}$ de chaque espèce.

Les débits de réaction, K_i , sont calculés selon l'équation (2.37)

$$K_i = \frac{\rho v_o}{M_i} \frac{d G_i}{d z} \quad (3.43)$$

une interpolation quadratique (QUICK) est utilisée, comme pour la section précédente, pour décrire la première dérivée de la fraction du flux massique G_i ;

$$\left\{ \frac{dG_i}{dz} \right\} = (1/8h) (3G_i + 3G_{i+1} - 7G_{i-1} + G_{i-2}) \quad (3.44)$$

où, h est le pas (0.5 mm)

En substituant l'équation (3.44) dans l'équation (2.37), le débit de réaction devient ;

$$K_i = \frac{\rho_o v_o}{8h M_i} (3G_i + 3G_{i+1} - 7G_{i-1} + G_{i-2}) \quad (3.45)$$

Les Figures 25 à 27 montrent l'évolution du débit de réaction de chaque espèce à travers des flammes de richesses différentes, afin de mieux élucider les mécanismes de réactions chimiques.

Sur les Figures 13 à 15 est illustrée la contribution de chaque espèce chimique dans l'équation (2.48), ce qui permet de connaître lesquelles parmi les huit espèces chimiques qui

dominant le processus de dégagement de chaleur dans la flamme pour une richesse donnée.

Les Figures 33 à 35 comparent les profils des débits de chaleur libérée Q_r et Q_e pour les trois cas de mélange.

COMMENTAIRES ET CONCLUSION

Introduction

Les profils de température, vitesse, et de fractions molaires ont été obtenus à travers une flamme plate de richesses 0.8, 1, et 1.24. Les valeurs de ces profils ont été utilisées dans les équations de continuité, d'énergie, et d'espèce dans le but d'obtenir les profils de débit d'énergie chimique libérée, et ceux de débit de réaction, le long de la flamme, ainsi que divers paramètres concernant le processus de propagation de la flamme.

Les données expérimentales sont fournies en série de valeurs obtenues avec un pas de 0.5 mm. Un logiciel est établi pour calculer les paramètres nécessaires à l'analyse.

La première étape de l'analyse est une correction de température due aux pertes par rayonnement. En réalité lorsque la température des gaz de combustion atteint une valeur de l'ordre de 1700 K, il se produit une décomposition des molécules polyatomiques en radicaux ou atomes de sorte qu'il peut y avoir les corps suivants : CO, OH, C, H, O, N. Le phénomène de dissociation et le transfert d'énergie par rayonnement ont pour effet de diminuer la température de combustion.

IV.1 COMMENTAIRES

La fig 7 montre l'évolution de la température maximale en fonction de la richesse. On remarque que la courbe présente un maximum au voisinage du mélange stoechiométrique. Cette propriété se rencontre chez la plupart des hydrocarbures usuels (l'Hydrogène accuse un maximum de température en milieu riche $\phi = 1.2$). En milieu pauvre ($\phi < 1$), la décroissance de la température maximale s'explique par l'augmentation du volume de produits gazeux au sein desquels va se dissiper

l'enthalpie initiale H_i . En milieu riche ($\phi > 1$), la décroissance de la température maximale quand augmente la richesse est due à l'importance accrue des réactions de dissociation, dont le caractère endothermique arrive à l'emporter sur l'échauffement des produits formés. La valeur maximale de la température au voisinage du mélange stoechiométrique justifie, sur le plan des transferts thermiques, le fonctionnement à faible excès d'air des générateurs de chaleur.

Les figures 8 à 11 illustrent les profils de températures mesurées et corrigées aux différentes richesses. Une correction maximale de 235 K a été enregistrée pour le cas du mélange stoechiométrique. Pour les trois cas, à partir de 1500 K, la température corrigée est largement supérieure à celle mesurée.

La figure 12 montre l'évolution de la vitesse d'écoulement des gaz pour différentes richesses. La vitesse maximale enregistrée est de 5.46 m/s ($\phi = 1.0$) correspondant à un nombre de Reynolds de 0.33, ce qui montre bien que l'écoulement est laminaire. Le front de flamme se propage à une vitesse appelée vitesse de combustion, qui dépend des propriétés physico-chimiques du mélange et des parois du brûleur. La vitesse de combustion est d'autant plus élevée : [21]

- que le pouvoir énergétique du combustible est grand
- que le coefficient de conductivité thermique du mélange est grand
- que la vitesse de diffusion, des particules dissociées CO, H, OH..., et activées, est élevée.

Elle est d'autant plus faible ;

- que les chaleurs spécifiques du mélange sont grandes.

Pour plus d'informations concernant la détermination de la vitesse laminaire du front de flamme, le lecteur qui en a le besoin devra se reporter à l'ouvrage cité dans la référence [20].

La première observation des profils de débit d'énergie chimique libérée, Q_i , des différentes espèces, Figure 13 à 15, montre que la chaleur libérée est essentiellement générée par les espèces H_2O et CO_2 .

Le mode de transfert de chaleur qui prédomine dans une flamme sont les transferts conductif et convectif. Le transfert diffusif est négligeable devant les deux premiers cités. voir Figures 16 à 21.

Sur les Figures 22 à 24 sont illustrées les profils de vitesses de diffusion des espèces (+ : mouvement descendant, - : mouvement ascendant). L'espèce ayant la plus grande vitesse de diffusion est l'Hydrogène. Ce dernier est très réactif ($V_i = 25$ m/s pour un mélange stoechiométrique).

Les débits de réaction de espèces (+: taux d'apparition, -: taux de disparition) sont illustrés sur les Figures 25 à 27. on remarque que le taux d'apparition maximal (mole/sec.m³) est détenu par l'espèce H_2O , le CO_2 vient en seconde position. Le taux de disparition maximal est celui de l'oxygène.

Pour les trois cas de mélange, le monoxyde de carbone CO apparait avant le dioxyde de carbone CO2 puis disparaît pour former du CO2.

L'iso-octane est consommé plus rapidement pour un mélange riche que pour un mélange pauvre.

	$-K_{i-C_8H_{18}}$	$-K_{O_2}$	K_{CO}	$-K_{CO}$	K_{CO_2}
$\phi = 0.8$	1077.9	1951.25	1594.72	1974.72	1974.72
$\phi = 1.0$	1742.65	2102.59	1742.65	2171.26	2102.59
$\phi = 1.24$	1777.67	1777.67	1777.67	2129.44	2129.44

Le tableau précédent montre l'influence de la richesse sur la température à laquelle les maximums des débits de réaction K_i des espèces sont observés. En effet, pour les espèces iso-octane, CO, et CO2 l'augmentation de la richesse est suivie d'une augmentation de la température à laquelle les débits de réactions maximums sont observés. Pour le mélange stoechiométrique, à la température $T = 2102.59$ K, le taux maximal d'apparition du CO2 correspond au taux maximal de disparition de O2.

Les taux maximums d'apparition du CO2 et de disparition du CO sont observés à la même température ($T=1974.2$ K pour $\phi = 1.0$, et $T= 2129$ K pour $\phi = 1.24$).

La viscosité, le coefficient de convection, et la conductivité thermique du mélange augmentent quand la température

croit. La densité du mélange, quant à elle, diminue quand la température augmente (de 0.228 à 0.033 Kg/m³ à T=2000 K), voir Figures 28 à 30.

Pour les trois cas de mélange, les profils de débit d'énergie chimique libérée sont illustrés sur la Figure 31 pour Q_e (1ère méthode), et sur la Figure 32 pour Q_r (2ème méthode).

Les Figures 33 à 35 montrent la comparaison des profils Q_e et Q_r pour les trois richesses. Il est à noter qu'il existe un léger décalage entre les valeurs maximales de Q_e et Q_r . Ceci peut bien s'expliquer par le fait que la discrétisation adoptée avec un pas de 0.5 mm aurait donné de meilleurs résultats en prenant par exemple un pas de 0.1 mm, chose qui augmente le temps de calcul et qui nécessite un espace mémoire considérable. On remarque que le débit maximal d'énergie chimique libérée est obtenu, pour un mélange stoechiométrique, à la température $T = 1742.65$ K. Sachant que la température maximale enregistrée est $T = 2258$ K, on peut affirmer sans risque d'erreur que:

" Dans une flamme, on n'a pas forcément, à une température maximale, un débit maximal d'énergie chimique libérée "

Les profils de débit d'énergie chimique libérée par chaque espèce, Q_i , sont donnés sur les Figures 13 à 15. On voit bien l'importance des contributions des espèces, telles que H₂O, CO₂, O₂, et CO, dans le débit d'énergie total Q_r .

Sur les Figures 36 à 37 sont illustrés les débits d'énergie chimique libérée des deux plus importantes espèces qui sont H₂O et CO₂ pour les trois cas de mélange. On remarque que l'espèce H₂O présente un débit maximal d'énergie chimique libérée dans le cas d'un mélange stoechiométrique, viennent par la suite, par ordre décroissant de Q_i , les mélanges pauvre et riche.

La richesse influe d'une façon notable sur la température à laquelle le débit maximal d'énergie libérée est observé

ϕ	Q_{max}
0.8.	1951.25 K
1.0	1742.65 K
1.24	1375.83 K

Comme le montre si bien le tableau ci-dessus, on remarque encore une fois que le débit d'énergie maximal ne correspond pas à la température maximale, et que plus le mélange est riche, plus la température, à laquelle le débit d'énergie est maximal, diminue, car la combustion est incomplète dans un mélange riche (voir Figure 38).

La richesse influe d'une façon notable sur la température d'auto-inflammation. En effet, le tableau ci-dessous donne les températures à partir desquelles une consommation de combustible

est amorcée, ce qui correspond à la température d'auto-inflammation. Il est à noter que la température initiale (320 K), la concentration en combustible et la pression du mélange (0.2 atmosphère) sont les principaux paramètres dont dépend la température d'auto-inflammation. On remarque aussi que cette dernière augmente quand la richesse croît.

Richesse	Temperature d'auto-inflammation
0.8	330 K
1.0	503 K
1.24	510 K

a- Mélange stoechiométrique

- la combustion est complète, elle permet d'avoir la plus grande température enregistrée ($T_{max} = 2258 \text{ K}$).
- Il n'y a point de consommation de combustible i-C₈H₁₈ avant que la température n'atteigne la valeur de 503 K.
- Le taux d'apparition maximal est celui de H₂O (681 mole/sec.m³ à $T = 2102,59 \text{ K}$).
- Le taux de disparition maximal est celui de l'oxygène (798.94 mole/sec.m³ à $T = 2212.83 \text{ K}$).
- L'élément le plus diffusif est l'Hydrogène ($V_i = 9.22 \text{ m/s}$ à $T = 22183 \text{ K}$).

Comparé aux autres mélanges, le mélange stoechiométrique se distingue des autres par les spécificités suivantes:

- la plus grande vitesse de diffusion pour les espèces $i\text{-C}_8\text{H}_{18}$, CO , et H_2O .

- le plus grand débit de réaction pour les espèces $i\text{-C}_8\text{H}_{18}$, CO_2 , O_2 , H_2 , et H_2O .

- le plus grand débit d'énergie chimique libérée pour les espèces $i\text{-C}_8\text{H}_{18}$, CO_2 , CO , H_2 , O_2 , H_2O .

- les plus petites vitesses de diffusion et débit de réaction pour l'espèce CH_4 du fait que ce dernier est un produit intermédiaire et que la combustion est complète.

b- Mélange riche

Le défaut de comburant conduit à une oxydation partielle du combustible menant à la formation de CO_2 , CO , H_2O , H_2 , d'hydrocarbures intermédiaires tel que CH_4 ...

- La température varie de 320 à 2144.91 K, il n'y a pas de consommation de combustible avant que la température des gaz n'atteigne la valeur de 510 K (légèrement supérieure à celle du mélange stœchiométrique).

- le CO_2 n'apparaît qu'à une température $T = 1375.83$ K car il y a eu d'abord formation de CO à $T = 511$ K.

- l'oxygène disparaît complètement à l'abscisse $z = 8.5$ mm correspondant à $T = 2144.82$ K.

Compare aux autres mélanges, le mélange riche se distingue des autres par les spécificités suivantes :

- le plus grand débit de réaction pour les espèces CH_4 , et

CO.

- le plus faible débit de réaction pour les espèces CO₂ et H₂O.

- le plus faible débit d'énergie chimique libérée pour les espèces H₂O, CO₂, i-C₈H₁₈, et H₂.

c- Mélange pauvre

La combustion est dite oxydante du fait qu'elle se déroule en présence d'un excès de comburant. Elle est dite complète du fait que les réactions chimiques se déroulent d'une manière idéale pour conduire à la formation exclusive de CO₂ et H₂O.

En outre, nous conviendrons que l'oxygène libre retrouvé dans les gaz de combustion provient exclusivement du comburant.

- la température de la flamme varie de 320 à 2075.9 K, il n'y a point de consommation de combustible avant que la température des gaz n'atteigne la valeur de 330 K.

Comparé aux autres mélanges, le mélange pauvre se distingue par les spécificités suivantes :

- la plus grande vitesse de diffusion pour les espèces CH₄, CO₂, et H₂, et la plus faible pour les espèces i-C₈H₁₈, O₂, et H₂O.

- le plus faible débit de réaction, K_i , pour les espèces i-C₈H₁₈, CO, O₂, et H₂.

- le plus faible débit d'énergie chimique libérée pour les espèces CO, O₂, et CH₄.

Les références [11] et [19] m'ont été d'un grand intérêt pour comparer l'allure des profils obtenus avec ceux illustrés dans ces communications assez récentes traitant des flammes plates, respectivement, des mélanges propane-oxygène à basse pression et méthane-air à la pression atmosphérique.

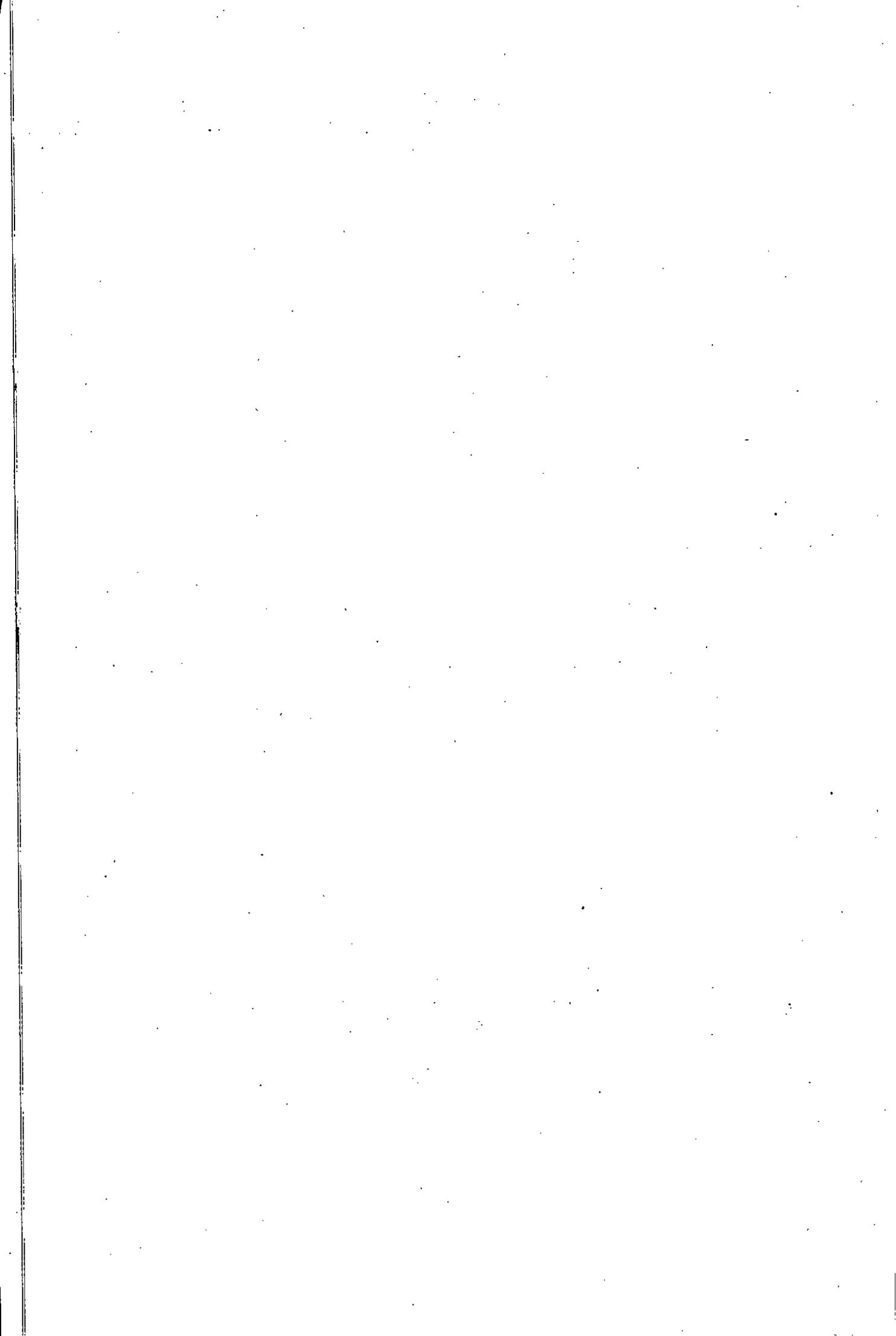
IV.2 CONCLUSION

Dans un phénomène "hybride" aéro-thermo-cinétique tel que la combustion, de grandes lacunes subsistent encore dans sa connaissance fondamentale.

Une recherche raisonnée, utilisant les capacités de l'ordinateur, a permis d'établir des bases solides pour des méthodes fondées à la fois sur une réflexion théorique et sur des données expérimentales judicieuses.

Nous avons ici décrit les équations de base de ces méthodes, et expliqué les principes qui les guident. Le but de ce projet n'a donc pas pu être la description raisonnée d'une méthode de conception utilisable dans tous les cas pratiques. Il a été de présenter, de façon physico-chimique et descriptive, les phénomènes en question, mais aussi de poser des bases théoriques sûres qui sont à mon avis indispensables pour arriver

dans un avenir proche à des méthodes solides et puissantes.



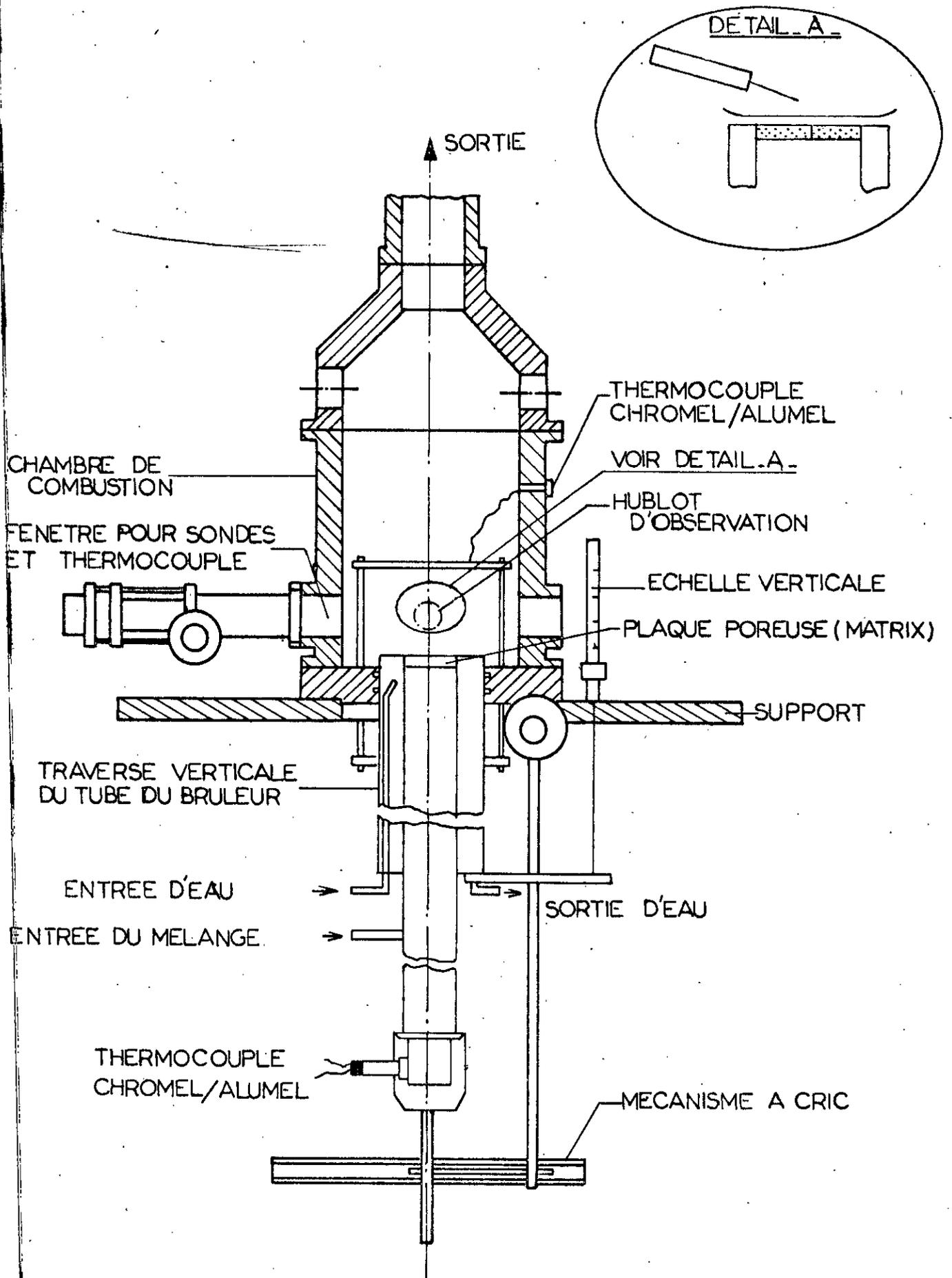
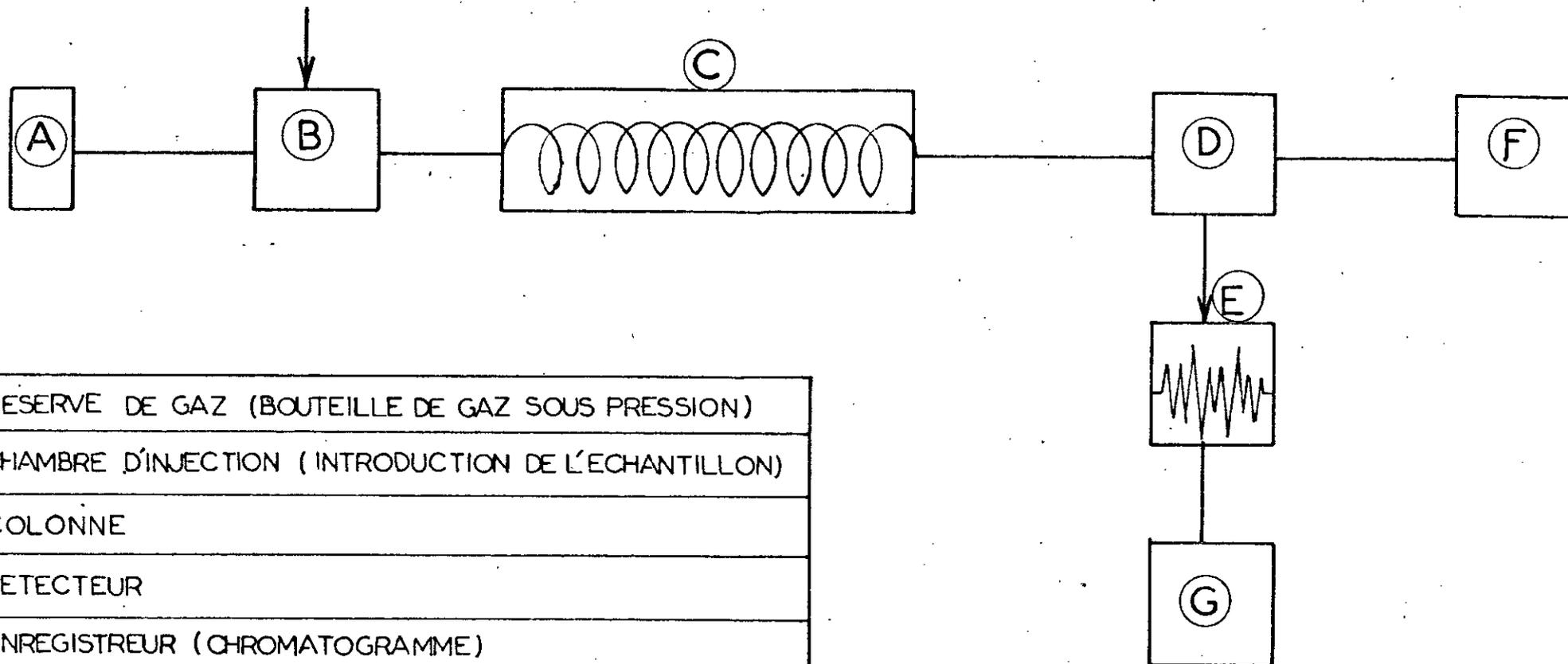


Fig 1 BRULEUR A BASS E PRESSION



A	RESERVE DE GAZ (BOUEILLE DE GAZ SOUS PRESSION)
B	CHAMBRE D'INJECTION (INTRODUCTION DE L'ÉCHANTILLON)
C	COLONNE
D	DETECTEUR
E	ENREGISTREUR (CHROMATOGRAMME)
F	DEBITMETRE
G	INTEGRATEUR

FIG 2. SCHEMA DE PRINCIPE D'UN CHROMATOGRAPHE EN PHASE GAZEUSE

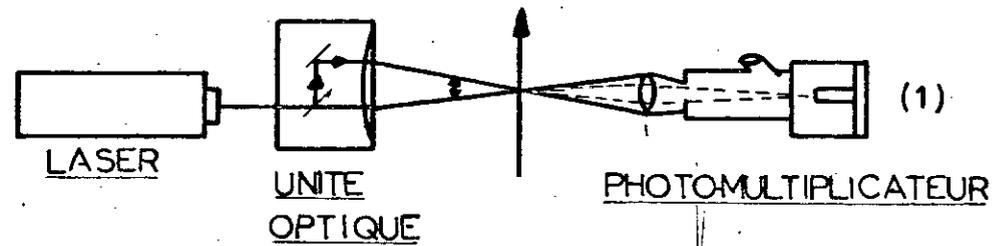
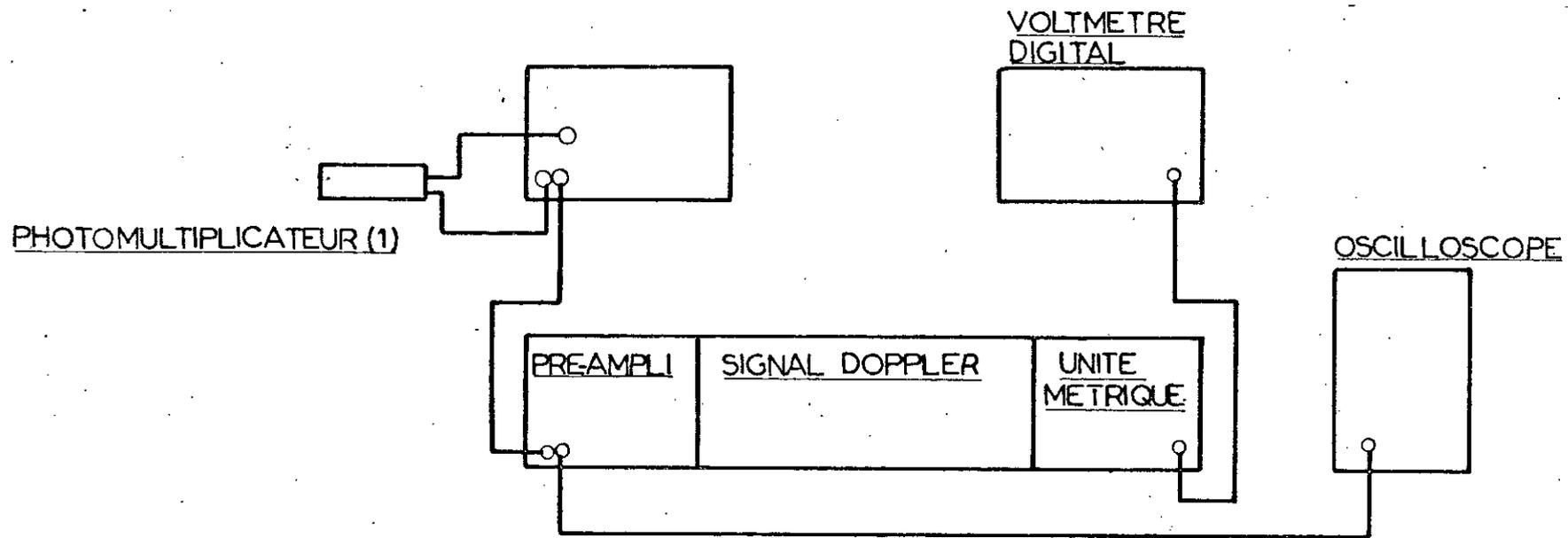


Fig 4 DISPOSITIF DE MESURE DES VITESSES.

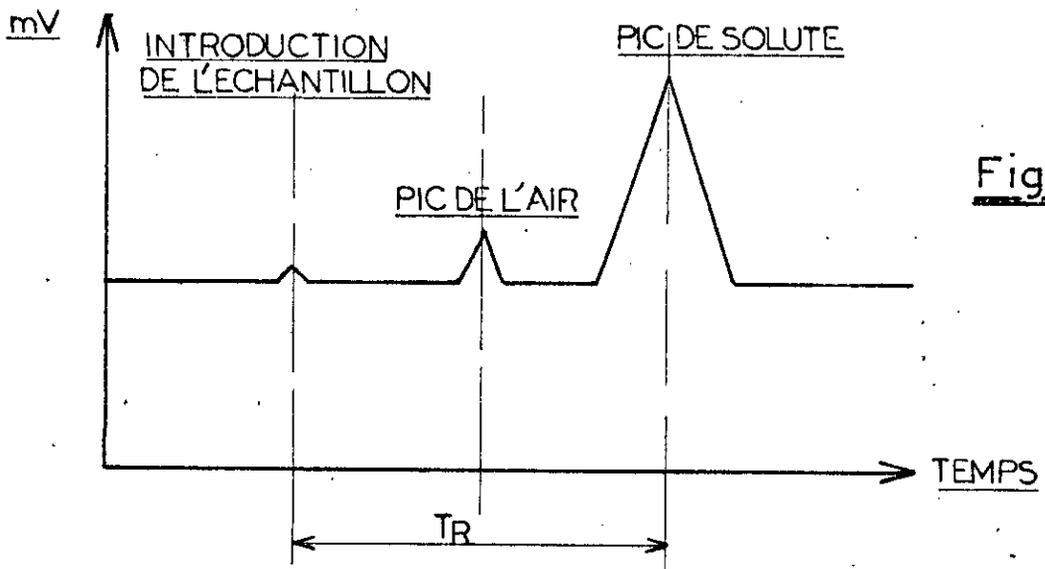


Fig. 3

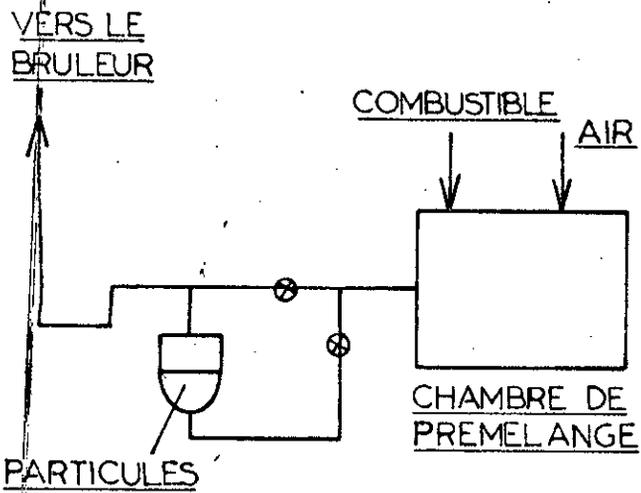


Fig. 5

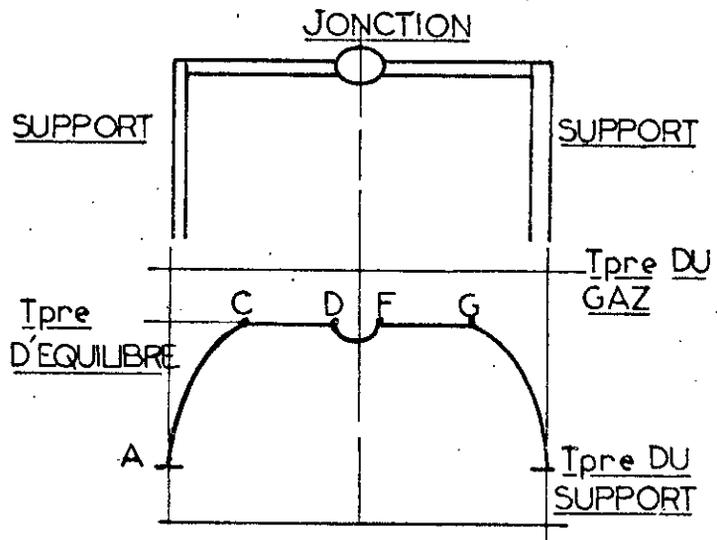


Fig. 6 DISTRIBUTION DE LA TEMPERATURE

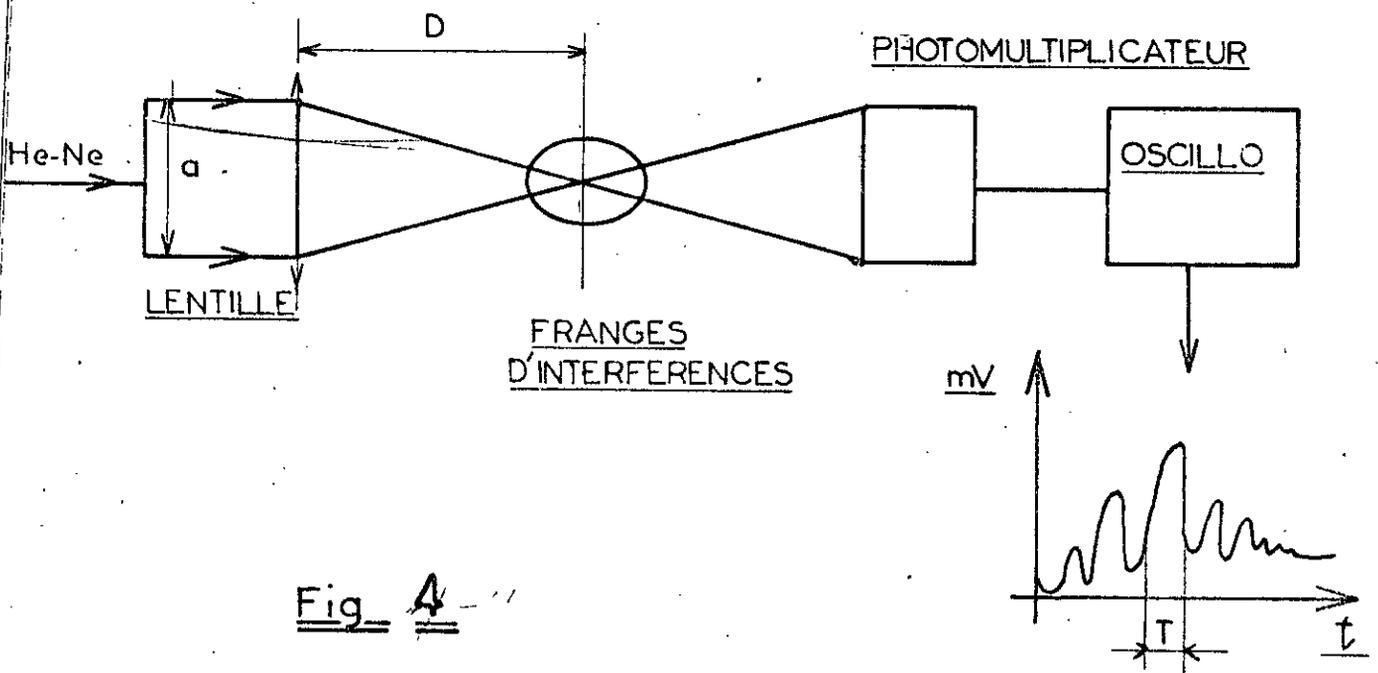


Fig. 4

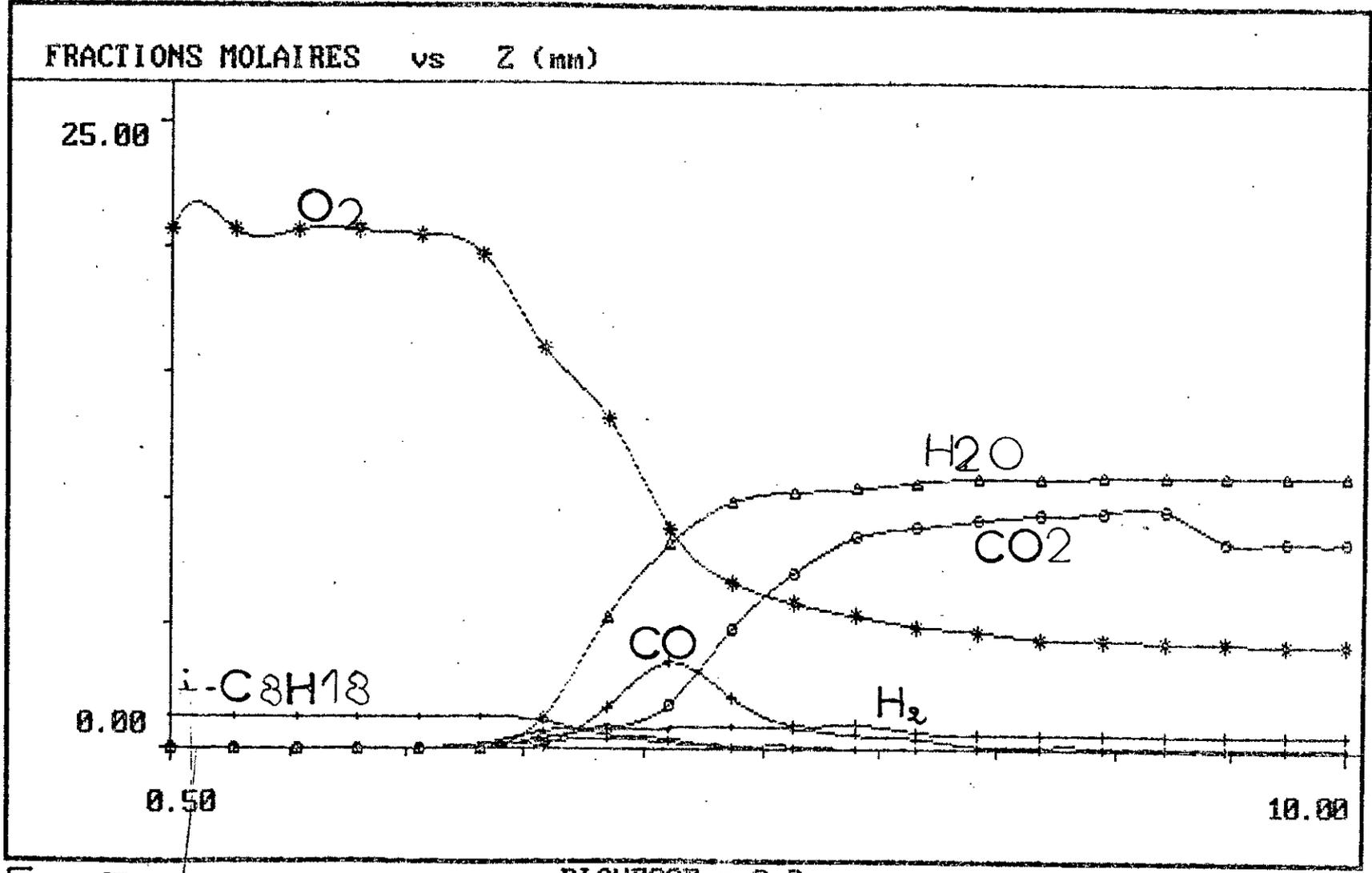


Fig. 7-e

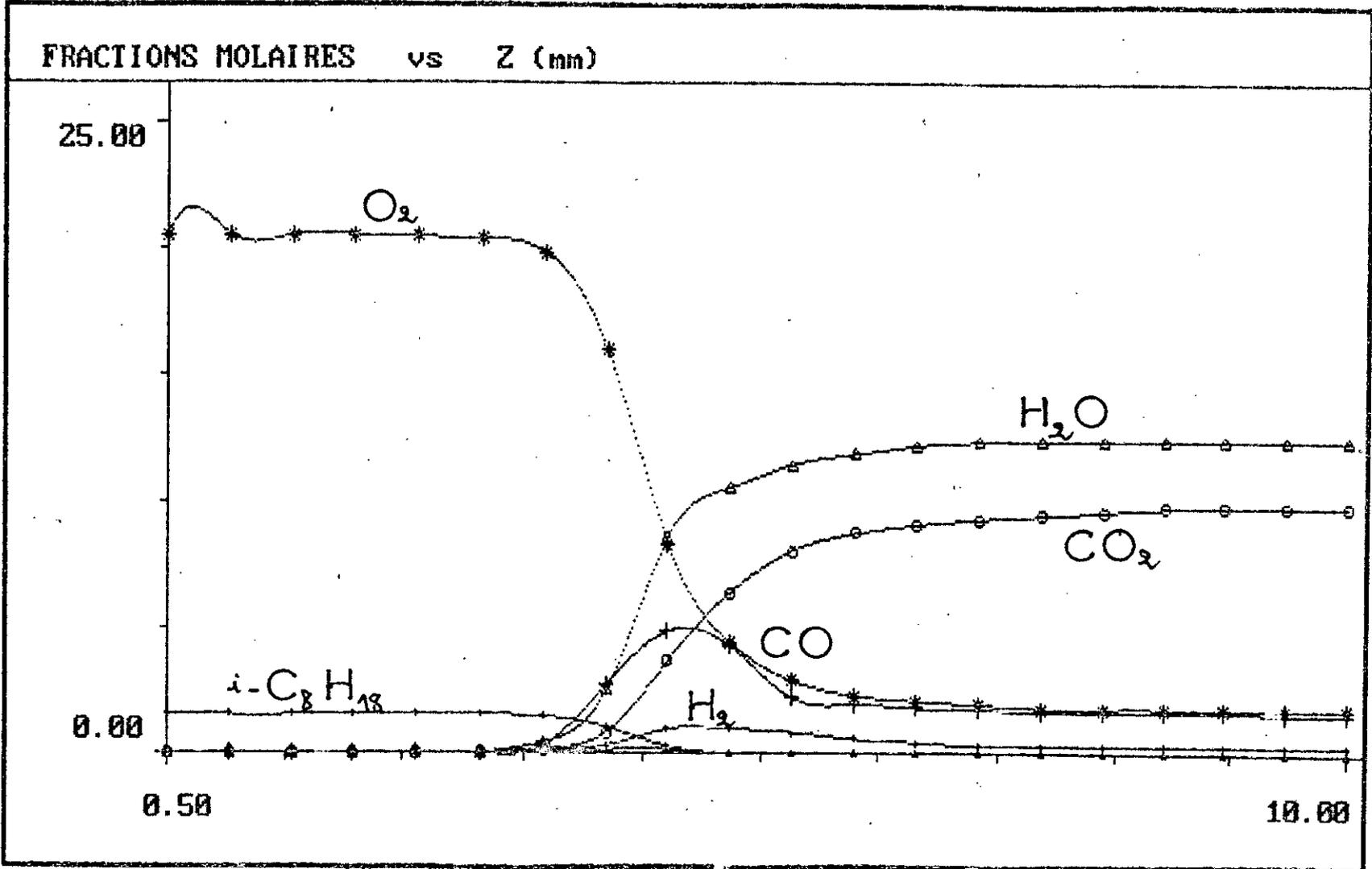


FIG.8-e

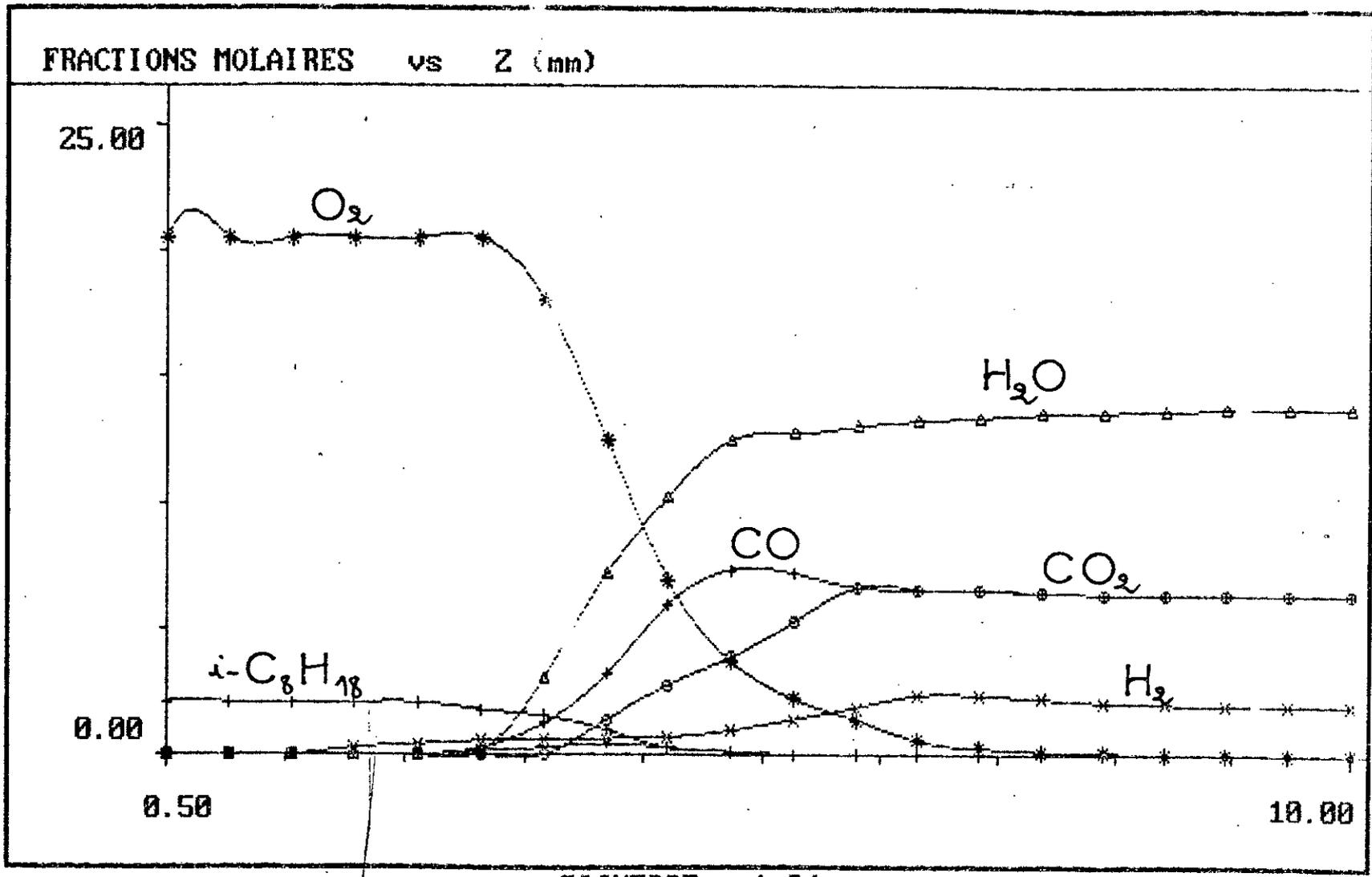


FIG. 9-e

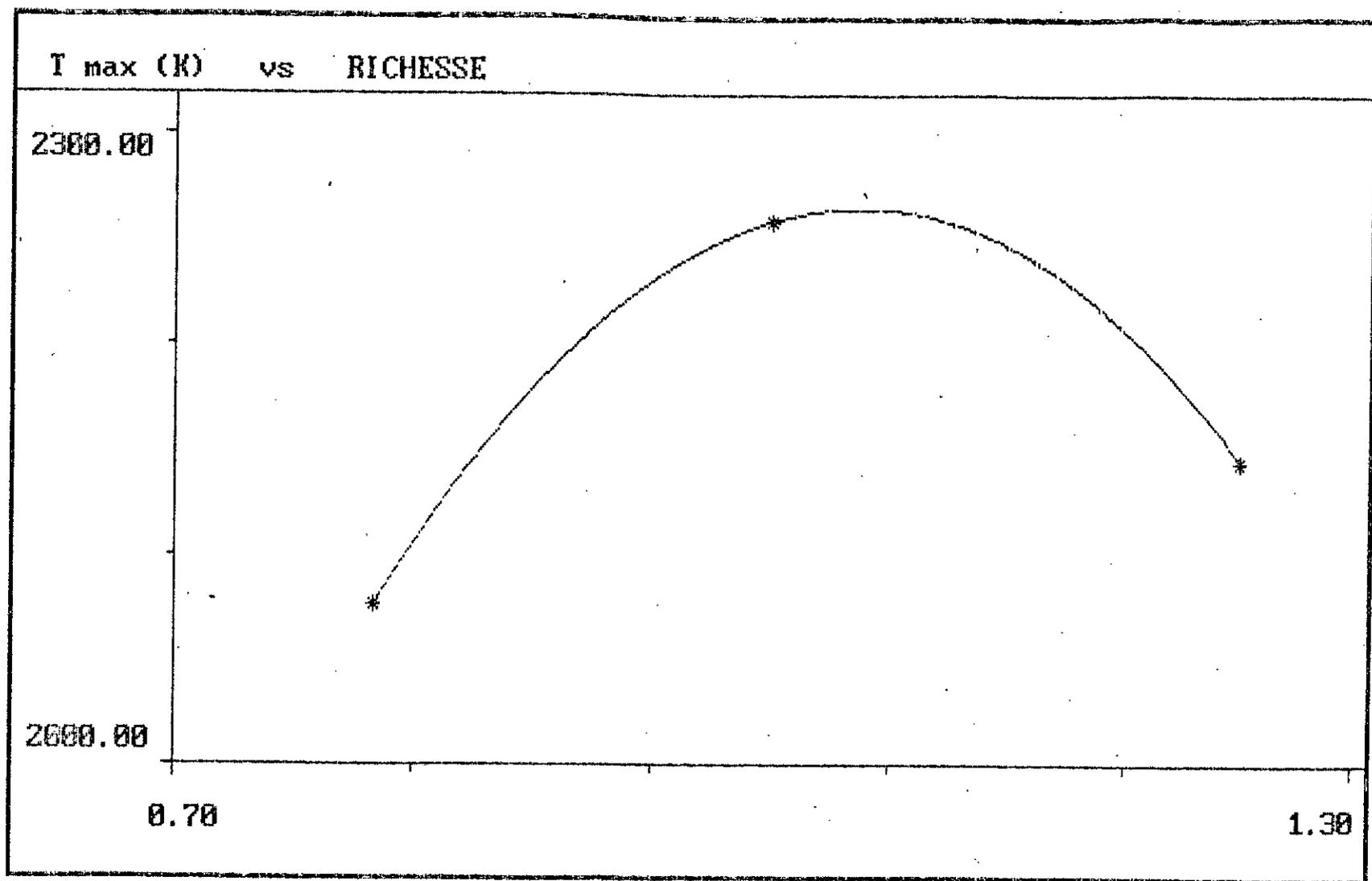


FIG 7

INFLUENCE DE LA RICHESSE SUR T_{max}

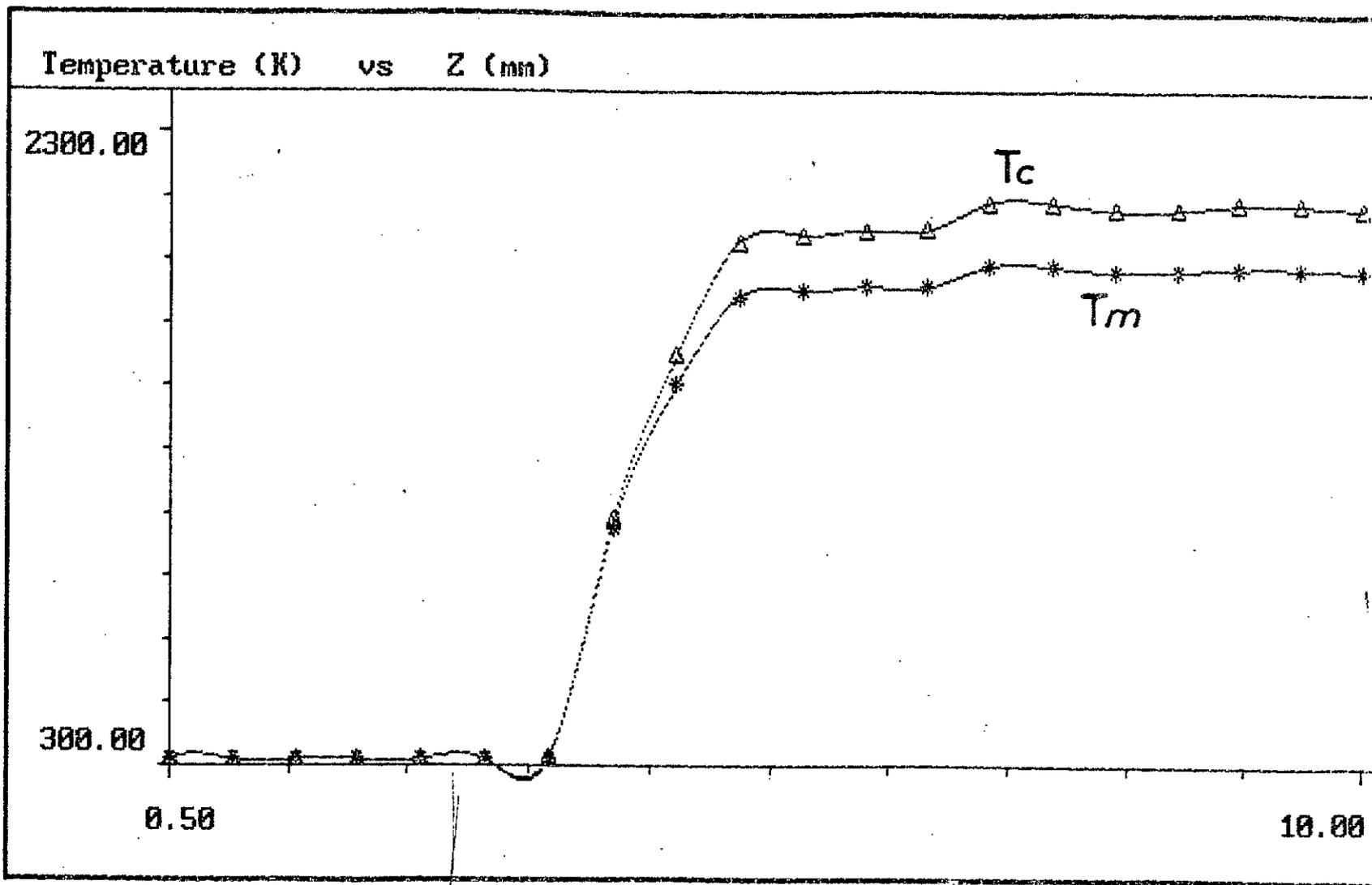


FIG. 8

RICHESSSE = 0.8

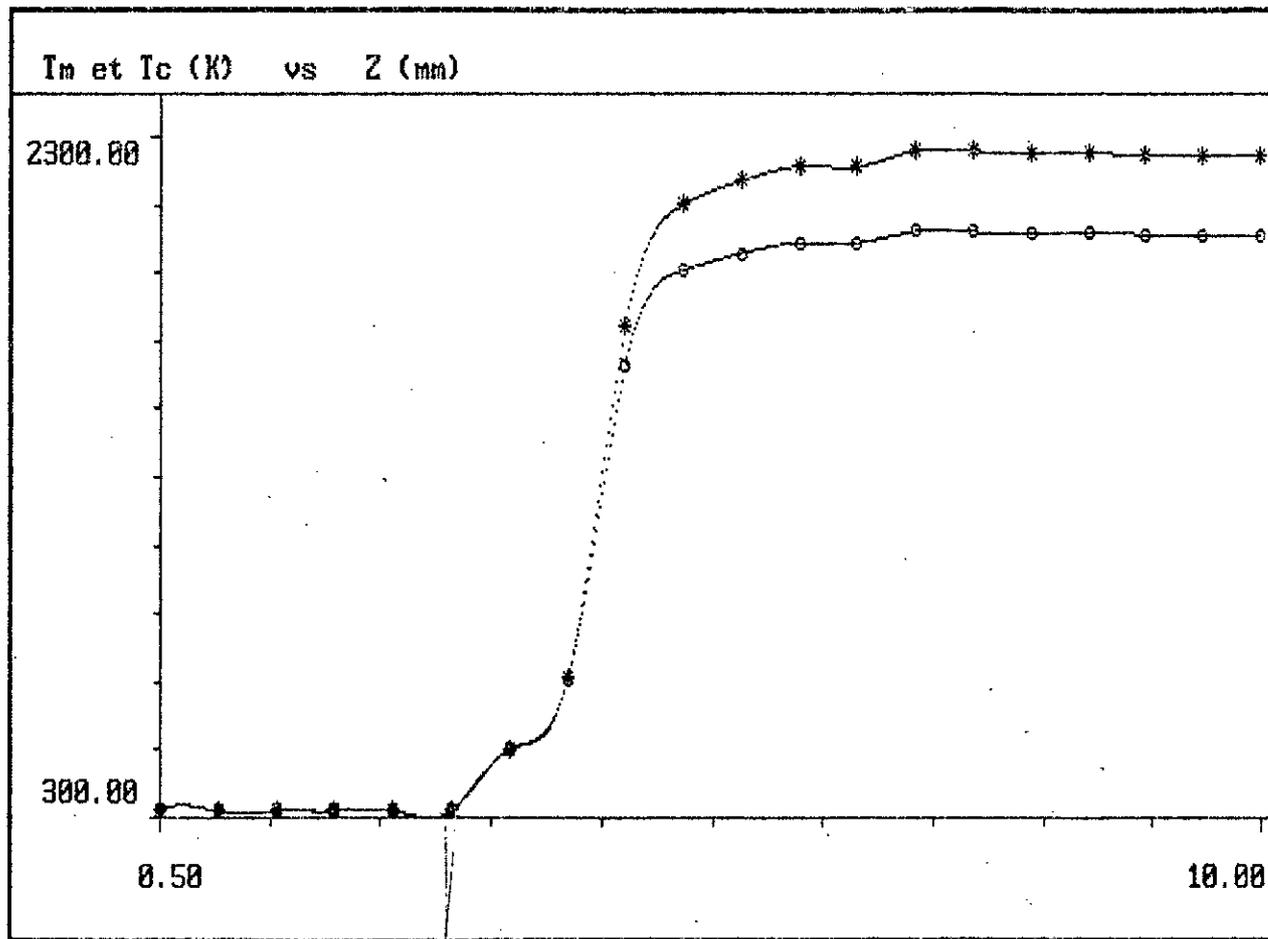


FIG.9

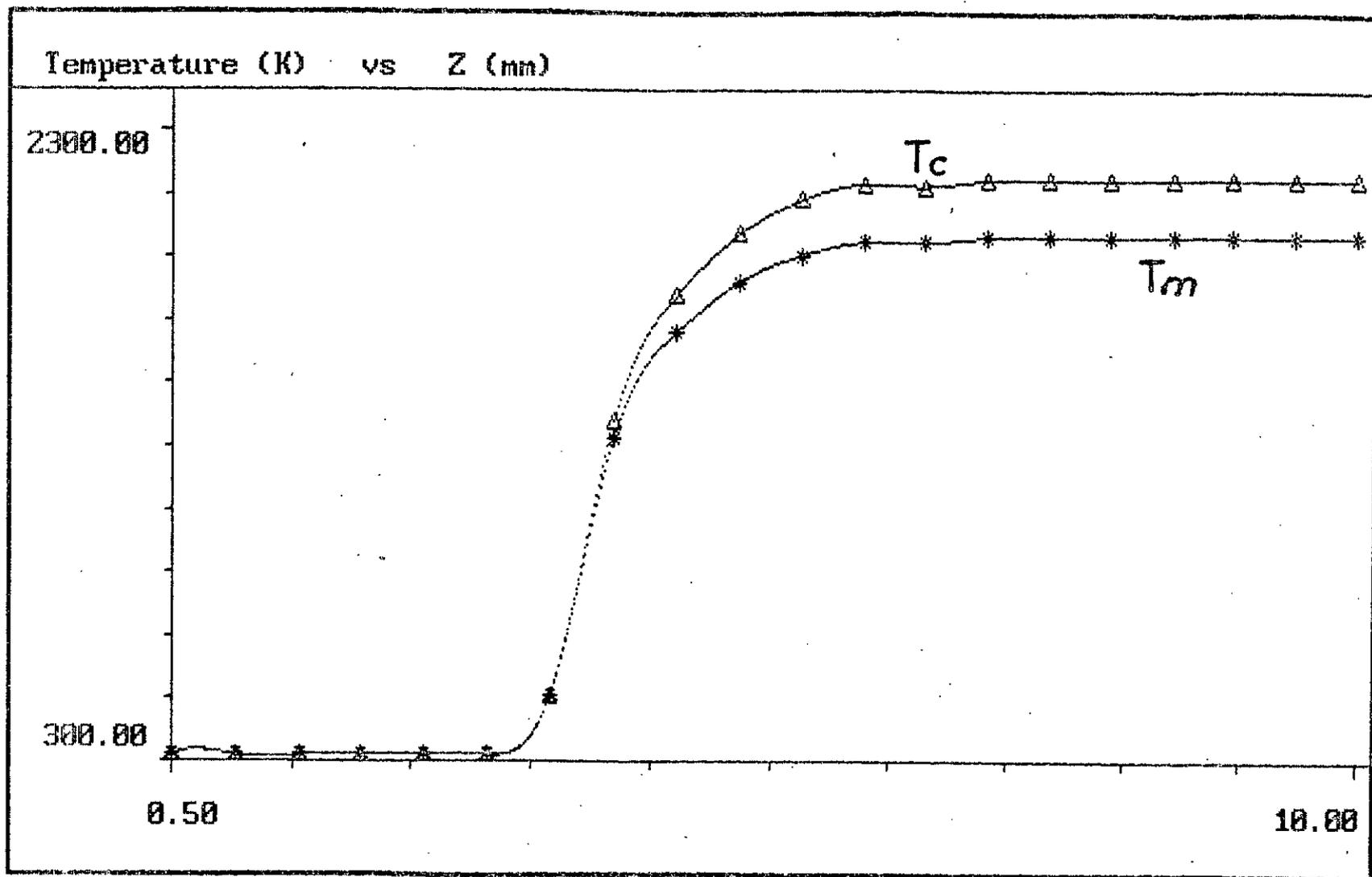


FIG.10

RICHESSE = 1.24

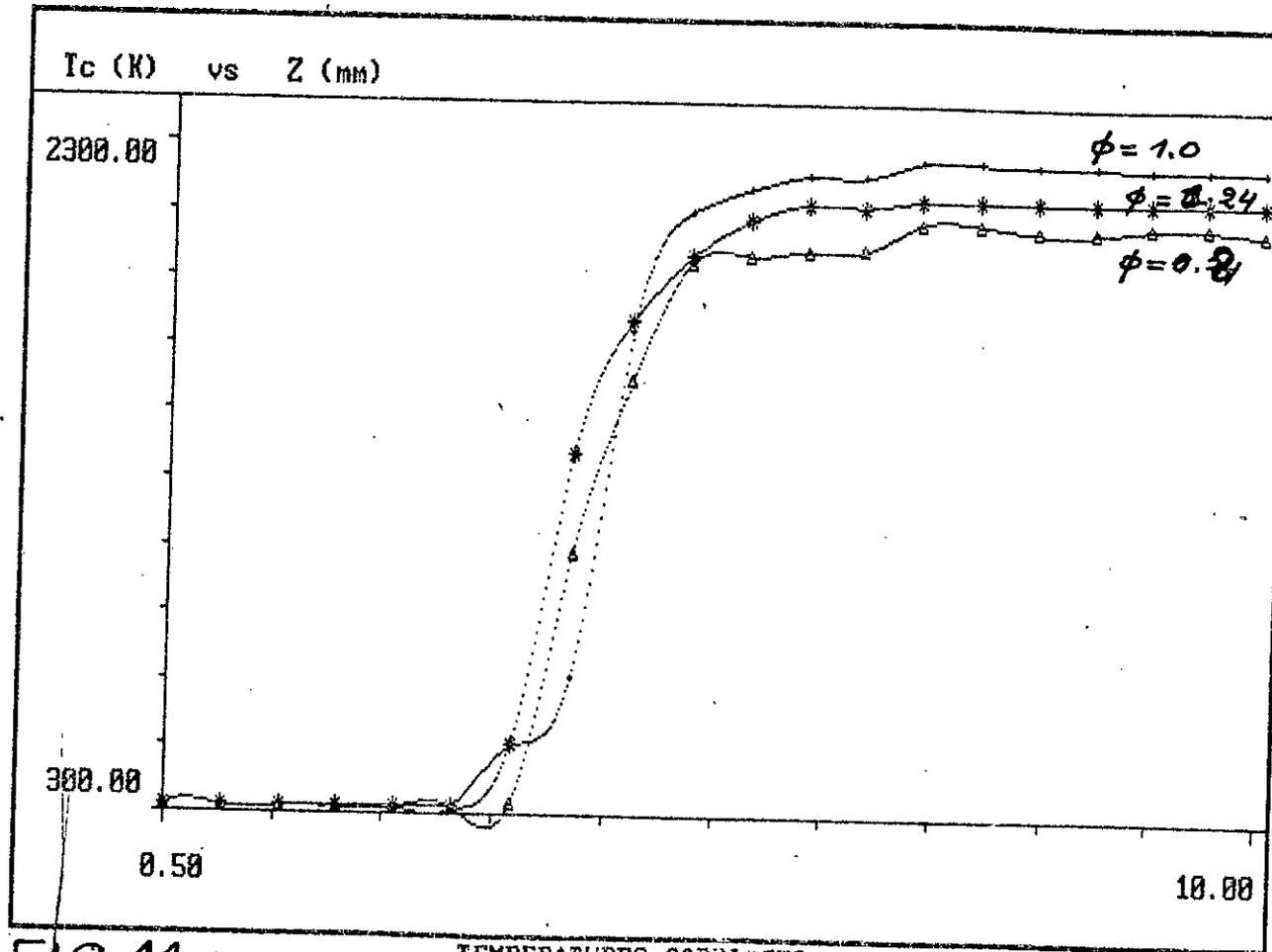


FIG.11

TEMPERATURES CORRIGÉES

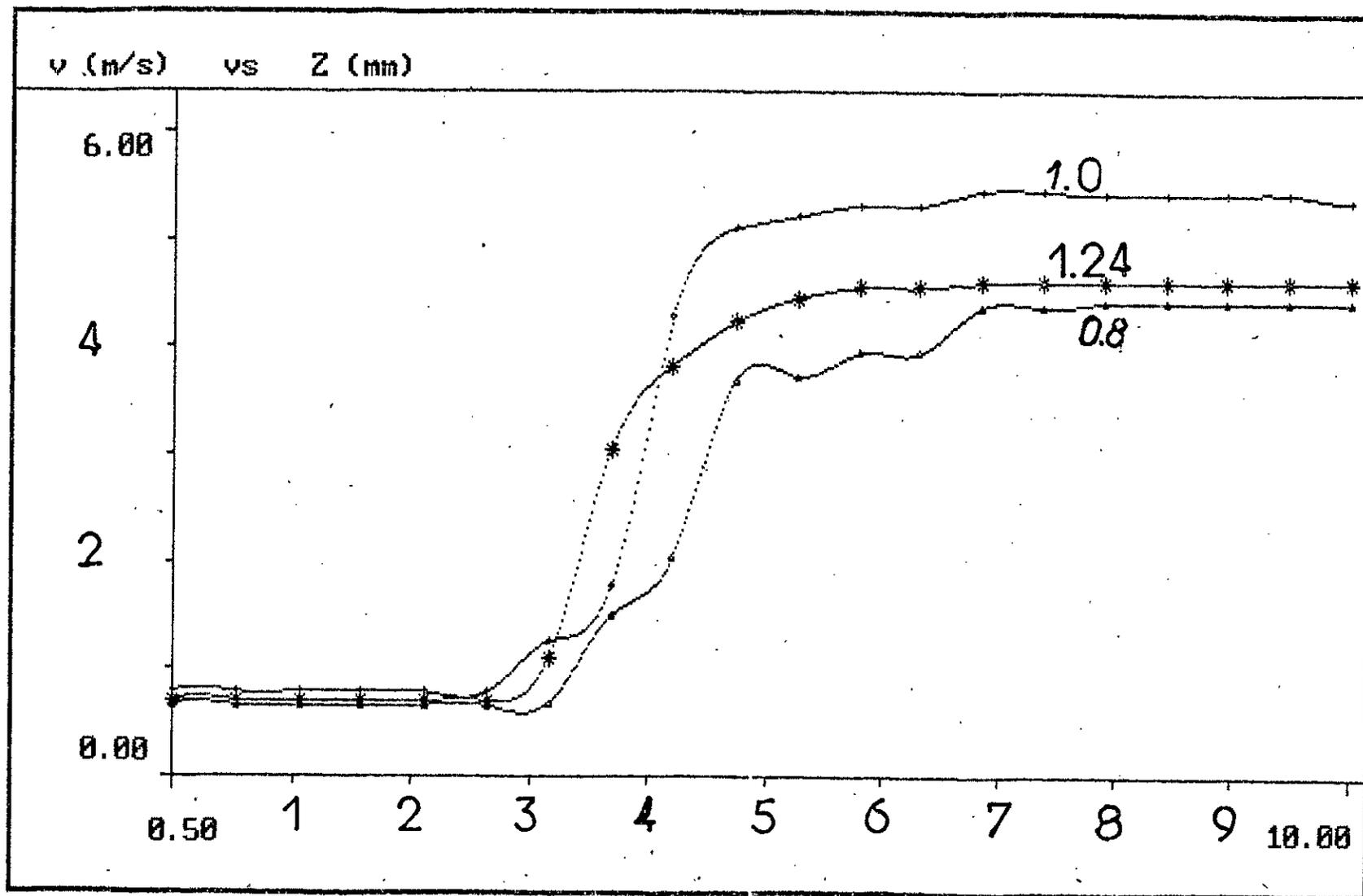


FIG. 12

VITESSE D'ÉCOULEMENT

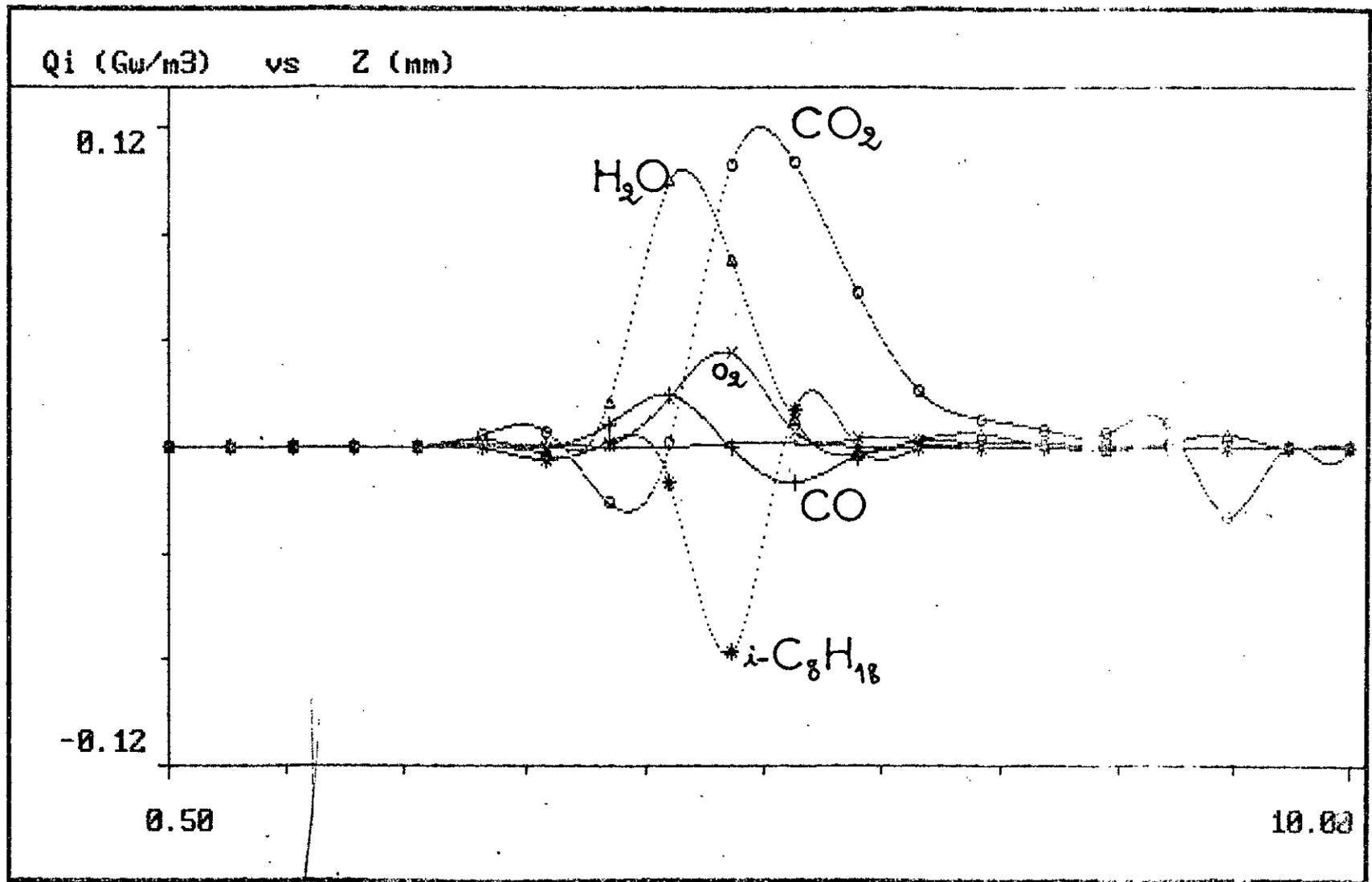


FIG.13

RICHESSSE = 0.8

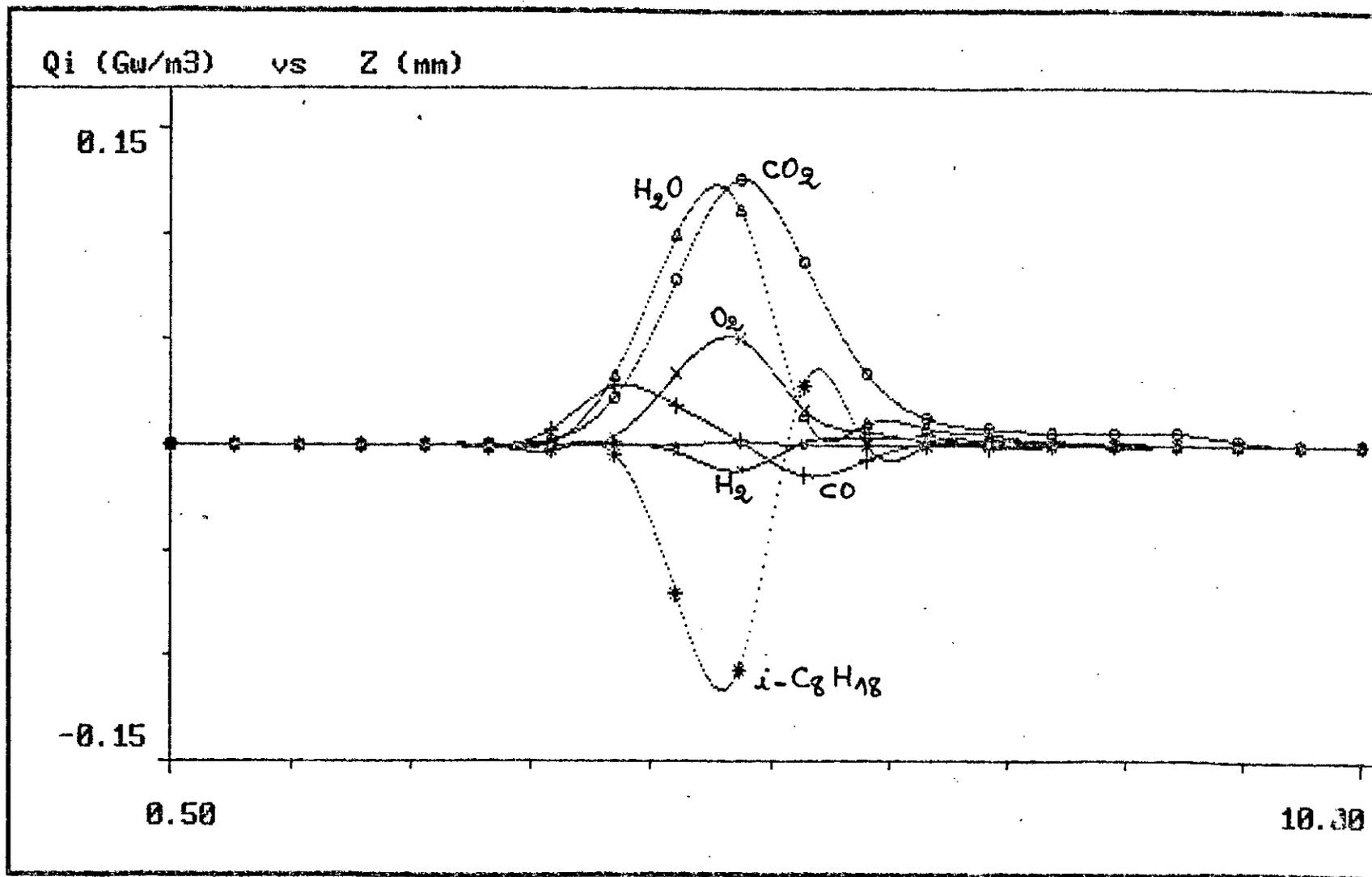


FIG. 14

RICHESSSE = 1.0

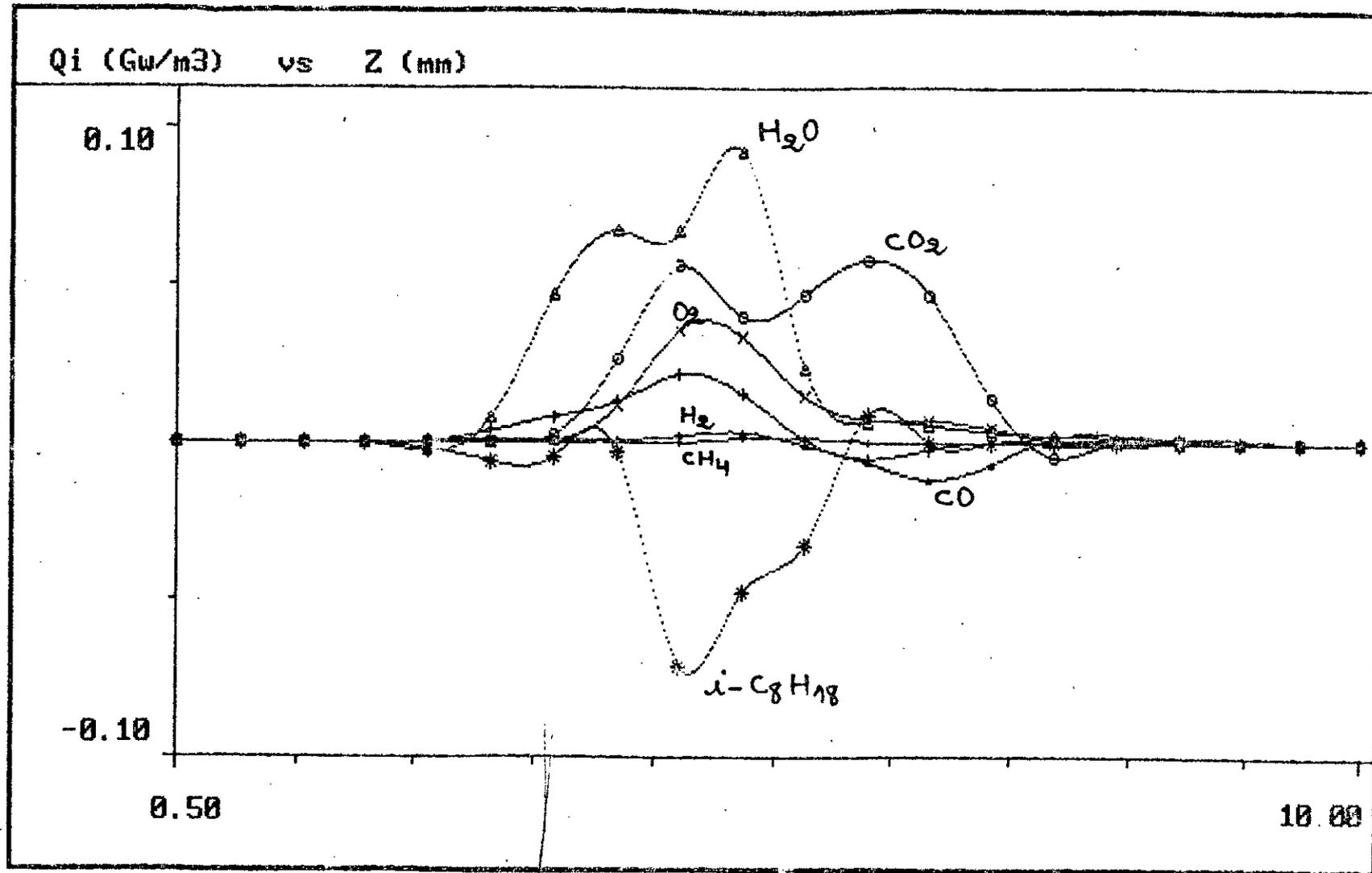


FIG. 15

RICHESSSE = 1.24

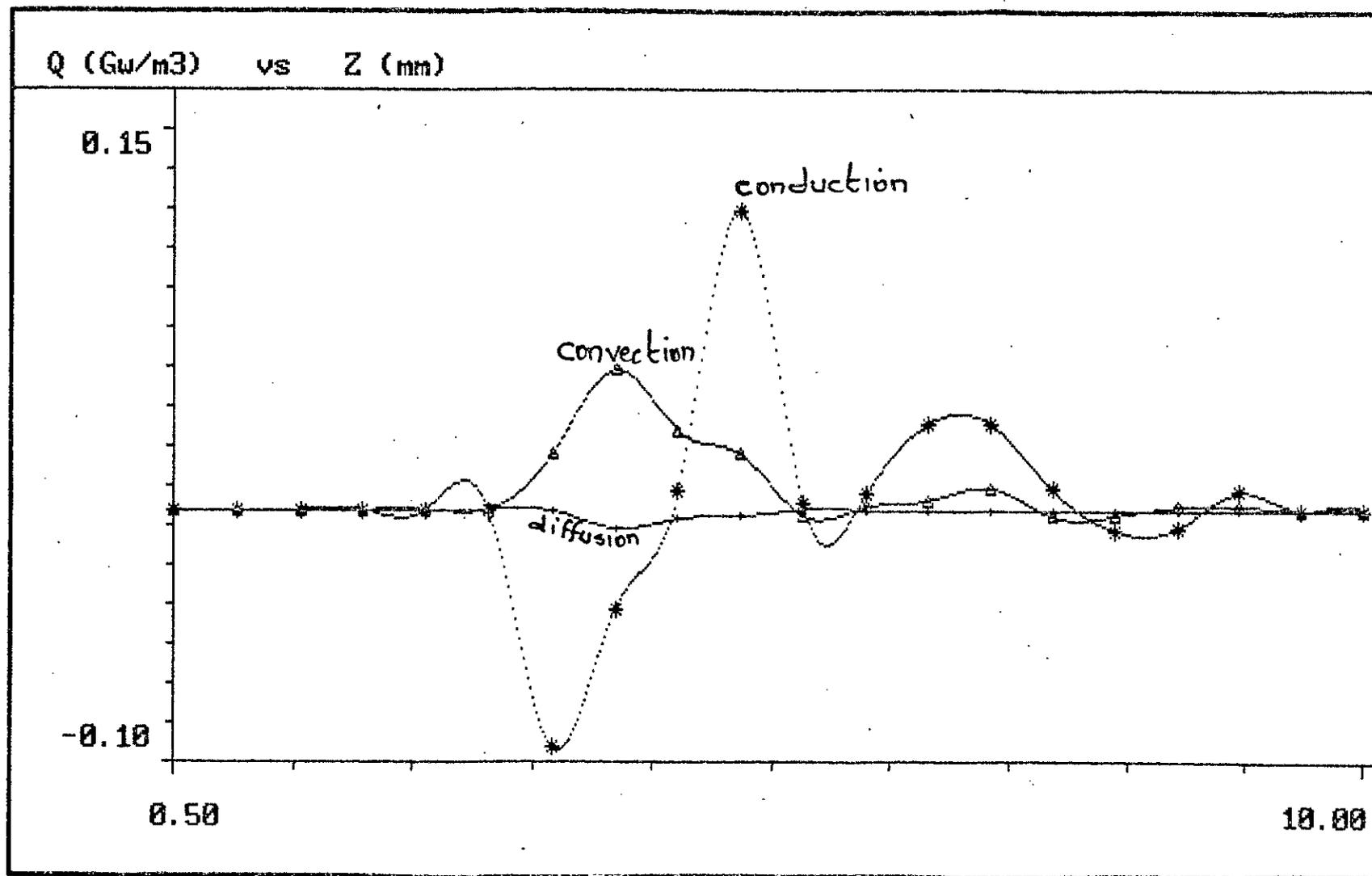


FIG. 16

RICHESSSE = 0.8

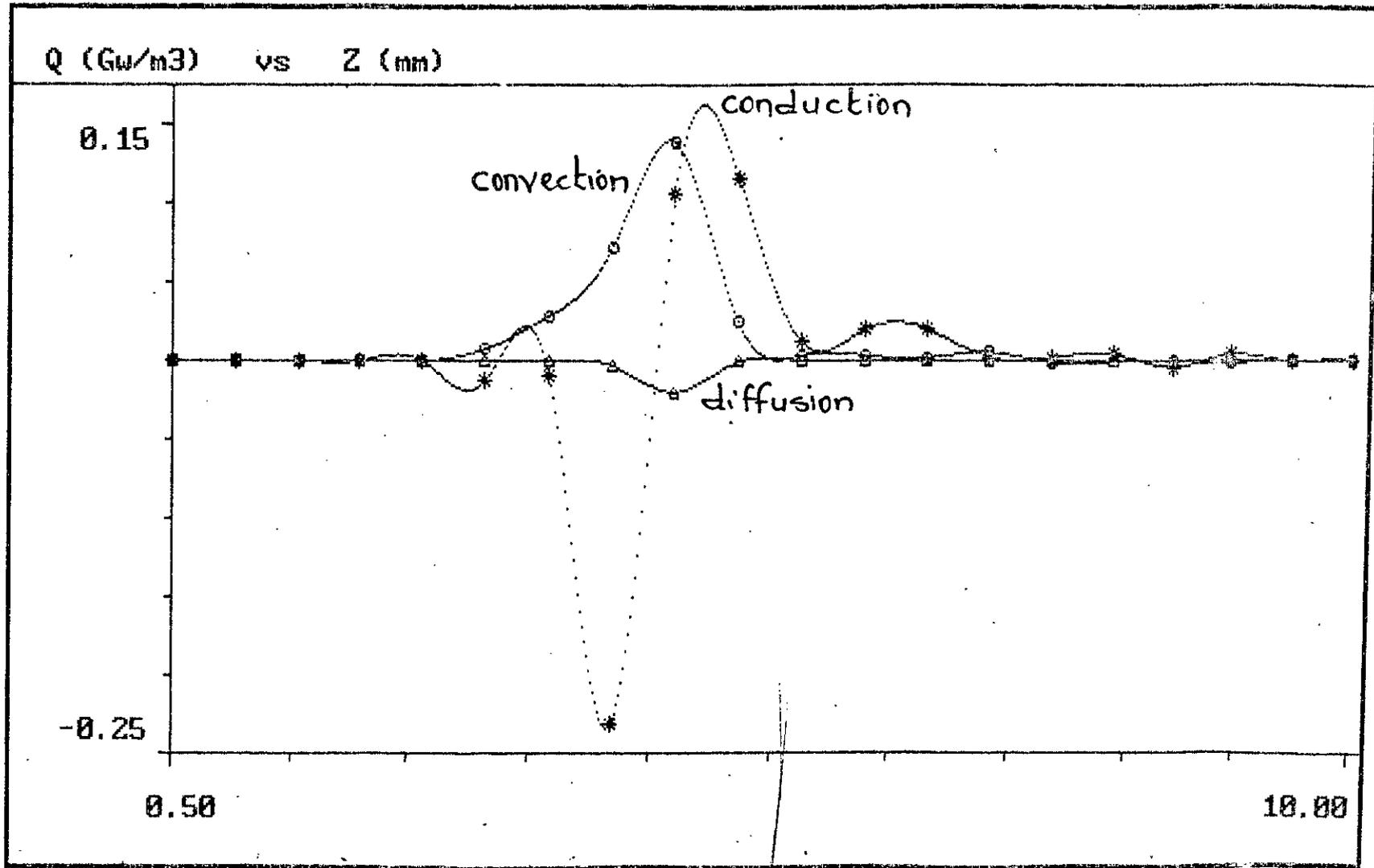


FIG.17

RICHESSSE = 1.0

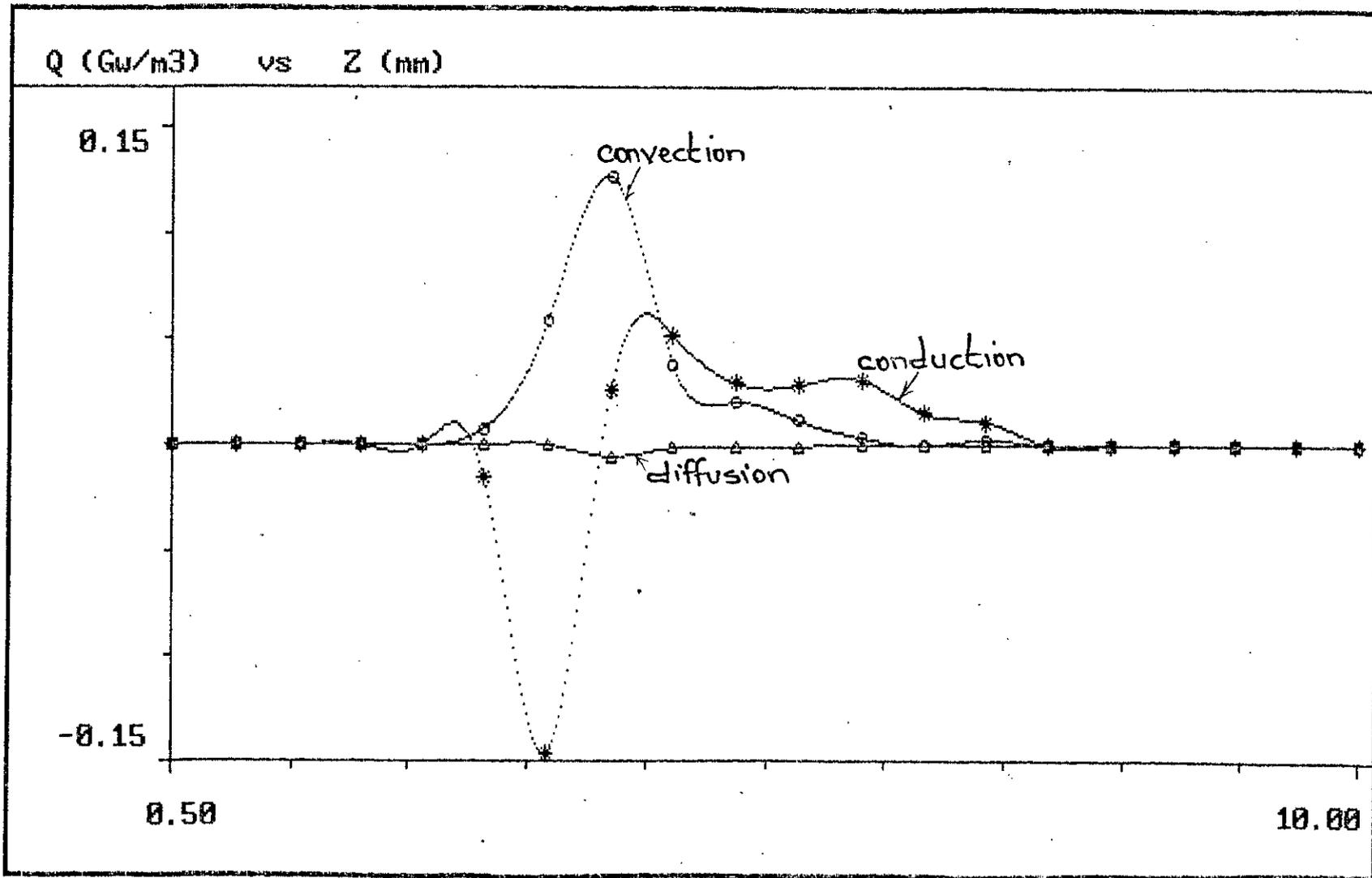


FIG. 18

RICHESSÉ = 1.24

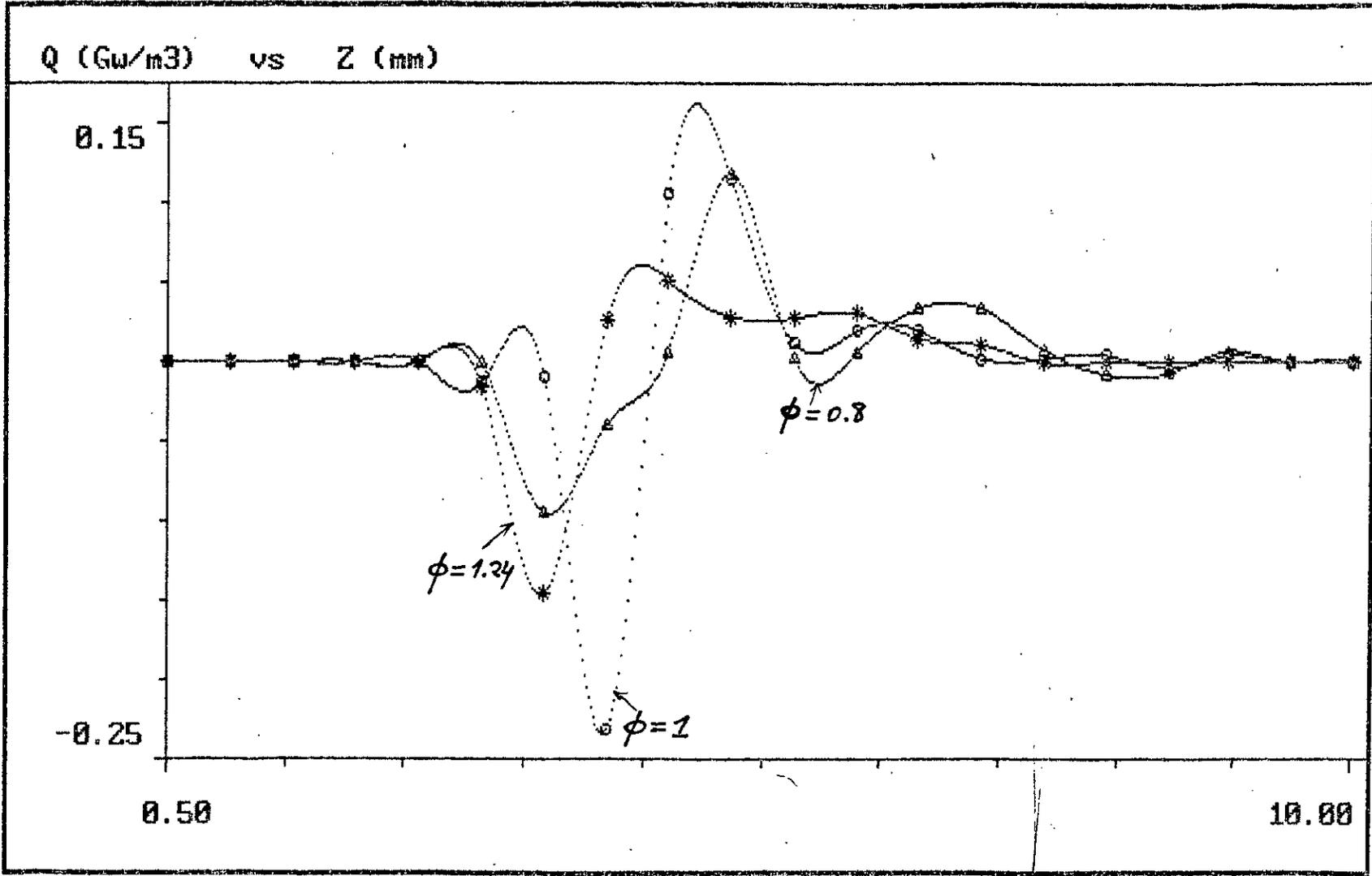


FIG. 19

Q (conduction)

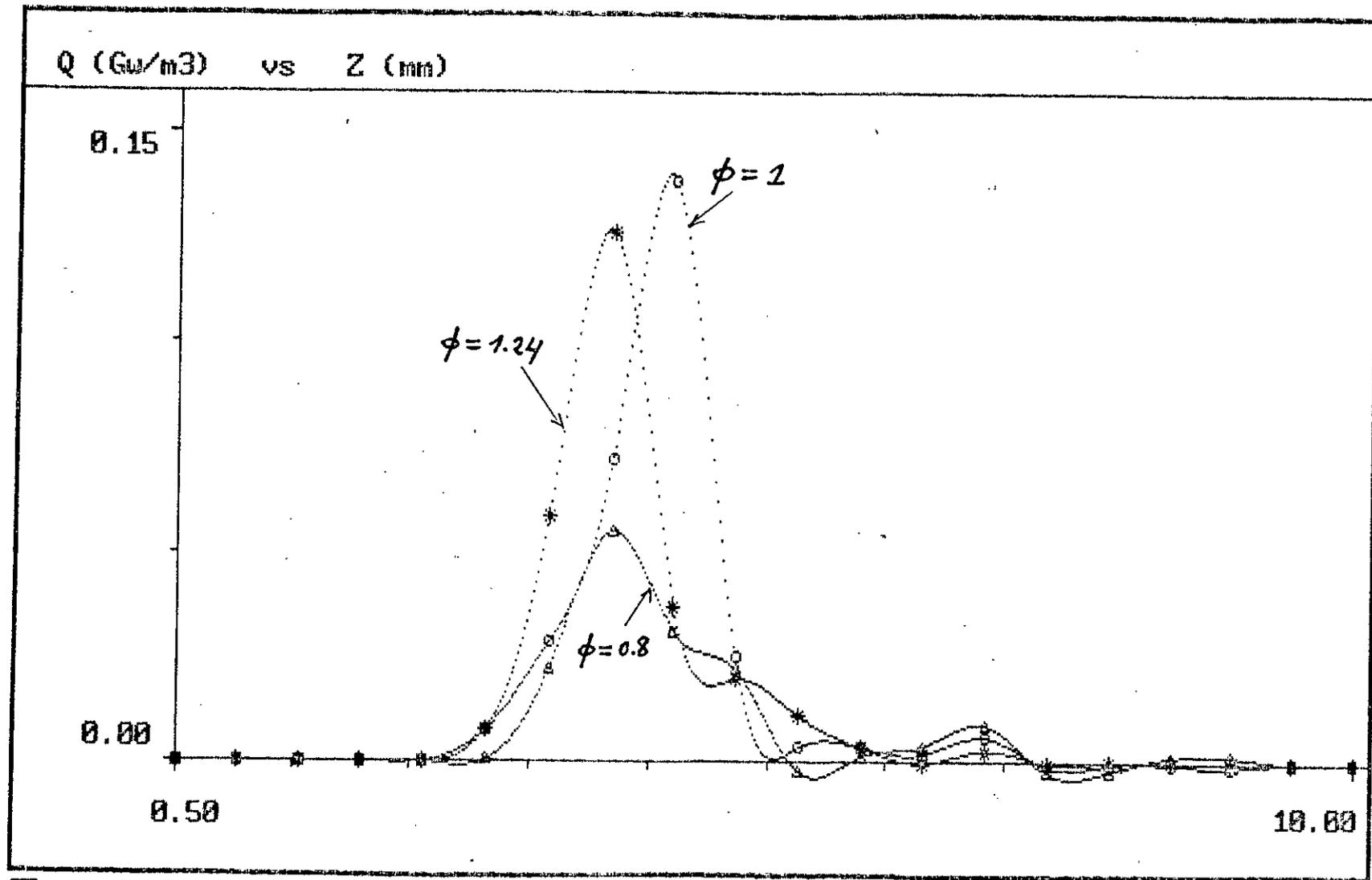


FIG. 20

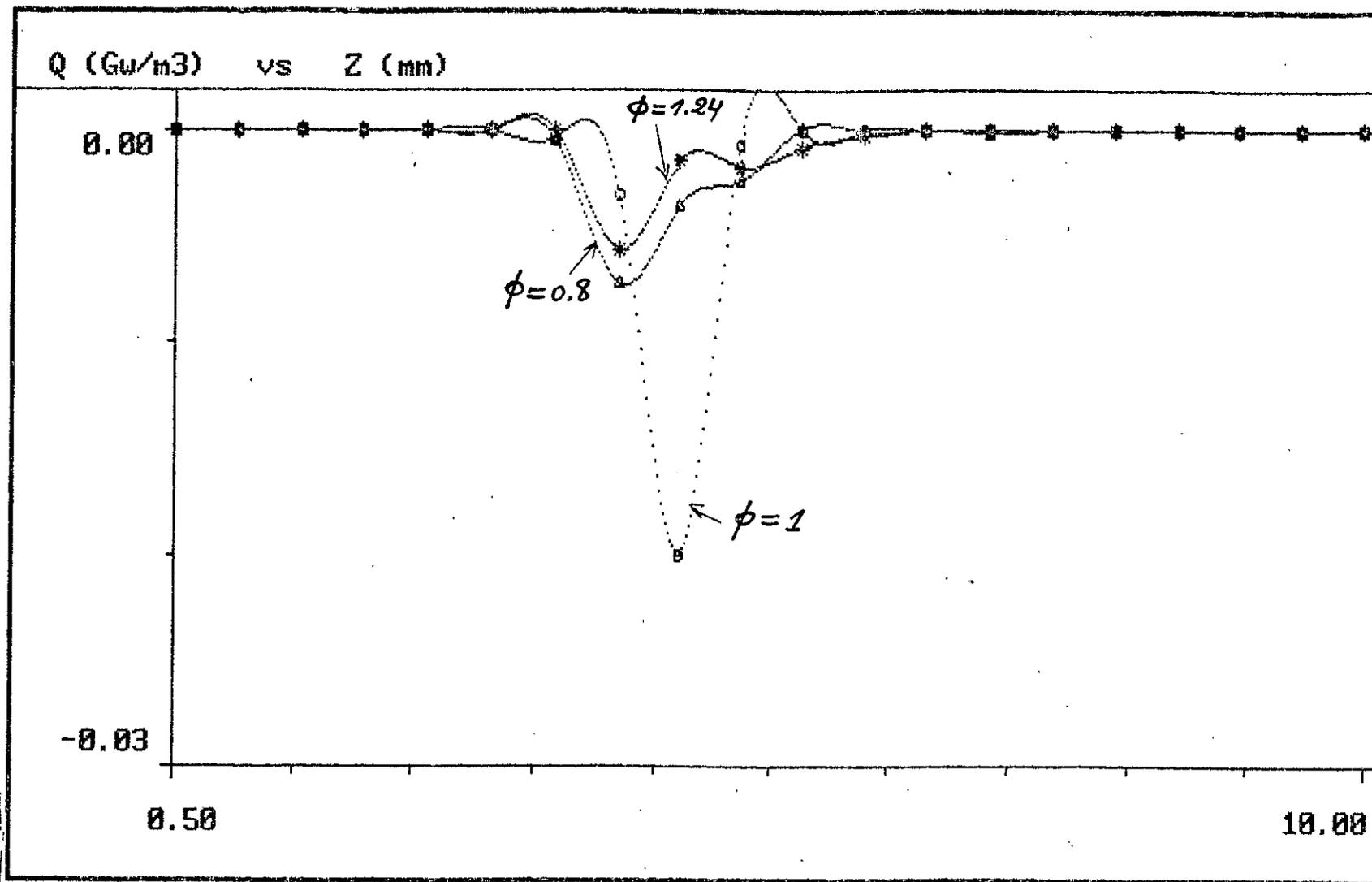


FIG. 21

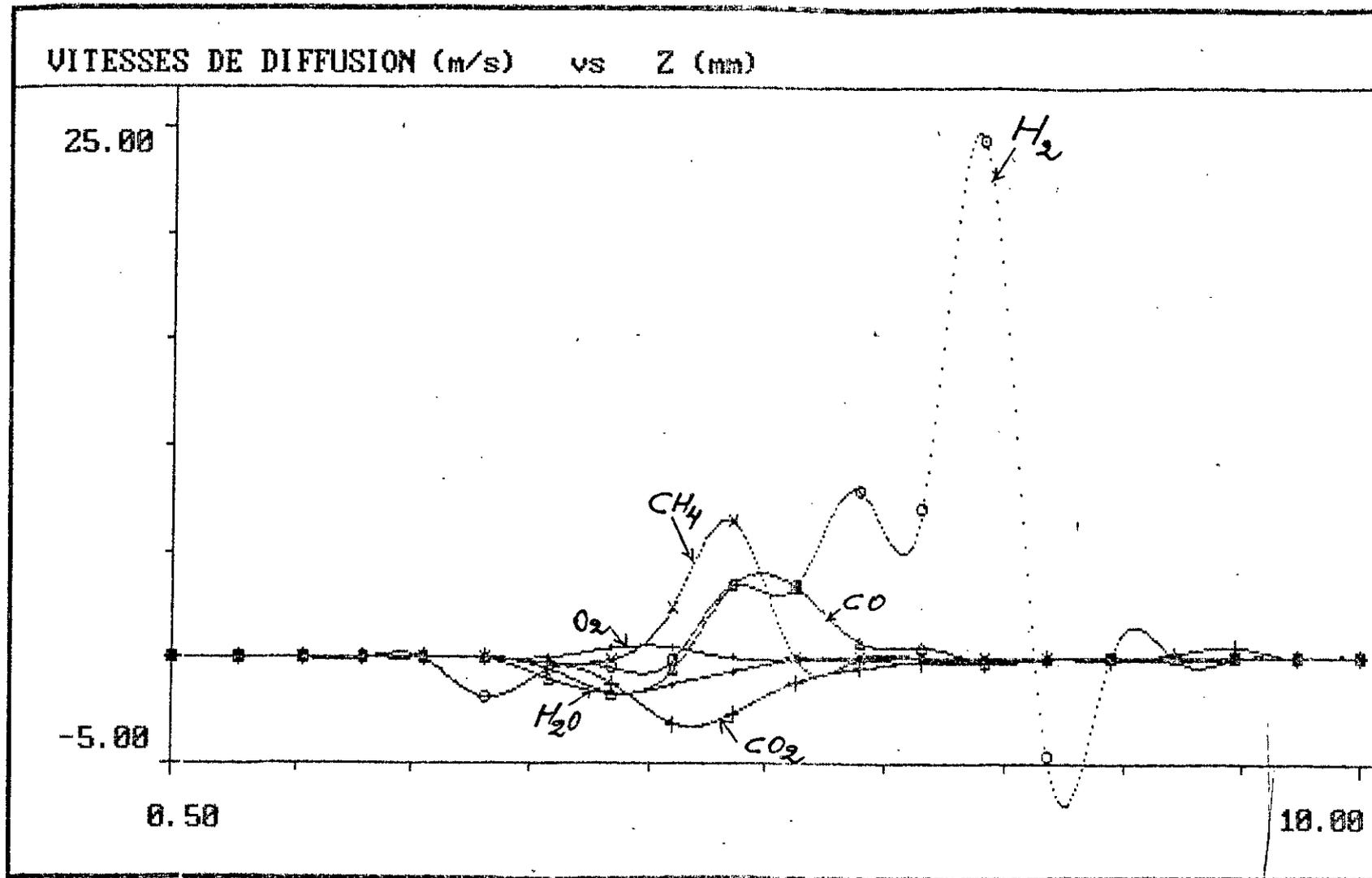


FIG. 22.

RICHESSSE = 0.8

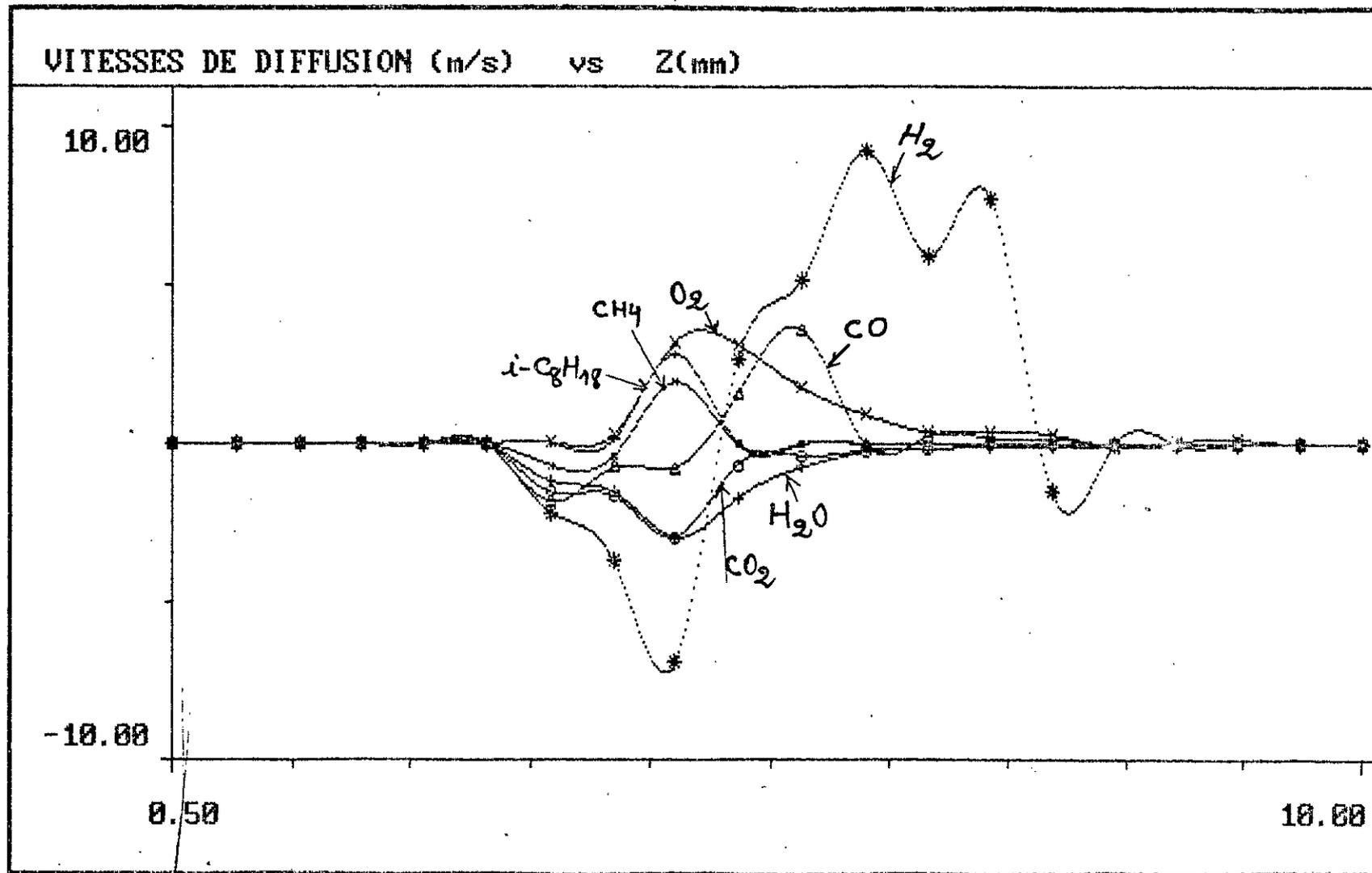


FIG. 23

RICHESSSE = 1.0

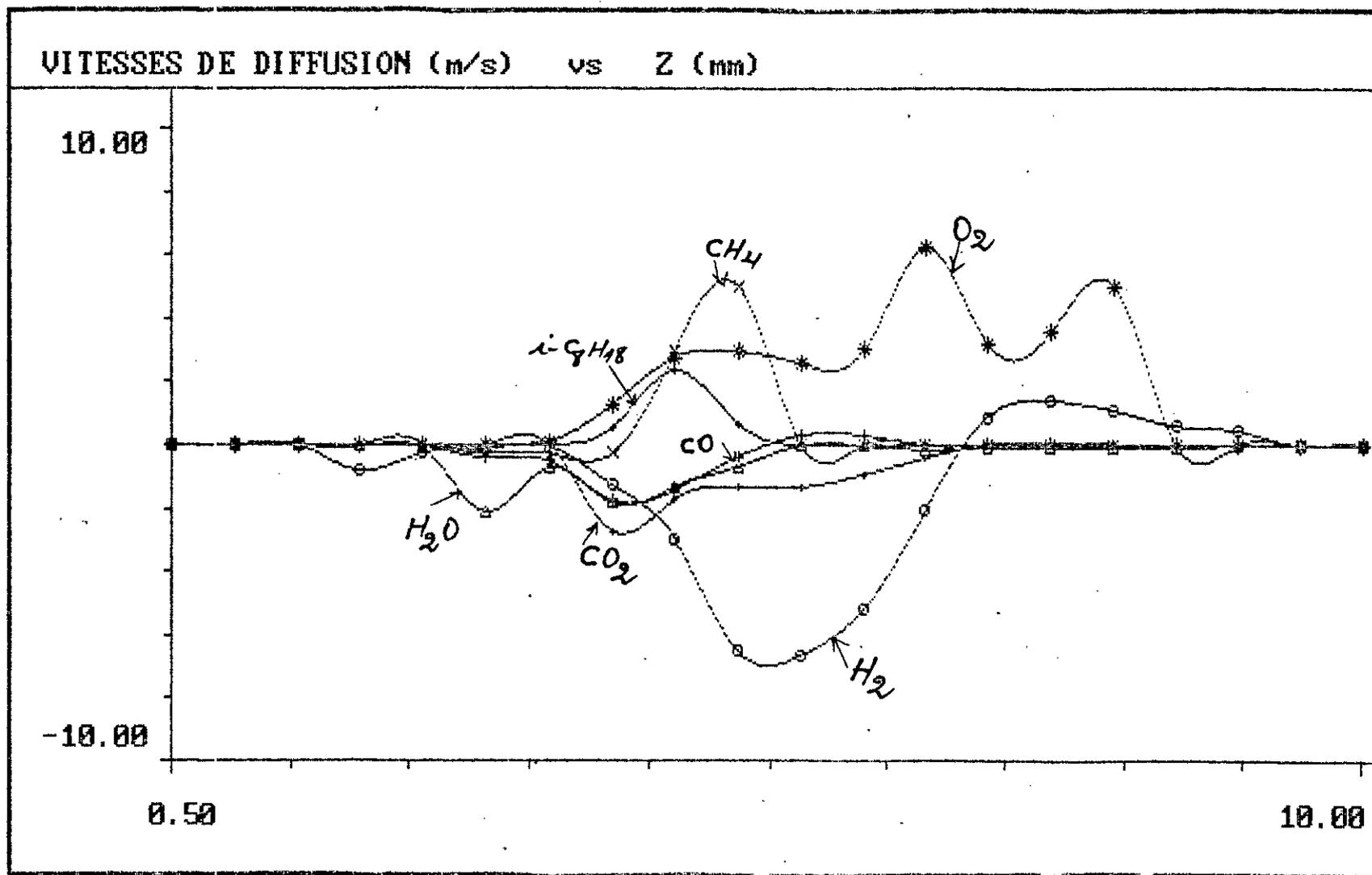


FIG. 24

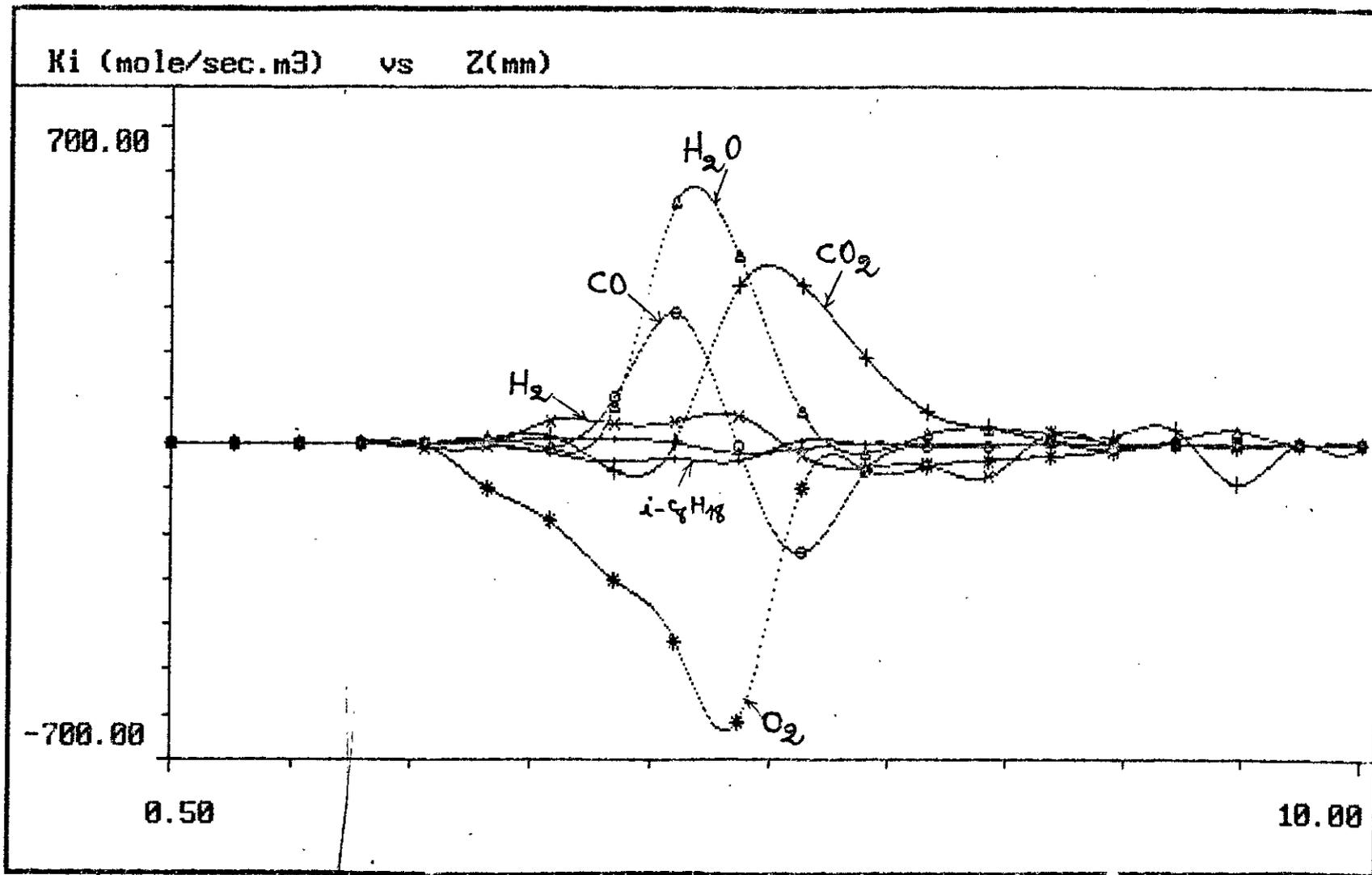


FIG. 25

RICHESSSE = 0.8

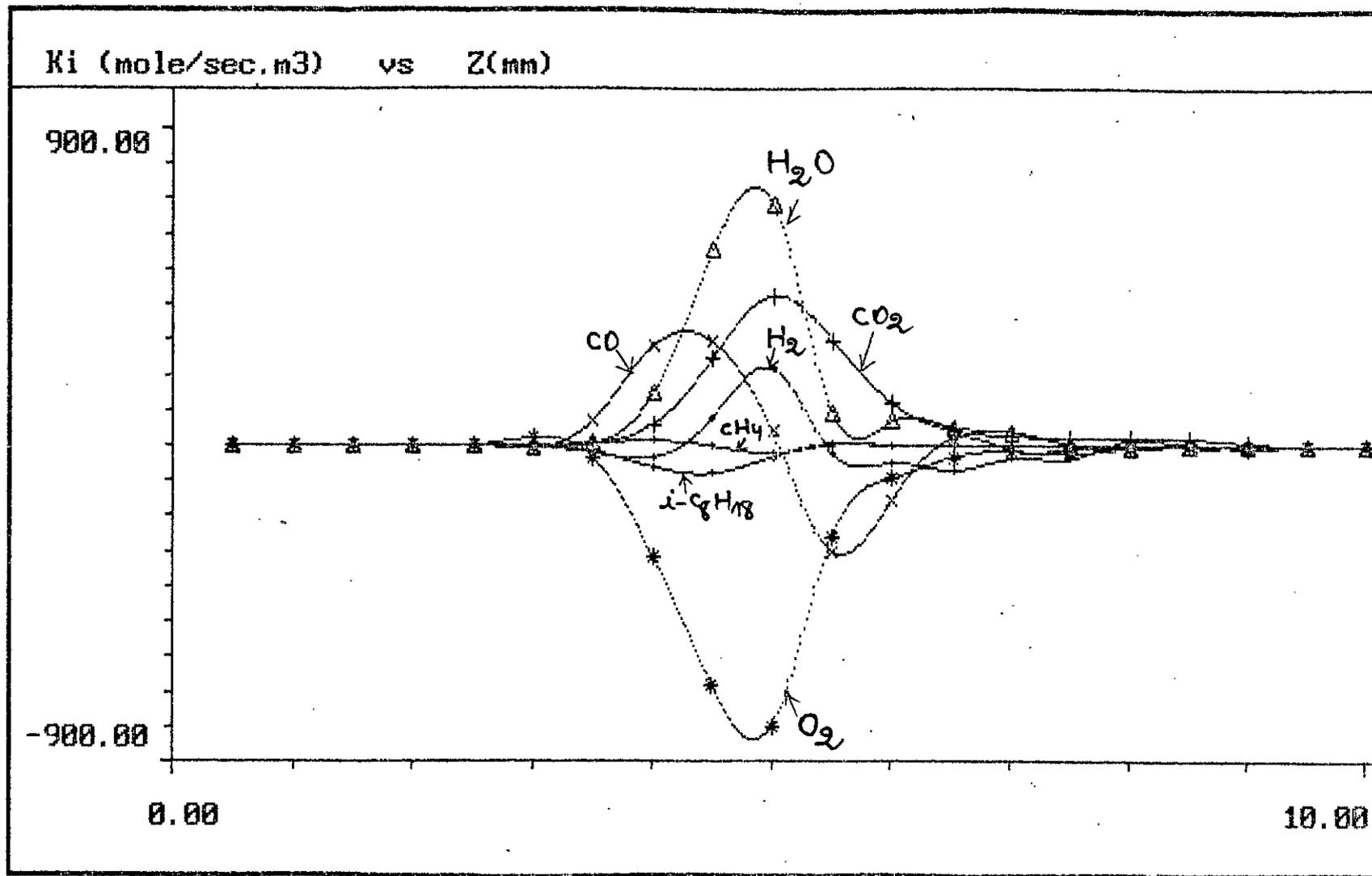


FIG. 26

RICHESSSE = 1.0

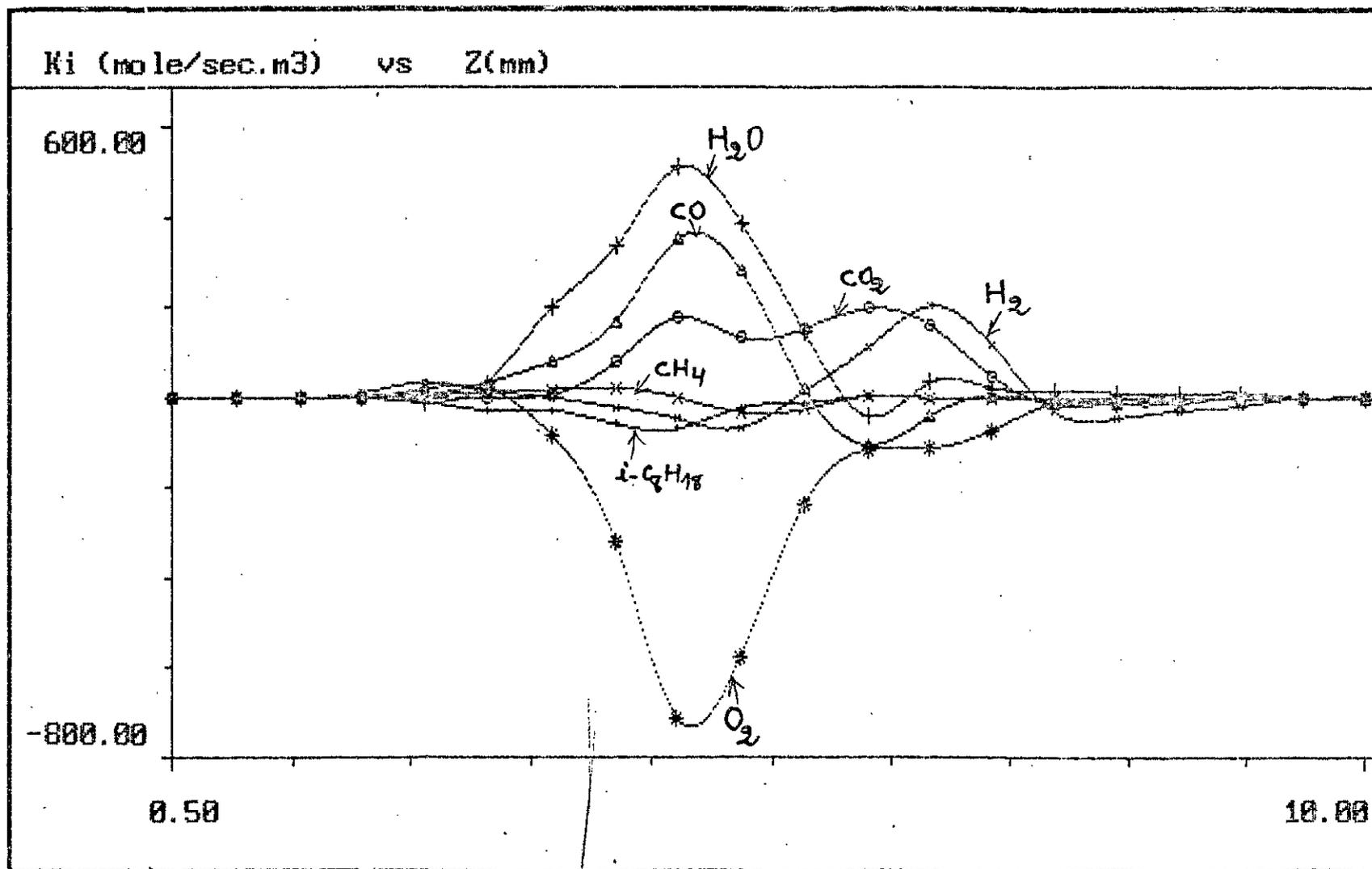


FIG.27

RICHESSSE = 1.24

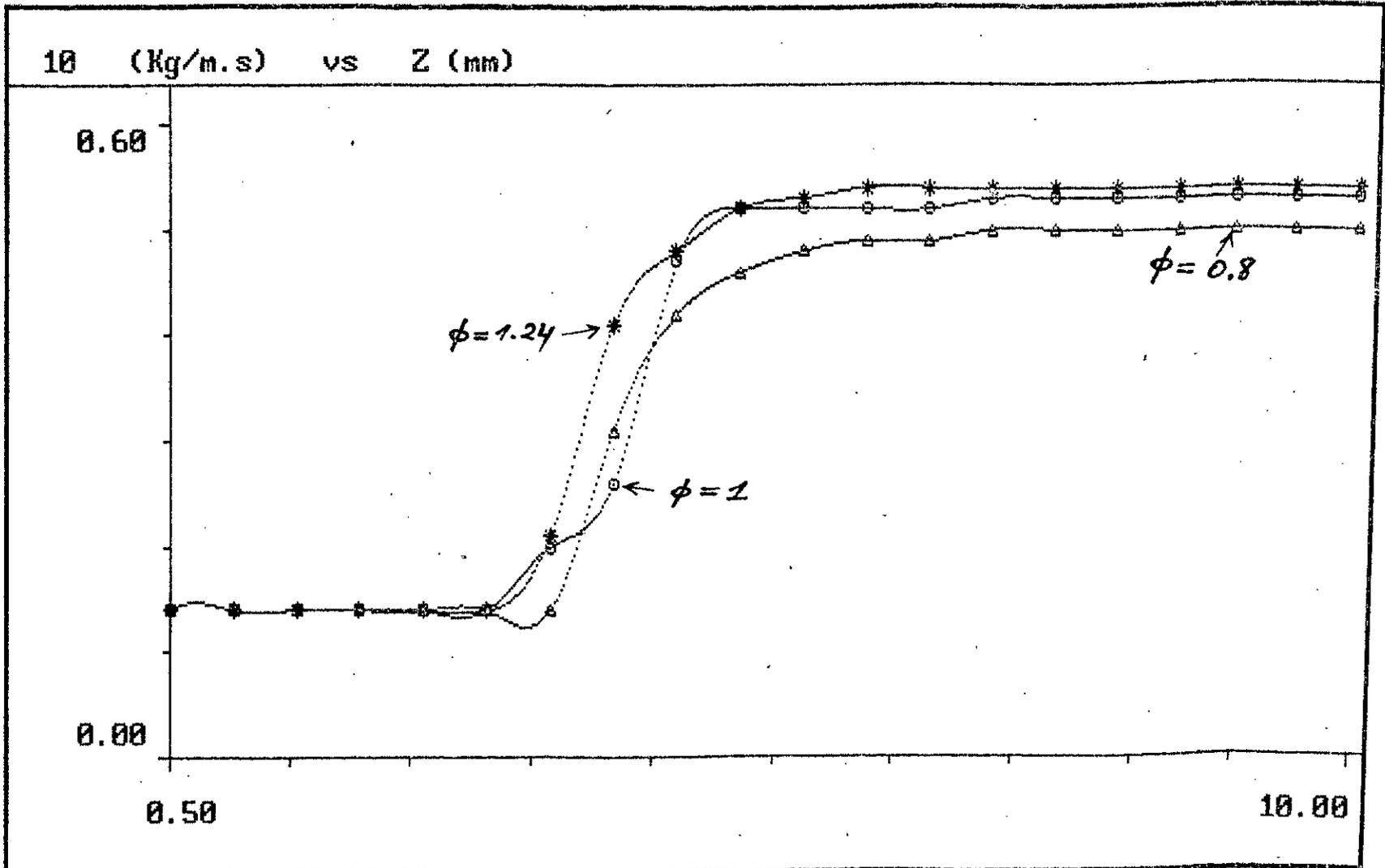


FIG. 28

VISCOSITE DYNAMIQUE DU MELANGE

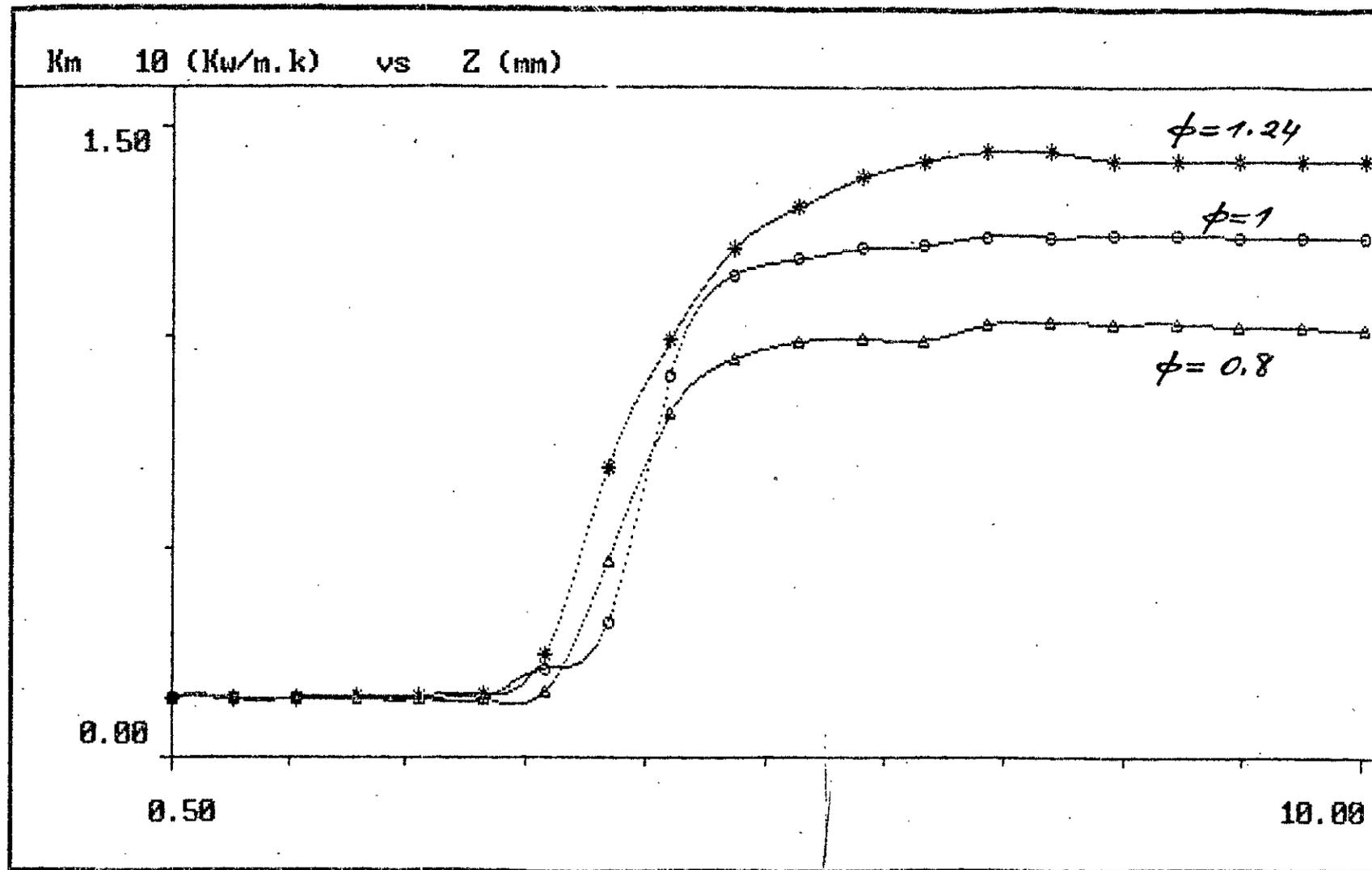


FIG. 29

CONDUCTIVITE THERMIQUE DU MELANGE

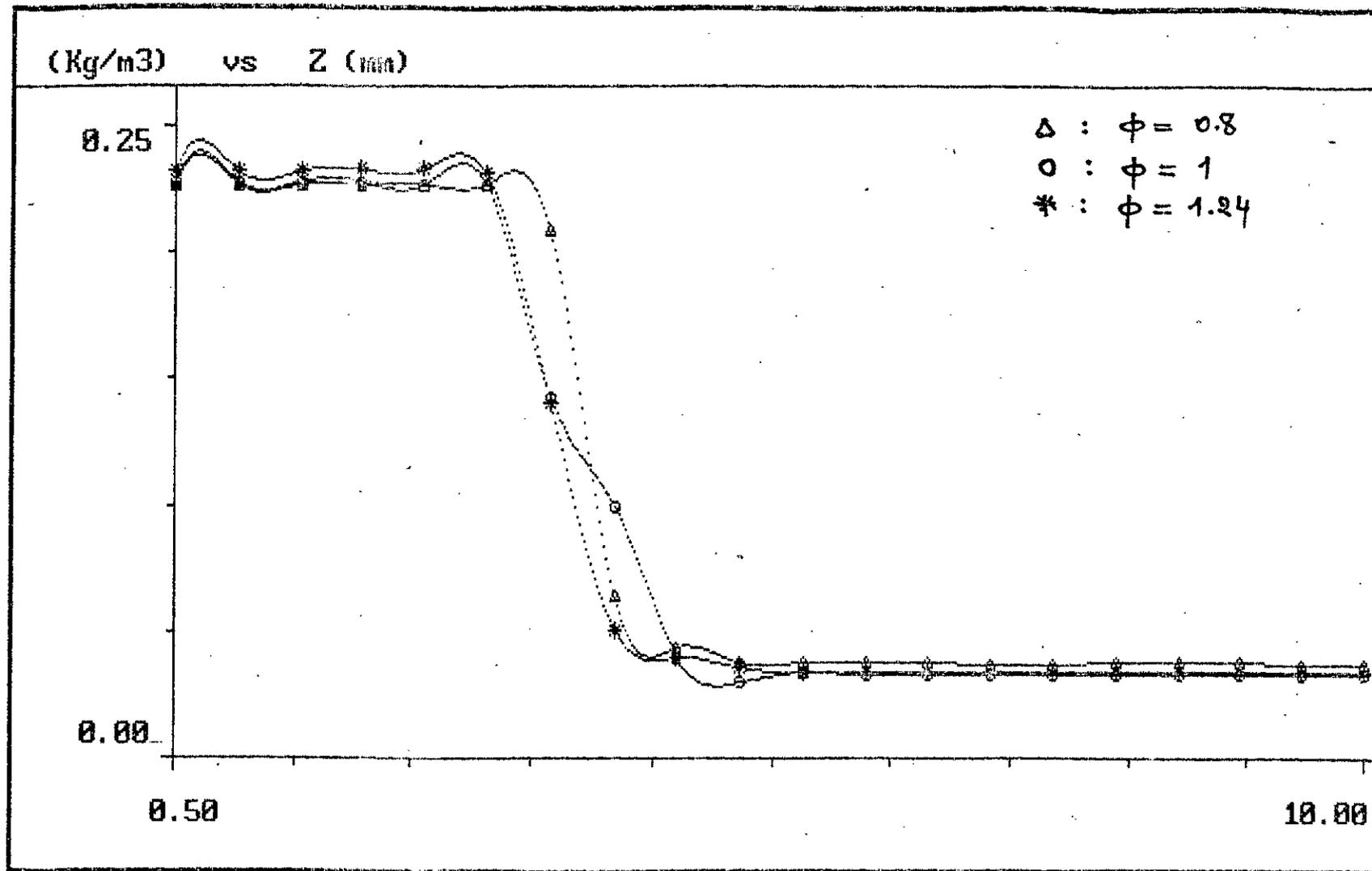


FIG. 30

DENSITE DU MELANGE

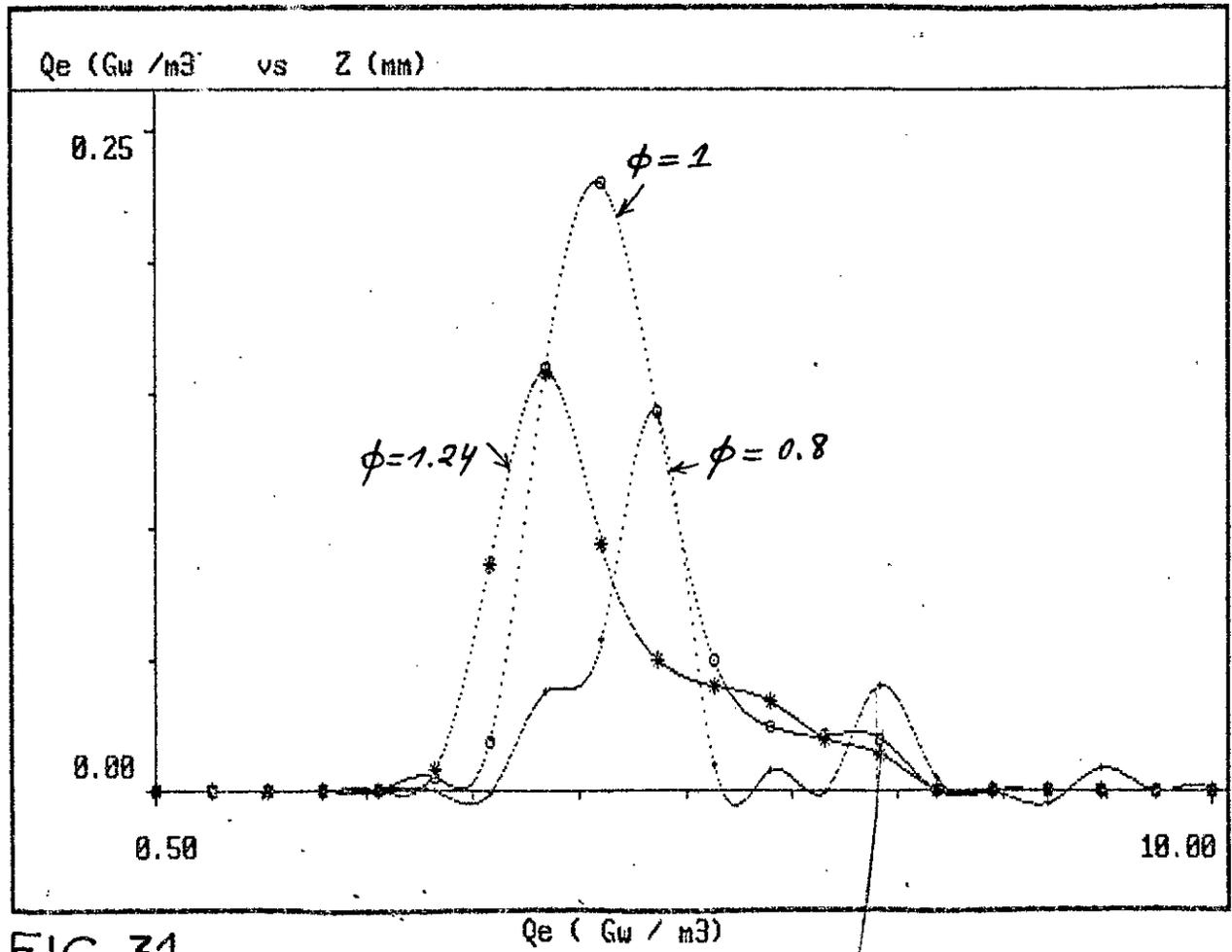


FIG.31

Qe (Gw / m3)

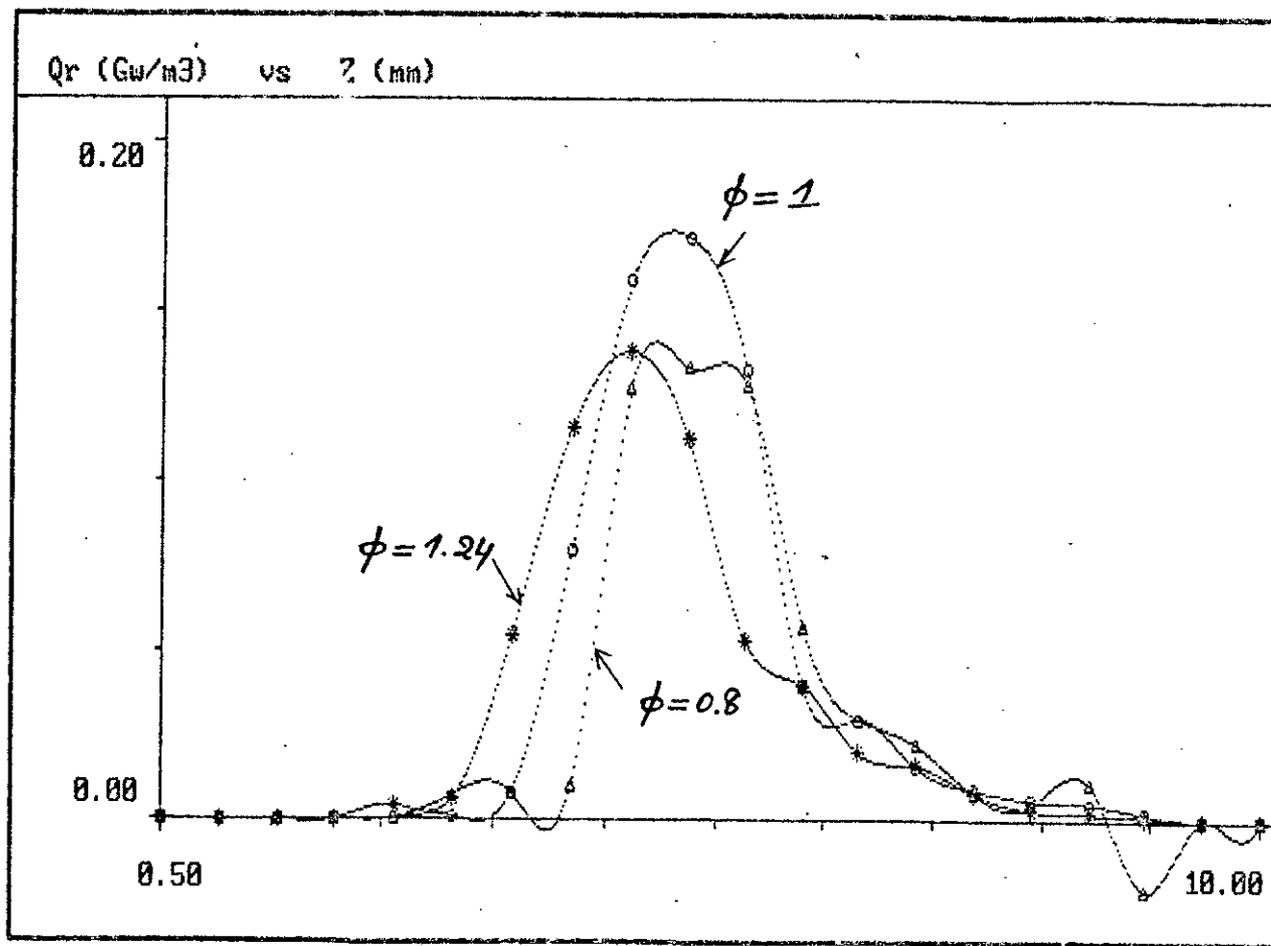


FIG.32

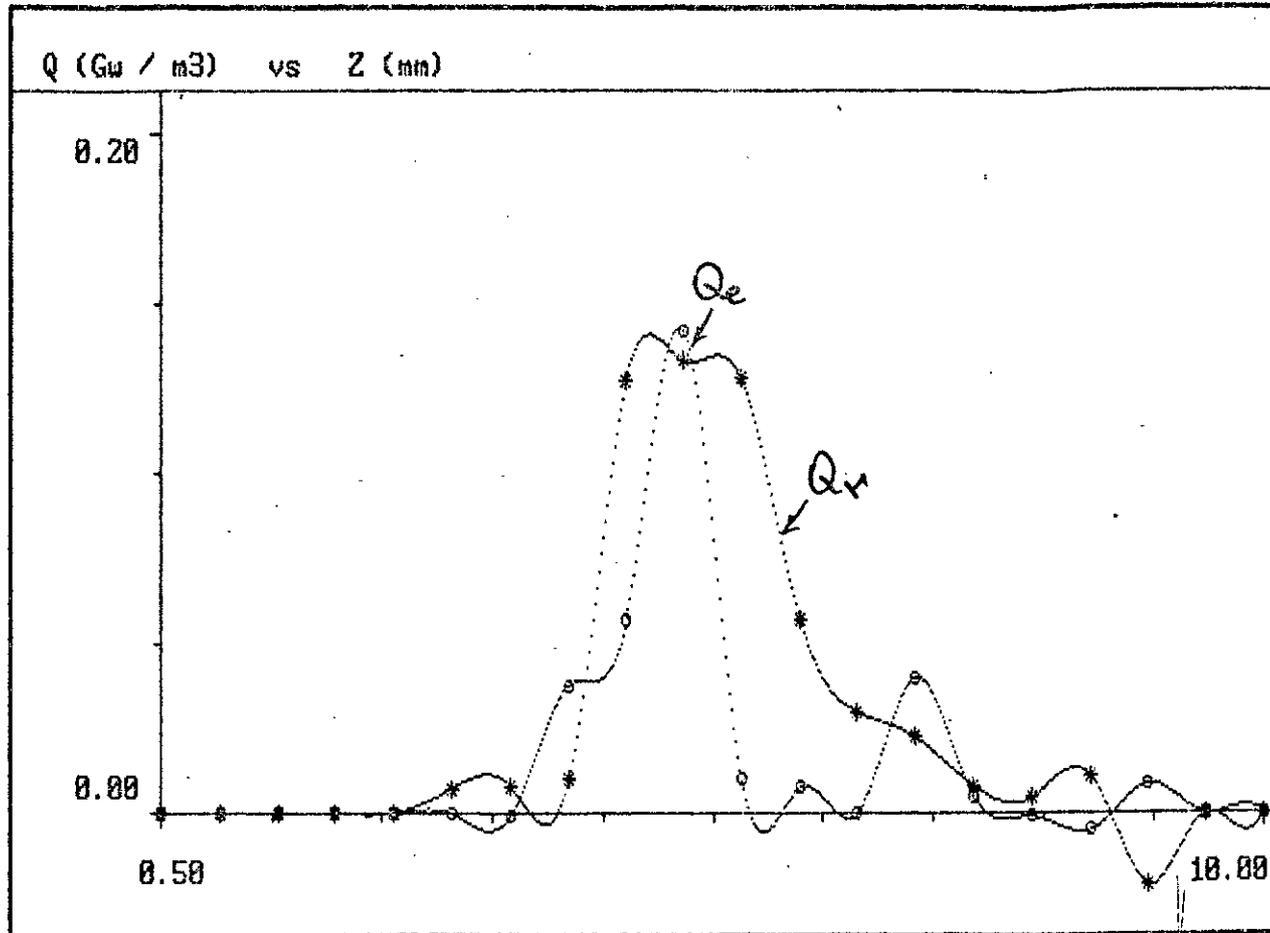


FIG.33

RICHESSSE = 0.8

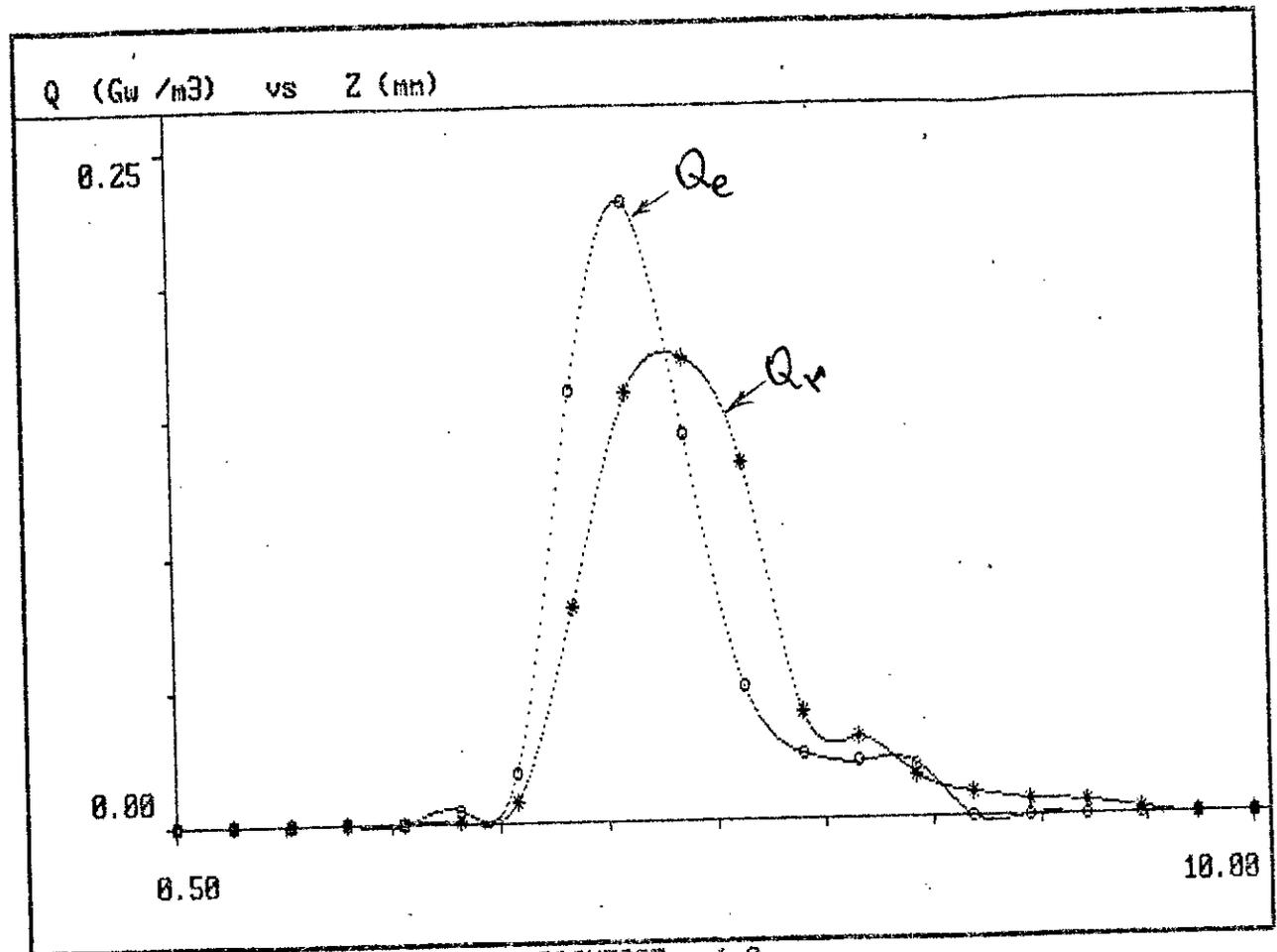


FIG.34

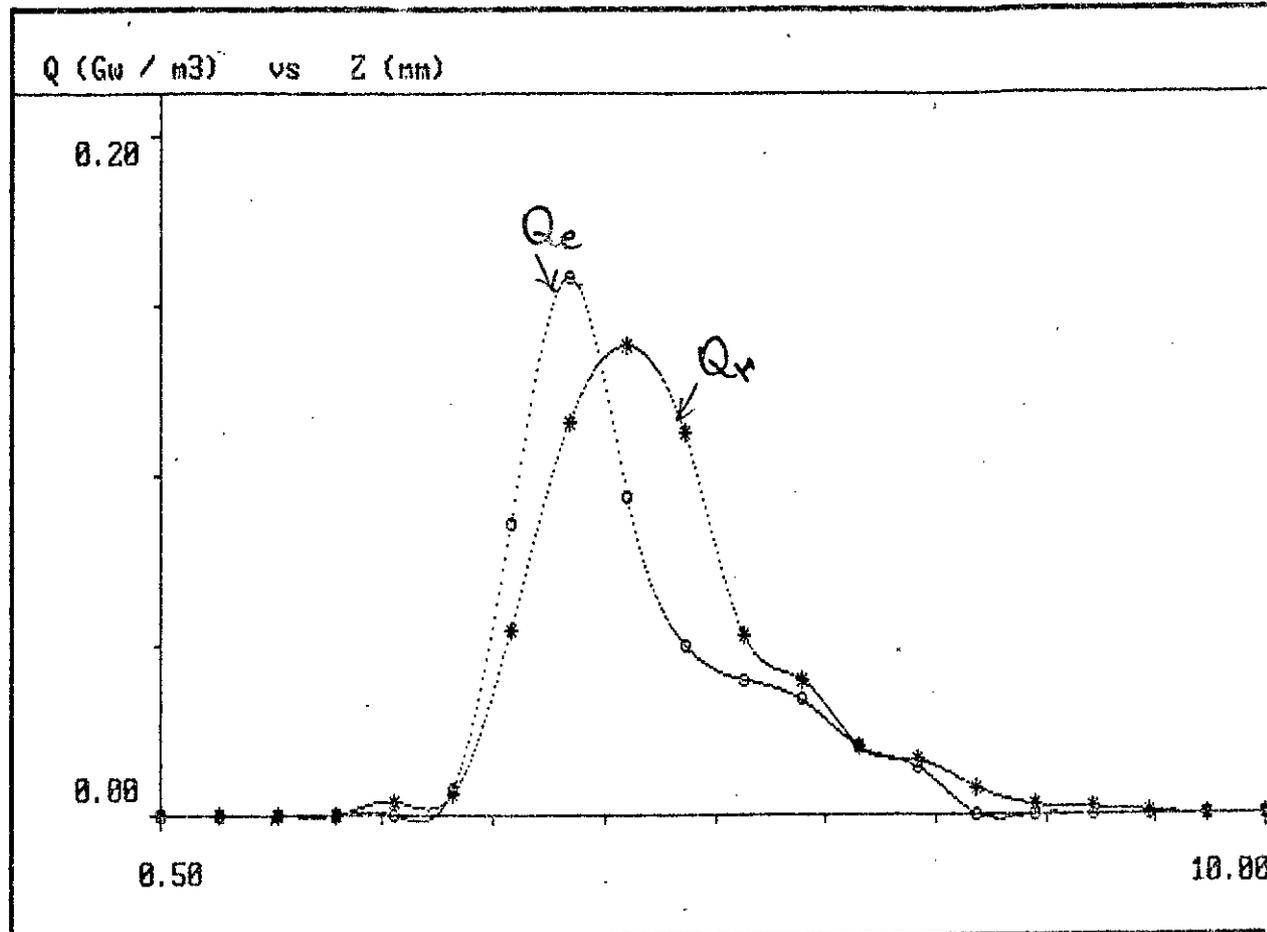


FIG.35

RICHELSE = 1.24

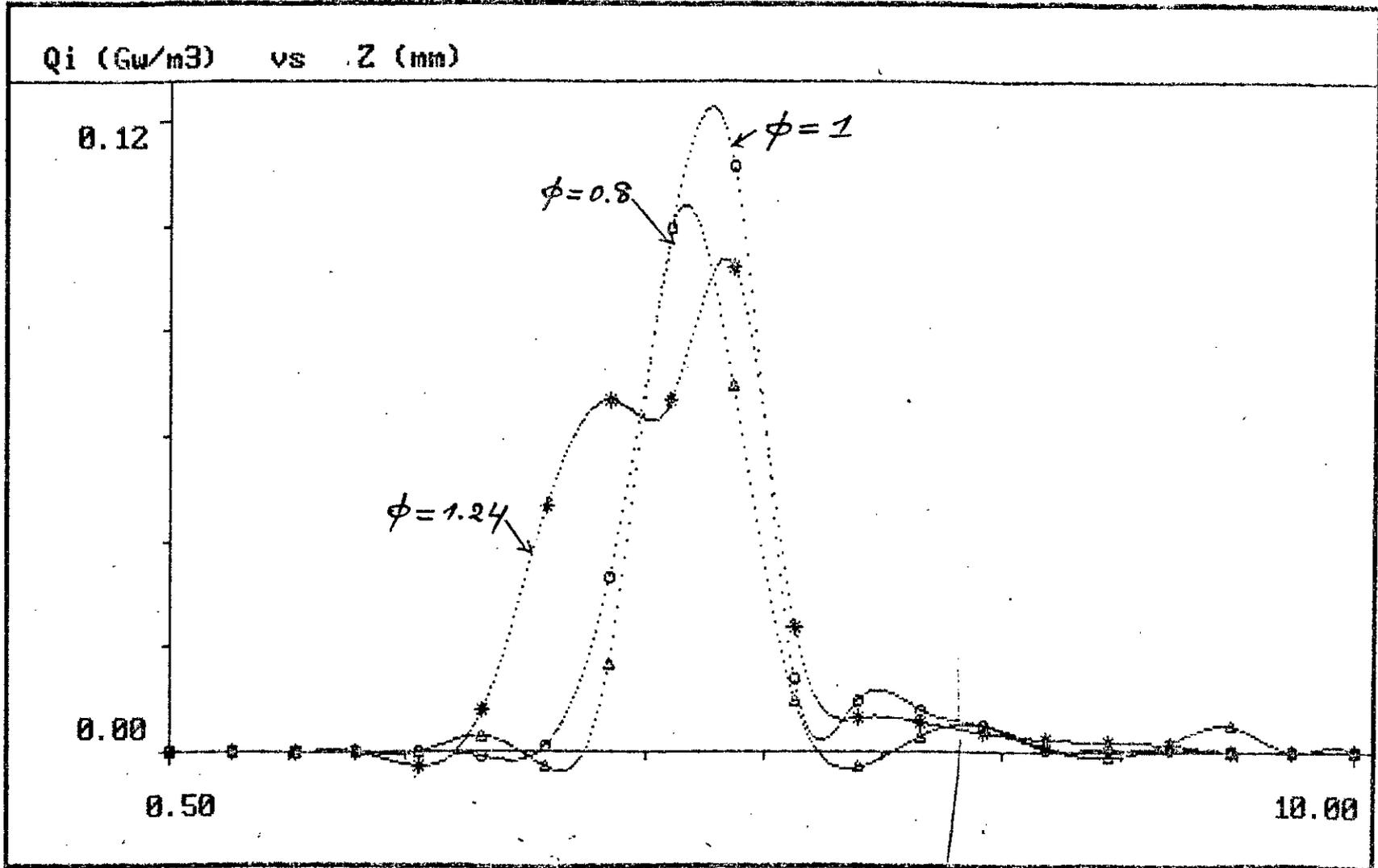


FIG.36

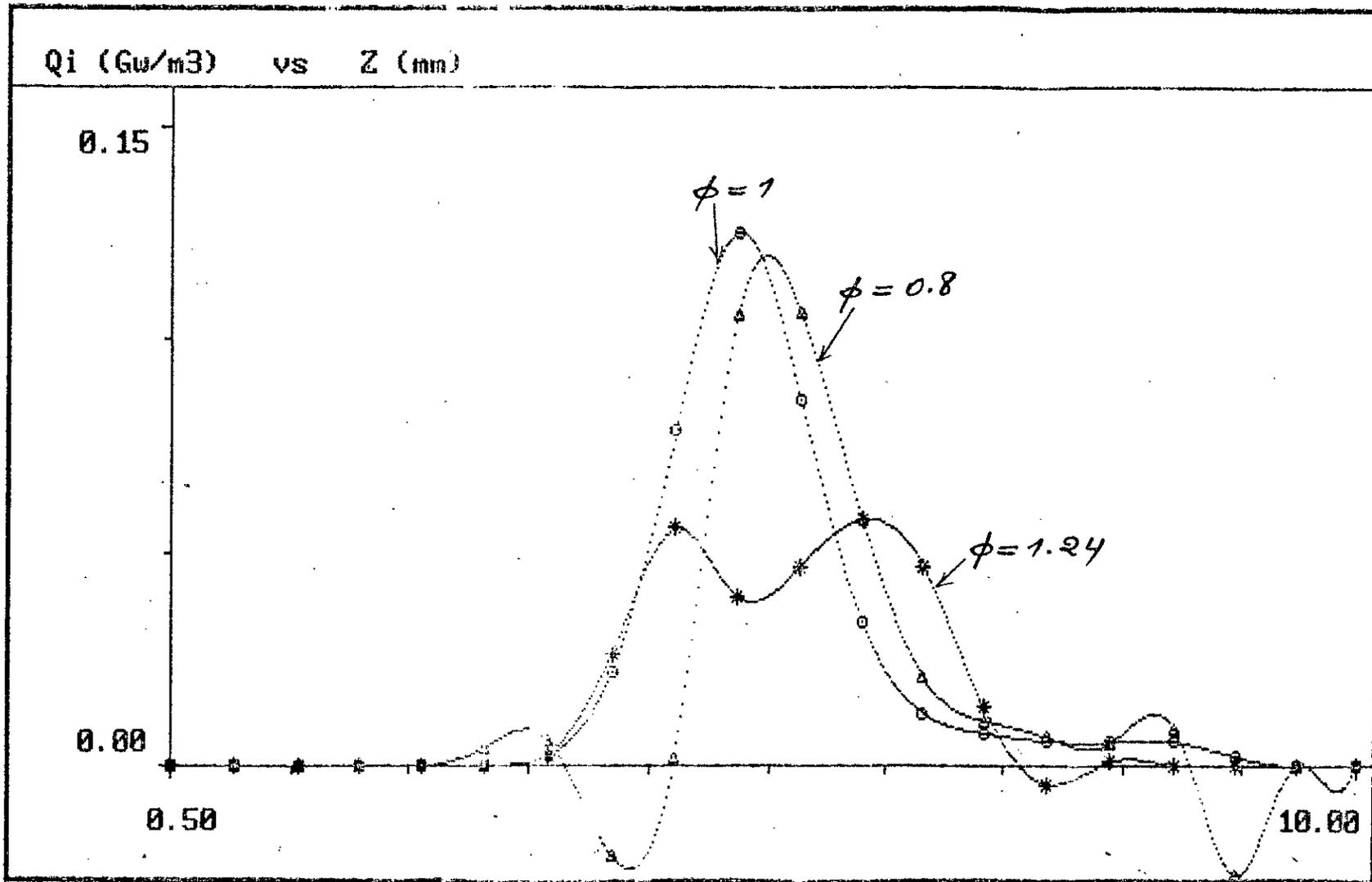


FIG.37

CO₂

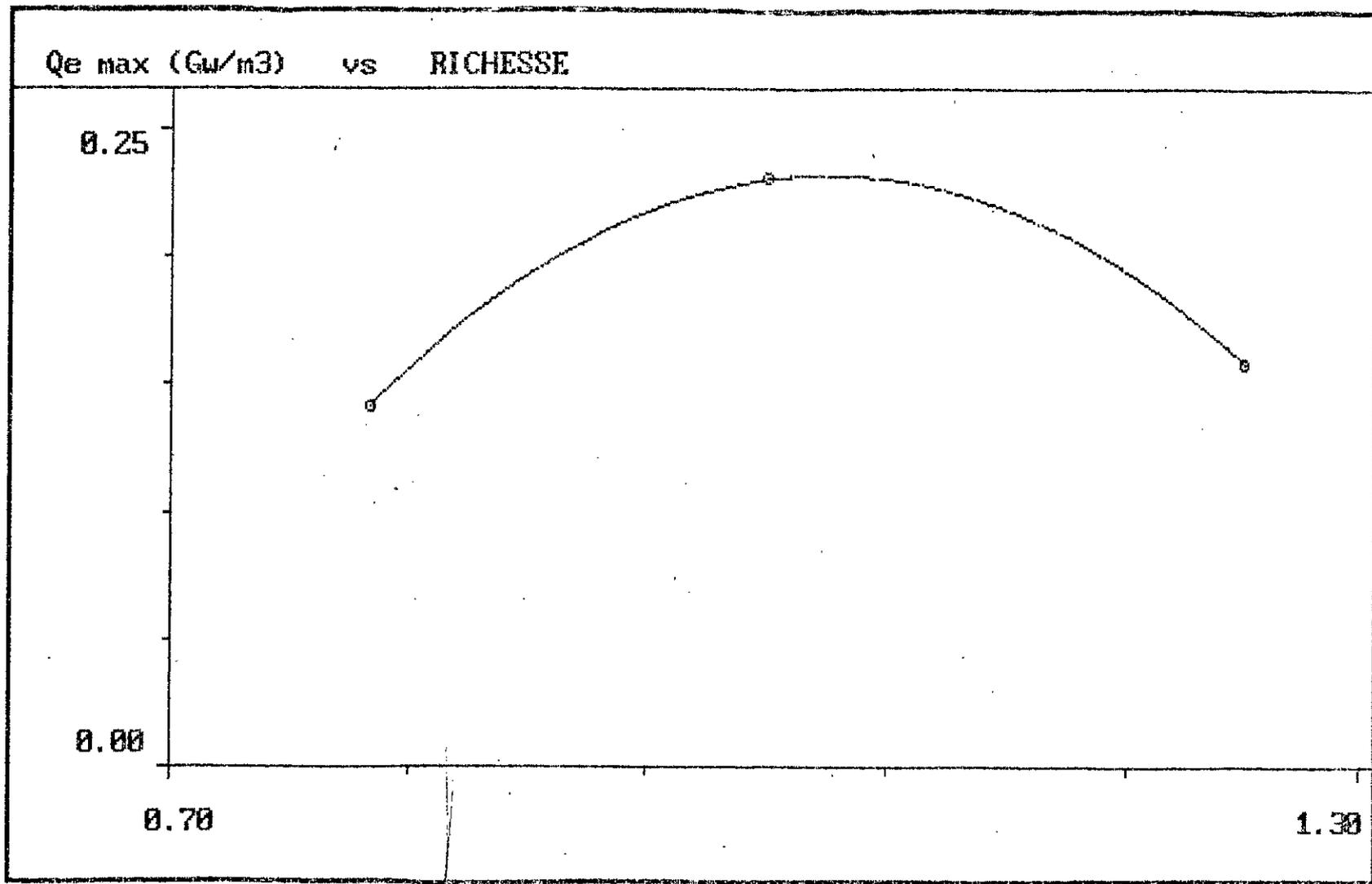
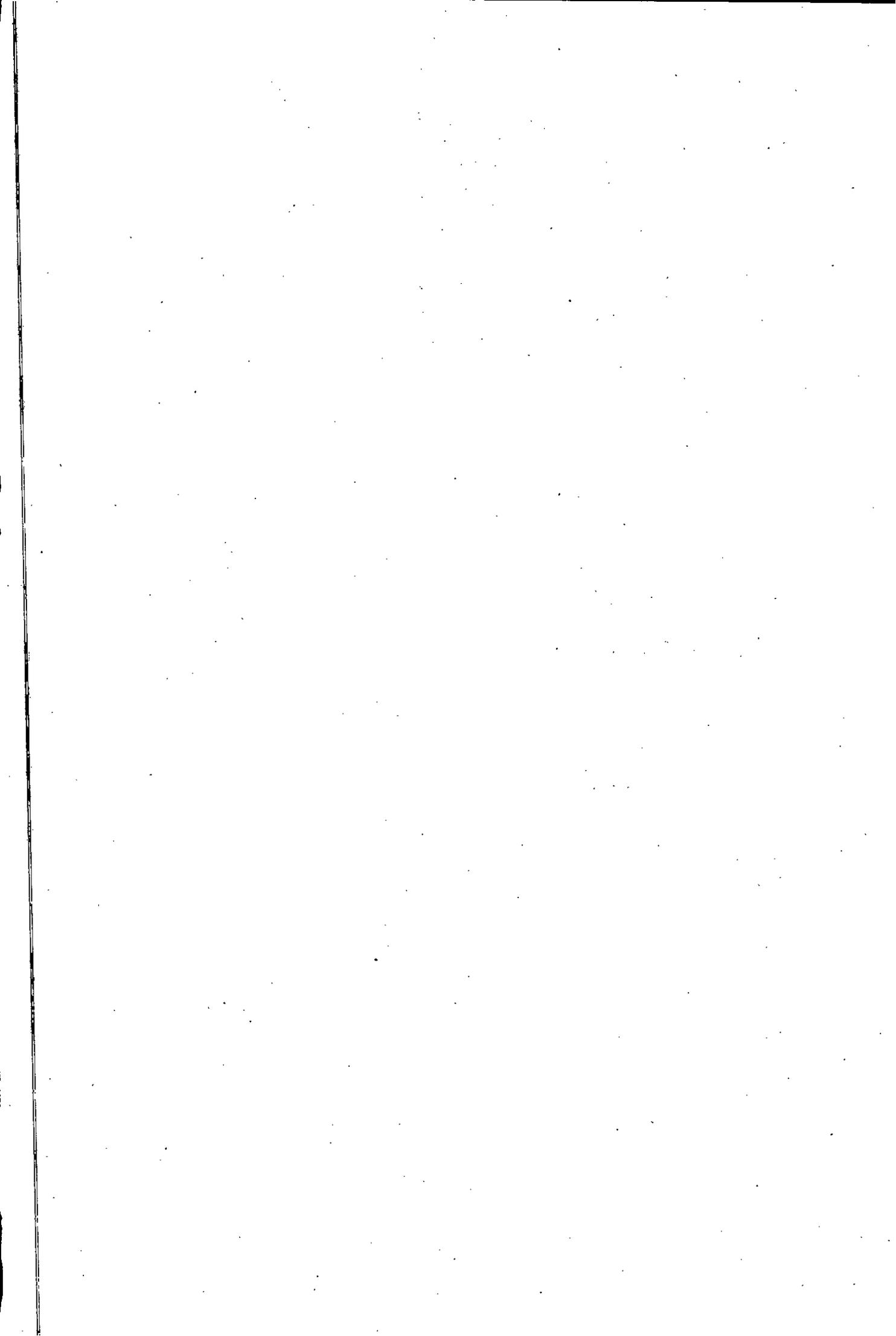


FIG.38

INFLUENCE DE LA RICHESSE SUR Qe max



Z (mm)	TEMPERATURE MESUREE (K)	CORRECTION (K)	TEMPERATURE REELLE (K)
0.50	320.00	0.26	320.26
1.00	320.00	0.26	320.26
1.50	320.00	0.25	320.26
2.00	320.00	0.26	320.26
2.50	320.00	0.26	320.26
3.00	320.00	0.26	320.26
3.50	330.00	0.27	330.27
4.00	1050.00	27.99	1077.99
4.50	1500.00	94.32	1594.32
5.00	1780.50	170.75	1951.25
5.50	1800.00	174.72	1974.72
6.00	1813.00	177.98	1990.98
6.50	1813.00	178.57	1991.57
7.00	1877.00	199.56	2076.56
7.50	1877.00	198.90	2075.90
8.00	1863.00	192.06	2055.06
8.50	1863.00	191.68	2054.68
9.00	1873.00	198.80	2071.80
9.50	1873.00	198.76	2071.76
10.00	1863.00	194.53	2057.53

Tableau : 1

Richesse = 0.8

CORRECTION DE LA TEMPERATURE

Z (mm)	TEMPREATURE MESUREE (K)	CORRECTION (K)	TEMPERATURE REELLE (K)
0.5	320.00	0.24	320.24
1.0	320.00	0.24	320.24
1.5	320.00	0.24	320.24
2.0	320.00	0.24	320.24
2.5	320.00	0.24	320.24
3.0	320.00	0.24	320.24
3.5	503.00	1.48	504.48
4.0	707.00	5.26	712.26
4.5	1630.00	112.65	1742.65
5.0	1910.00	192.59	2102.59
5.5	1960.00	211.26	2171.26
6.0	1990.00	222.83	2212.83
6.5	1990.00	221.53	2211.53
7.0	2023.00	235.09	2258.09
7.5	2023.00	235.01	2258.01
8.0	2020.00	233.15	2253.15
8.5	2020.00	232.78	2252.78
9.0	2014.00	230.04	2244.04
9.5	2014.00	230.38	2244.38
10.0	2009.00	228.98	2237.98

Tableau: 2

RICHESSSE = 1.0
 PRESSION = 0.2 atm
 TEMPERATURE INITIALE = 320.0 K

CORRECTION DE LA TEMPERATURE

Z (mm)	TEMPERATURE MESUREE (K)	CORRECTION (K)	TEMPERATURE RELLE (K)
0.50	320.00	0.25	320.25
1.00	320.00	0.25	320.25
1.50	320.00	0.25	320.25
2.00	320.00	0.24	320.24
2.50	320.00	0.24	320.24
3.00	320.00	0.24	320.24
3.50	510.00	1.44	511.44
4.00	1321.00	54.83	1375.83
4.50	1660.00	117.67	1777.67
5.00	1818.50	150.26	1968.76
5.50	1905.00	173.55	2078.55
6.00	1947.00	182.44	2129.44
6.50	1947.00	176.90	2123.90
7.00	1963.00	181.13	2144.13
7.50	1963.00	181.91	2144.91
8.00	1962.00	182.72	2144.72
8.50	1962.00	182.82	2144.82
9.00	1962.00	183.08	2145.08
9.50	1962.00	183.08	2145.08
10.00	1961.00	182.65	2143.65

Tableau: 3

RICHESSSE = 1.24
 PRESSION = 0.2 atm
 TEMPERATURE INITIALE = 320.0 K

Z (mm)	NOMBRE DE REYNOLDS	NOMBRE DE NUSSELT	COEFF DE CONVECTION (KW/m ² .K)	EMMISSIVITE
0.5	1.0528	0.9109	0.127	0.055
1.0	1.0465	0.9093	0.127	0.055
1.5	1.0465	0.9093	0.127	0.055
2.0	1.0496	0.9101	0.127	0.055
2.5	1.0499	0.9102	0.127	0.055
3.0	1.0415	0.9081	0.128	0.055
3.5	1.0079	0.8997	0.143	0.056
4.0	0.3048	0.6707	0.321	0.130
4.5	0.2162	0.6266	0.516	0.170
5.0	0.2999	0.6685	0.642	0.192
5.5	0.2928	0.6652	0.660	0.194
6.0	0.2081	0.6723	0.670	0.195
6.5	0.2007	0.6735	0.668	0.195
7.0	0.3258	0.6802	0.704	0.200
7.5	0.3264	0.6805	0.706	0.200
8.0	0.3334	0.6836	0.706	0.199
8.5	0.3350	0.6843	0.708	0.199
9.0	0.3326	0.6832	0.700	0.199
9.5	0.3329	0.6834	0.700	0.199
10.0	0.3348	0.6842	0.697	0.199

Z (mm)	RESISTIVITE DU FIL (ohm-cm)	VISCOSITE DYNAMIQUE DU MELANGE (Kg/m.sec)	DENSITE DU MELANGE (Kg/m ³)
0.5	0.19150E-04	0.1439E-04	0.227
1.0	0.19150E-04	0.1439E-04	0.227
1.5	0.19150E-04	0.1439E-04	0.227
2.0	0.19150E-04	0.1439E-04	0.227
2.5	0.19150E-04	0.1436E-04	0.227
3.0	0.19150E-04	0.1422E-04	0.225
3.5	0.19418E-04	0.1428E-04	0.209
4.0	0.38721E-04	0.3150E-04	0.064
4.5	0.50786E-04	0.4191E-04	0.044
5.0	0.58306E-04	0.4618E-04	0.038
5.5	0.58829E-04	0.4825E-04	0.038
6.0	0.59177E-04	0.4902E-04	0.038
6.5	0.59177E-04	0.4886E-04	0.038
7.0	0.60893E-04	0.5026E-04	0.037
7.5	0.60893E-04	0.5001E-04	0.037
8.0	0.60518E-04	0.4990E-04	0.038
8.5	0.60518E-04	0.4979E-04	0.038
9.0	0.60786E-04	0.4899E-04	0.037
9.5	0.60786E-04	0.4887E-04	0.037
10.0	0.60518E-04	0.4872E-04	0.037

Tableau 4

RICHESSSE = 0.8
 PRESSION = 0.2 atm
 TEMPERATURE INITIALE = 320.0 K

Z (mm)	NOMBRE DE REYNOLDS	NOMBRE DE NUSSELT	COEFFICIENT DE CONVECTION (KW/m ² .k)	EMMISSIVITE
0.5	1.2483	0.9571	0.135	0.055
1.0	1.2483	0.9571	0.135	0.055
1.5	1.2483	0.9571	0.135	0.055
2.0	1.2468	0.9568	0.135	0.055
2.5	1.2469	0.9568	0.135	0.055
3.0	1.2399	0.9552	0.135	0.055
3.5	0.8934	0.8699	0.185	0.076
4.0	0.6725	0.8065	0.262	0.097
4.5	0.3833	0.7047	0.641	0.180
5.0	0.3450	0.6886	0.792	0.202
5.5	0.3408	0.6868	0.815	0.206
6.0	0.3404	0.6866	0.830	0.208
6.5	0.3392	0.6861	0.835	0.208
7.0	0.3392	0.6861	0.850	0.210
7.5	0.3397	0.6863	0.850	0.210
8.0	0.3374	0.6853	0.851	0.210
8.5	0.3374	0.6853	0.853	0.210
9.0	0.3391	0.6861	0.851	0.210
9.5	0.3393	0.6862	0.849	0.210
10.0	0.3357	0.6846	0.845	0.209

Z (mm)	RESISTIVITE DU FIL (ohm-cm)	VISCOSITE DYNAMIQUE DU MELANGE (Kg/m.s)	DENSITE DU MELANGE (Kg/m ³)
0.5	0.19150E-04	0.1448E-04	0.228
1.0	0.19150E-04	0.1448E-04	0.228
1.5	0.19150E-04	0.1448E-04	0.228
2.0	0.19150E-04	0.1448E-04	0.228
2.5	0.19150E-04	0.1446E-04	0.227
3.0	0.19150E-04	0.1447E-04	0.227
3.5	0.24056E-04	0.2018E-04	0.143
4.0	0.29525E-04	0.2622E-04	0.100
4.5	0.54271E-04	0.4701E-04	0.042
5.0	0.61778E-04	0.5199E-04	0.035
5.5	0.63118E-04	0.5181E-04	0.034
6.0	0.63923E-04	0.5224E-04	0.033
6.5	0.63923E-04	0.5245E-04	0.033
7.0	0.64807E-04	0.5311E-04	0.033
7.5	0.64807E-04	0.5302E-04	0.033
8.0	0.64727E-04	0.5317E-04	0.033
8.5	0.64727E-04	0.5329E-04	0.033
9.0	0.64566E-04	0.5311E-04	0.033
9.5	0.64566E-04	0.5305E-04	0.033
10.0	0.64432E-04	0.5295E-04	0.033

Tableau : 5

Richesse = 1.0
 Pression = 0.2 atm
 Température initiale = 320.0 K

Z (mm)	NOMBRE DE REYNOLDS	NOMBRE DE NUSSELT	COEFFICIENT DE CONVECTION (KW/m ² .K)	EMMISSIVITE
0.5	1.1316	0.9300	0.133	0.055
1.0	1.1300	0.9296	0.133	0.055
1.5	1.1300	0.9296	0.133	0.055
2.0	1.1304	0.9297	0.136	0.055
2.5	1.1297	0.9296	0.138	0.055
3.0	1.0968	0.9217	0.139	0.055
3.5	0.7455	0.8285	0.203	0.077
4.0	0.3807	0.7036	0.487	0.154
4.5	0.3080	0.6722	0.669	0.183
5.0	0.2914	0.6645	0.805	0.195
5.5	0.2851	0.6616	0.868	0.202
6.0	0.2841	0.6611	0.915	0.205
6.5	0.2854	0.6617	0.944	0.205
7.0	0.2848	0.6614	0.958	0.206
7.5	0.2866	0.6622	0.954	0.206
8.0	0.2887	0.6632	0.947	0.206
8.5	0.2889	0.6633	0.947	0.206
9.0	0.2889	0.6633	0.945	0.206
9.5	0.2889	0.6633	0.945	0.206
10.0	0.2888	0.6633	0.945	0.206

Z (mm)	RESISTIVITE DU FIL (ohm-cm)	VISCOSITE DYNAMIQUE DU MELANGE (Kg/m.sec)	DENSITE DU MELANGE (Kg/m ³)
0.5	0.19150E-04	0.1459E-04	0.232
1.0	0.19150E-04	0.1459E-04	0.232
1.5	0.19150E-04	0.1459E-04	0.232
2.0	0.19150E-04	0.1460E-04	0.233
2.5	0.19150E-04	0.1461E-04	0.233
3.0	0.19150E-04	0.1468E-04	0.231
3.5	0.24244E-04	0.2097E-04	0.141
4.0	0.45987E-04	0.4112E-04	0.051
4.5	0.55075E-04	0.4856E-04	0.039
5.0	0.59325E-04	0.5204E-04	0.036
5.5	0.61644E-04	0.5335E-04	0.034
6.0	0.62770E-04	0.5407E-04	0.034
6.5	0.62770E-04	0.5421E-04	0.034
7.0	0.63199E-04	0.5439E-04	0.034
7.5	0.63199E-04	0.5414E-04	0.034
8.0	0.63172E-04	0.5387E-04	0.034
8.5	0.63172E-04	0.5381E-04	0.034
9.0	0.63172E-04	0.5383E-04	0.034
9.5	0.63172E-04	0.5383E-04	0.034
10.0	0.63145E-04	0.5385E-04	0.034

Tableau : 6

RICHESSE = 1.24
 PRESSION = 0.2 atm
 TEMPERATURE INITIALE = 320.0 K

ESPESES	MASSE MOLECULAIRE (Kg/kmole)	ENTHALPIE STANDARD (Kcal/mole)	DIAMETRE (A°)	PARAMETRE POTENTIEL (K)
i-C8H18	114.230	-53.460	7.451	408.19
CH4	16.043	-17.900	3.758	148.60
CO2	44.011	-94.05	3.690	91.70
CO	28.011	-26.420	3.941	195.20
O2	32.000	0.000	3.941	106.70
H2	2.016	0.000	2.827	59.70
H2O	18.015	-5.780	2.641	809.10
N2	28.000	0.000	3.798	71.40

Tableau : 7

	i-C8H18	CH4	CO2	CO	O2
A0	-5.004E+00	1.801E+00	5.275E+00	6.070E+00	5.126E+00
A1	2.070E+02	2.189E+01	1.561E+01	2.155E+00	6.942E+00
A2	-1.436E+02	-6.591E+00	-1.187E+01	1.937E-01	-5.861E+00
A3	5.751E+01	-4.877E-01	4.942E+00	-7.290E-01	2.684E+00
A4	-1.297E+01	6.353E-01	-1.074E+00	2.733E-01	-6.100E-01
A5	1.237E+00	-9.147E-02	9.520E-02	-3.227E-02	5.467E-02
	H2	H2O	N2		
A0	7.136E+00	8.049E+00	6.455E+00		
A1	-1.444E+00	-1.620E+00	5.954E-01		
A2	2.395E+00	6.414E+00	1.980E+00		
A3	-1.066E+00	-3.895E+00	-1.672E+00		
A4	2.148E-01	9.993E-01	5.120E-01		
A5	-1.695E-02	-9.627E-02	-5.573E-02		

Tableau : 8

BIBLIOGRAPHIE

- [1] DAVISSON, C and WEEK, J.R " The relation between the total thermal emissive power of a metal and its electrical resistivity". 1924
- [2] HINZE, J.O "Turbulence" 1959, 76 (Mc Graw Hill, London)
- [3] DRAPER, M. "Mathematical modelling of jet-stirred reactor" PhD Thesis University of Leeds. 1977
- [4] SVEHLA, R.A "Estimated viscosities and thermal conductivities of gases at high temperatures" Technical Report R-132 NASA. 1962
- [5] MASON, E.A and SAXENA, S.C "Approximate formula for the thermal conductivities of gases mixtures" Phys.Fluids .1958
- [6] BRADLEY, D and ENTWISTLE, A.G "Determination of the emissivity for total radiation, of small diameter platinum-10 per cent Rhodium wires in the temperature range 600-14500C " Brit. 1961
- [7] PERTUS, E "la combustion industrielle " ed Technip. 1983
- [8] ROGERS, G.F.C and MAYHEW, Y.R "Thermodynamics and transport properties of fluids " Oxford. 1980
- [9] HIRSCHFELDER, J.O, CURTISS, C.F, and BIRD, R.B " The molecular theory of gases and liquids" New York. 1954
- [10] BRADLEY, D, DOWSON, D, and COLE, B.N Project Report, University of Leeds
- [11] COOK, S.J, and SIMMONS, R.F "A flame structure study of lean propane-oxygen flames diluted with Argon " Combustion and Flame 46. 1982
- [12] FRISTOM, R.M and WESTENBERG, A.A "Flame zone studies" Comb.Flame, 1. 1957
- [13] WILKE, C.R "A viscosity equation for gas mixtures ". 1950
- [14] WISE, E.M and VINES, R.F "The platinum metals and their alloys " International Nickel Corporation N.Y .1941
- [15] REID, R.C, PRAUSNITZ, J.M, and SHERWOOD, T.K " The properties of gases and liquids "
- [16] LIEW, S.K, BRAY, K.N.C, and MOSS, J.B " A flamlet model of turbulent non premixed combustion " Comb.Sci.Techn ,GB. 1981~

- [17] Revue generale de thermique, "flammas et plasmas"
NO 310 Octobre 1987
- [18] Technique de l'ingenieur
- [19] YUUKI, A and MATSUI, Y
" A study of flat flames on porous plug burners : structure,
standoff distance, and oscillation " Comb.Flame, July 1987
- [20] SPALDING, D.B
" Predicting the laminar flame speed in gases with
temperature explicit reaction rates " Comb.Flame 1, 1957
- [21] BOREL, L
" Thermodynamique et energetique " presses polytech
romandes. 1984

