

République Algérienne Démocratiques et Populaire  
Ministère de l'Enseignements Supérieur  
et de la Recherche Scientifique  
Université DjillaliLiabes de Sidi Bel Abbas  
Faculté de Technologie  
Département de Génie Mécanique



الجمهورية الجزائرية  
الديمقراطية الشعبية  
وزارة التعليم العالي و البحث  
العلمي  
جامعة جيلالي ليابس -  
سعيدية  
جامعة جيلالي ليابس

## *Polycopié pédagogique*

# *Combustion*

### **Cours destiné aux étudiants :**

**Filière : Génie Mécanique**

**Option : Energétique**

**Parcours : Master**

**Semestre : S1**

**Unité d'enseignement : UEF 1.2.1**

### **Cours présenté par :**

Dr. MILOUA Hadj

Année universitaire 2021/2022

# Introduction

---

Le présent document est un polycopié de cours "**Combustion**" s'adresse aux étudiants de Master 1 énergétique filière Génie Mécanique, Département Génie Mécanique, Faculté de Technologie, UDL Université Djillali Liabès de Sidi Bel Abbés, Algérie. Le contenu est consacré aux notions fondamentales de la combustion et la thermochimie, suivi par les notions sur l'inflammation. Une description mathématique des différents types de flamme: pré-mélange et diffusion dans différents régime d'écoulement laminaire et turbulent.

Bonne lecture. MILOUA HADJ

**E-mail : miloua\_hadj@yahoo.fr**

# Partie I

## Rappels et notions fondamentales de la combustion et thermochimie

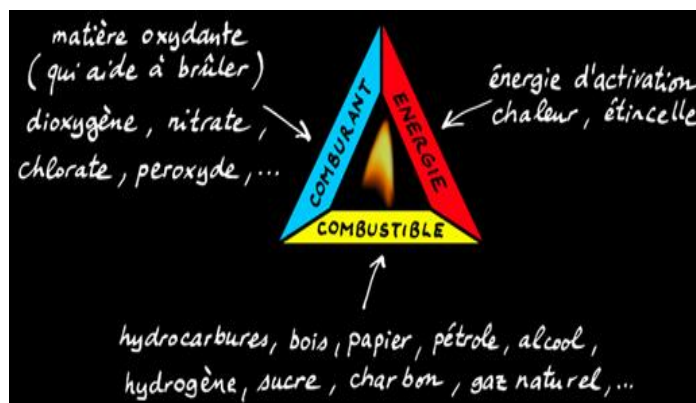
### Introduction

La réaction chimique est une transformation au cours de laquelle un certain nombre de constituants initiaux appelés réactifs donnent l'état final des produits. Des liaisons inter-atomiques sont rompues au niveau des réactifs pendant que de nouvelles apparaissent au sein des produits.

### Réactifs ↔ Produits

- Réactions exothermiques = dégagement de chaleur.
- Réactions endothermique = absorption de chaleur.

La quantité de chaleur échangée au cours de la réaction exothermique ne dépend que de l'état initial et de l'état final (fonction d'état). La réaction chimique de la combustion ne peut se produire que s'il on réunit au minimum trois éléments: un combustible, un carburant (dioxygène), et une énergie d'activation, chacun en quantité suffisante. C'est Pourquoi on parle du 'triangle du feu'.



**Figure.1:** Triangle du feu

○ **comburant**

Espèce chimique généralement constituée d'atomes fortement électronégatifs, ou dans laquelle ces atomes prédominent, et qui est susceptible de donner lieu à une combustion en réagissant avec un combustible.

**Tableau 1** tableau périodique des éléments.

Le tableau périodique des éléments est présenté ci-dessous. Une cellule d'exemple pour l'hydrogène (H) est détaillée :

- Numéro atomique : 1
- Symbole : H
- Nom : Hydrogen
- Poids atomique : 1.008

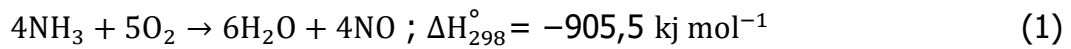
1 1A H Hydrogen 1.008																	2 18 VIII A He Helium 4.002602
3 Li Lithium 6.94	4 2 IIA Be Beryllium 9.0121831											5 13 IIIA B Boron 10.81	6 14 IVA C Carbon 12.011	7 15 VA N Nitrogen 14.007	8 16 VIA O Oxygen 15.999	9 17 VIIA F Fluorine 18.99840323	10 18 VIII A Ne Neon 20.1797
11 Na Sodium 22.98976928	12 Mg Magnesium 24.305											13 Al Aluminium 26.9815385	14 Si Silicon 28.0855	15 P Phosphorus 30.973761998	16 S Sulfur 32.06	17 Cl Chlorine 35.45	18 Ar Argon 39.948
19 K Potassium 39.0983	20 Ca Calcium 40.078	21 3 IIIB Sc Scandium 44.955908	22 4 IVB Ti Titanium 47.867	23 5 VB V Vanadium 50.9415	24 6 VIB Cr Chromium 51.9961	25 7 VIIB Mn Manganese 54.938044	26 8 VIIIB Fe Iron 55.845	27 9 VIIIB Co Cobalt 58.933194	28 10 VIIIB Ni Nickel 58.6934	29 11 IB Cu Copper 63.546	30 12 IIB Zn Zinc 65.38	31 Ga Gallium 69.723	32 Ge Germanium 72.6305	33 As Arsenic 74.921595	34 Se Selenium 78.971	35 Br Bromine 79.904	36 Kr Krypton 83.798
37 Rb Rubidium 85.4678	38 Sr Strontium 87.62	39 Y Yttrium 88.90584	40 Zr Zirconium 91.224	41 Nb Niobium 92.90637	42 Mo Molybdenum 95.94	43 Tc Technetium 98	44 Ru Ruthenium 101.07	45 Rh Rhodium 102.90550	46 Pd Palladium 106.42	47 Ag Silver 107.8682	48 Cd Cadmium 112.414	49 In Indium 114.818	50 Sn Tin 118.710	51 Sb Antimony 121.760	52 Te Tellurium 127.60	53 I Iodine 126.90447	54 Xe Xenon 131.293
55 Cs Caesium 132.90545196	56 Ba Barium 137.327	57 - 71 Lanthanoids	72 Hf Hafnium 178.49	73 Ta Tantalum 180.94788	74 W Tungsten 183.84	75 Re Rhenium 186.207	76 Os Osmium 190.23	77 Ir Iridium 192.222	78 Pt Platinum 195.084	79 Au Gold 196.966569	80 Hg Mercury 200.592	81 Tl Thallium 204.38	82 Pb Lead 207.2	83 Bi Bismuth 208.98040	84 Po Polonium [209]	85 At Astatine [210]	86 Rn Radon [222]
87 Fr Francium [223]	88 Ra Radium [226]	89 - 103 Actinoids	104 Rf Rutherfordium [261]	105 Db Dubnium [268]	106 Sg Seaborgium [266]	107 Bh Bohrium [270]	108 Hs Hassium [285]	109 Mt Meitnerium [276]	110 Ds Darmstadtium [281]	111 Rg Roentgenium [282]	112 Cn Copernicium [285]	113 Nh Nihonium [286]	114 Fl Flerovium [289]	115 Mc Moscovium [289]	116 Lv Livermorium [293]	117 Ts Tennessine [294]	118 Og Oganesson [294]
57 La Lanthanum 138.9047	58 Ce Cerium 140.12	59 Pr Praseodymium 140.90766	60 Nd Neodymium 144.242	61 Pm Promethium [145]	62 Sm Samarium 150.36	63 Eu Europium 151.964	64 Gd Gadolinium 157.25	65 Tb Terbium 158.92535	66 Dy Dysprosium 162.500	67 Ho Holmium 164.93033	68 Er Erbium 167.259	69 Tm Thulium 168.93402	70 Yb Ytterbium 173.045	71 Lu Lutetium 174.967			
89 Ac Actinium [227]	90 Th Thorium 232.0377	91 Pa Protactinium 231.03688	92 U Uranium 238.02891	93 Np Neptunium [237]	94 Pu Plutonium [244]	95 Am Americium [243]	96 Cm Curium [247]	97 Bk Berkelium [247]	98 Cf Californium [251]	99 Es Einsteinium [252]	100 Fm Fermium [257]	101 Md Mendelevium [258]	102 No Nobelium [259]	103 Lr Lawrencium [260]			

Les atomes les plus électronégatifs sont les atomes légers des familles situées à droite du tableau périodique (O, F, Cl, Br...) comme l'oxygène pur, l'oxygène dilué (air) ou une espèce chimique riche en oxygène (ozone, peroxyde d'hydrogène  $H_2O_2$ ), l'acide nitrique  $HNO_3$ . Liquide incolore lorsqu'il est pur, appelé acide azotique, ou encore eau-forte.

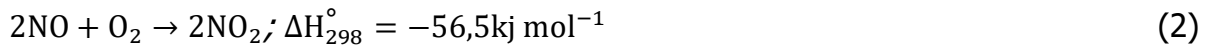
L'acide nitrique est un agent oxydant puissant. Ses réactions avec des composés comme les cyanures  $-|C\equiv N|$ , les carbures  $C_nA_m$ , tous les carburants ( $A=H$ ), et les poudres métalliques peuvent être explosives.

La production commerciale de l'acide nitrique est faite par le procédé Ostwald et se réalise en trois étapes à partir de l'ammoniac : En premier lieu, l'ammoniac  $NH_3$  est oxydé par l'oxygène  $O_2$  en présence d'un catalyseur comme

le platine rhodié à 10 % pour former du monoxyde d'azote NO, étape fortement exothermique qui produit également de la vapeur d'eau H<sub>2</sub>O:



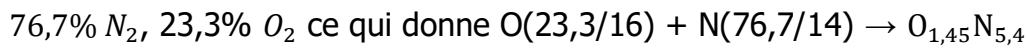
Puis le monoxyde d'azote est oxydé par l'oxygène O<sub>2</sub> et produit du dioxyde d'azote NO<sub>2</sub> :



Enfin, le dioxyde d'azote est dissous dans l'eau selon la réaction :



La Formule fictive de l'air peut être déduite de la manière suivante :



Soit : M<sub>O<sub>2</sub></sub> = 32 , M<sub>N<sub>2</sub></sub> = 28

Sachant que pour 23,3 kg d'oxygène contenue dans 100 kg d'air on a 76,7 kg ce qui donne 32 kg d' dans l'air, nous donne ((76,7 x 32)/23,3) = 105,34 kg de N<sub>2</sub> Ou en nombre de mole 105,34/28 = 3,76 k moles

Donc (O<sub>2</sub> + 3,76 N<sub>2</sub>) ce qui correspond à une masse molaire de 105,34 + 32 = 137,4 kg d'air.

**Tableau.2** composition de l'air standard.

<b>Composition de l'air standard</b>			
Composant	Fraction molaire(%)	Masse molaire (g/mol)	Fraction massique(%)
N <sub>2</sub>	78,1	28	75,6

$Ar + CO_2 + \dots$	0,9	40	1,2
$O_2$	21	32	23,2
Azote atmosphérique	79	28,15	76,8

- **Energie d'activation**

Énergie nécessaire pour initier la réaction de combustion. Elle peut être :

- a. Electrique (statique ou dynamique)
- b. Thermique (feu nu, rayonnement etc.)
- c. Chimique (action de l'oxygène sur certains éléments)
- d. Biologique (fermentation)
- e. Mécanique (frottements)

- **Combustible**

Selon l'état on distingue 3 types de combustible :

- ✓ **gaz** : mélange d'hydrocarbures gazeux avec éventuellement de l'azote et/ou du dioxyde de carbone. Exemples : gaz naturels, butane et propane commerciaux, air propane, essence
- ✓ **liquide** : mélange d'hydrocarbures liquides : diesel, fioul domestique, fiouls lourds, contenant des atomes de C, S, H, O, N ; alcools .
- ✓ **solide** : charbons, bois, ...

**N.B** : Sauf gaz naturel, les hydrocarbures fluides obtenus par distillation de pétrole brut. L'essence c'est un liquide dans les conditions standard mais placé dans la catégorie des combustibles gazeux car sa volatilité est grande. Le délai de vaporisation est plus court que le temps caractéristique de la cinétique d'allumage.

## ***1.1 classification des carbures***

Un carbure est un composé chimique du carbone avec un deuxième élément chimique autre que l'oxygène. Ils présentent donc une formulation générale de type  $C_nA_m$  où n et m sont deux entiers naturels. Selon la composition on a :

### **1 Les hydrocarbures ( $C_nH_m$ ), dont :**

#### ***a. Les carbures aliphatiques***

Saturés (alcanes) : méthane, éthane, propane, butane. Formules de type  $(C_nH_{2n+2})$ .

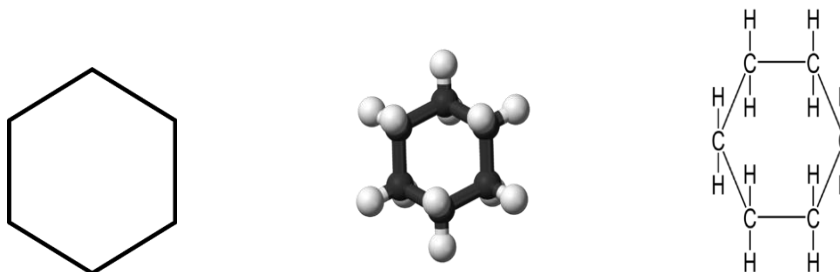
Insaturés : les radicaux, comme l'éthyle ( $C_2H_5$ ) qui donne l'alcool éthylique ( $C_2H_5OH$ ), les alcènes ( $C_nH_{2n}$ ) comme l'éthylène ( $C_2H_4$ ), les alcyne ( $C_2H_2$ ), les cyclo alcanes, comme le cyclohexane.

***a.1 Les alcanes*** sont des hydrocarbures saturés. Ils ne sont constitués que d'atomes de carbone (C) et d'hydrogène (H), liés entre eux par des liaisons simples, les atomes de carbone sont reliés à un nombre maximal d'atomes d'hydrogène d'où le nom de ' saturé'. Les alcanes non cycliques possèdent une formule brute de la forme  $(C_nH_{2n+2})$  où n est un entier naturel non nul. Alcanes linéaires ce sont les alcanes de formule  $CH_3 - (CH_2)_n - CH_3$  leur chaîne est dite aliphatique.

**Tableau 3** formule chimique de certains Alcanes.

Alcane	$C_nH_{2n+2}$
Méthane	$CH_4$
Ethane	$C_2H_6$
Propane	$C_3H_8$
Butane	$C_4H_{10}$
Gaz de Lacq	$C_{1,205}H_{4,044}$
Essence	$\sim C_8H_{18}$ (octane)
Kérosène	$C_{11}H_{24}$ ou $C_{12}H_{26}$
Gazole	$\sim C_{12}H_{26}$ (dodécane)

**a.2 Alcanes cycliques (cyclo alcane)** ce sont des alcanes sur lesquels les carbones sont liés par des liaisons simples de manière à former un cycle qui n'est pas plan. Ils ont pour formule générale  $C_nH_{2n}$ .



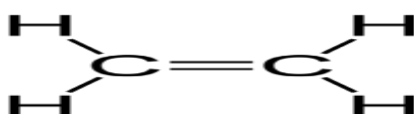
**Figure 2** Représentation du cyclohexane

Pour nommer un cyclo alcane, il suffit de rajouter le préfixe cyclo- au nom de l'alcane linéaire ayant le même n, sachant qu'il ne peut y avoir de cycle qu'avec n supérieur à deux.

**Tableau 4** Exemples des cyclo alcanes ( $C_nH_{2n}$ ).

Cyclopropane	Cyclobutane	Cyclopentane	Cyclohexane	Cycloheptane	cyclooctane	Cyclononane	Cyclodécane
$C_3H_6$	$C_4H_8$	$C_5H_{10}$	$C_6H_{12}$	$C_7H_{14}$	$C_8H_{16}$	$C_9H_{18}$	$C_{10}H_{20}$

**a.3 Les alcènes** sont des hydrocarbures insaturés, caractérisés par la présence d'au moins une double liaison covalente entre deux atomes de carbone. Ces liaisons sont toujours de type covalent normal parfait. Les alcènes non cycliques n'ayant qu'une double liaison possèdent une formule brute de la forme  $C_nH_{2n}$  où n est un entier naturel supérieur ou égal à 2. L'alcène le plus simple est l'éthylène (nom usuel de l'éthène).

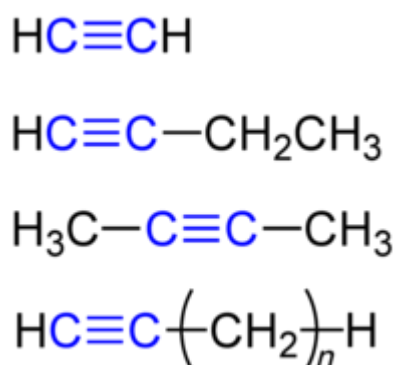


**Figure .3** formule développée de l'éthylène



Les alcènes ont des températures d'ébullition un peu plus basses que celles des alcanes correspondants car les forces de van der Waals sont plus faibles en effet, une double liaison prend plus d'espace qu'une simple liaison, donc les molécules s'empilent de façon moins compacte et les forces intermoléculaires sont moins importantes. Il en résulte qu'il faut fournir moins d'énergie pour les rompre : les températures d'ébullition sont plus basses. Ils brûlent avec une flamme claire. À température et pression ambiantes, les alcènes sont gazeux jusqu'au butène, puis liquides et enfin solides à partir de  $C_{16}$ . Leur solubilité, médiocre dans l'eau, est bonne dans l'alcool et l'éther.

**a.4 Alcyne** sont des hydrocarbures possédant une insaturation caractérisée par la présence d'une triple liaison carbone-carbone. Les deux carbones sont hybridés  $sp$ . La triple liaison est la combinaison de deux liaisons  $\pi$  et d'une liaison  $\sigma$ . La densité électronique de la molécule est répartie de façon cylindrique le long de la liaison C-C.

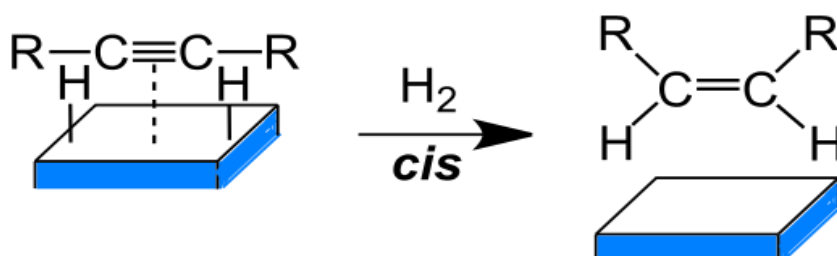


**Figure 4** Représentation de l'Alcyne.

On dit que l'on a affaire à un alcyne vrai ou à un alcyne terminal si R ou R' est un hydrogène. Les alcynes, ou hydrocarbures acétyléniques, ont pour formule générale  $C_nH_{2n-2}$ , et sont caractérisés par la présence dans leur molécule d'une triple liaison et d'une coexistence possible de doubles liaisons. Les alcynes présentent des bandes d'absorption caractéristiques dans leurs spectres infrarouges (bande d'absorption à 2100 – 2300 nm caractéristique de la triple liaison C-C). L'acétylène, le propyne et le butyne-1 sont des gaz à la température ordinaire les autres termes sont liquides puis solides, à mesure que leur poids moléculaire augmente, pour être

solides à partir de  $C_{15}$ . Ils sont présents, en faible quantité, dans les pétroles et les gaz naturels.

Chimiquement il convient de distinguer celles de la triple liaison, qui sont communes à tous les alcynes, et les propriétés de l'hydrogène contigu au triple liaison, qui sont particulières aux alcynes 'vrais'. La triple liaison présente le même type de réactivité que le double liaison, mais avec une intensité parfois différente. Comme elle, elle se prête à des réactions d'addition et de polymérisation et elle constitue un point de moindre résistance de la chaîne. Les alcynes sont insolubles dans l'eau mais solubles dans l'alcool, l'éther, les solvants organiques apolaires.



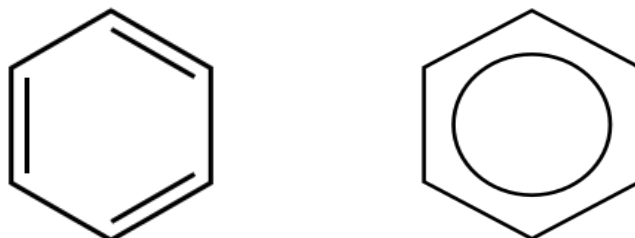
**Figure 5** hydrogénation

Outre des réactions d'hydratation (acétaldéhyde), les alcynes sont facilement hydrogénés en alcanes ou en alcènes. Le choix du catalyseur permet de différencier les isomères cis ou trans à produire. C'est ainsi que l'on peut obtenir du propane à partir du propyne par une réaction d'hydrogénation avec comme catalyseur le platine ou le nickel.

### ***b. Les carbures aromatiques***

Un hydrocarbure aromatique ou arène est un hydrocarbure dont la structure moléculaire comprend un cycle possédant une alternance formelle de liaison simple et double, et respectant la règle de **Hückel** sur l'aromaticité. Le terme 'd'aromatique' fut donné à ces molécules avant la découverte du phénomène physique d'aromaticité, et est dû au fait que ces molécules ont une odeur en général douce.

La configuration aromatique de six atomes de carbone est nommée cycle benzénique, d'après le plus simple hydrocarbure aromatique possible, le benzène. Les hydrocarbures aromatiques peuvent être monocycliques ou polycycliques.



**Figure 6** Représentation du benzène, avec des liaisons doubles localisées et avec un cercle pour représenter les trois doubles liaisons délocalisées du cycle

### ***b.1 Le benzène $C_6H_6$***

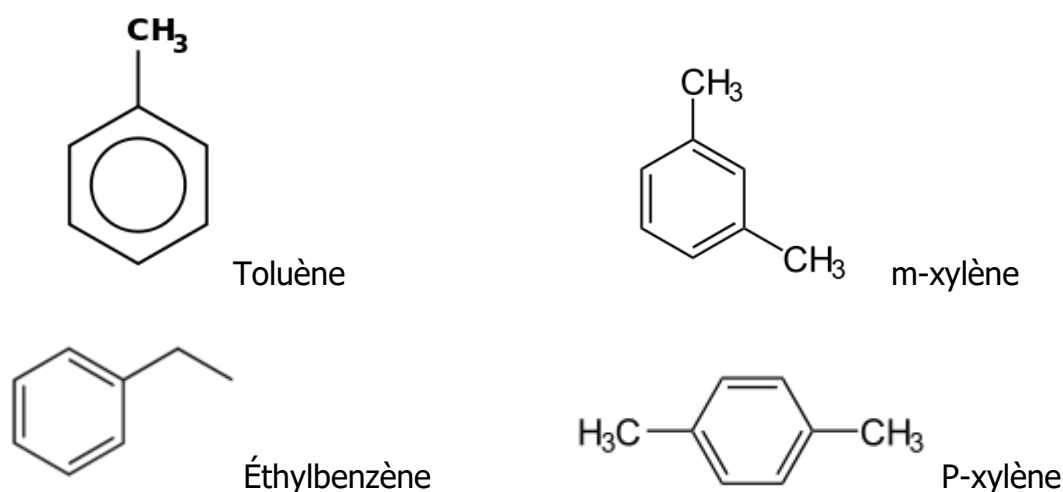
C'est le plus simple hydrocarbure aromatique, et fut le premier considéré en tant que tel, par la nature de ses liaisons décryptée pour la première fois par **Friedrich Kekulé von Stradonitz** au cours du  $XIX^e$  siècle. Par nature, chaque atome de carbone du cycle hexagonal possède 4 électrons de valence qu'il partage avec le système. L'un d'eux est occupé par une liaison covalente avec l'électron de valence d'un atome d'hydrogène et deux autres pour la liaison covalente avec chacun des atomes de carbone voisins. Reste un électron que l'atome de carbone peut partager avec l'un des deux atomes de carbone voisins, pour former une seconde liaison (liaison  $\pi$ ), ce qui, formellement, forme un cycle hexagonal avec une alternance de liaisons doubles et simples. Les composés comportant un cycle benzénique partagent un certain nombre de propriétés, notamment :

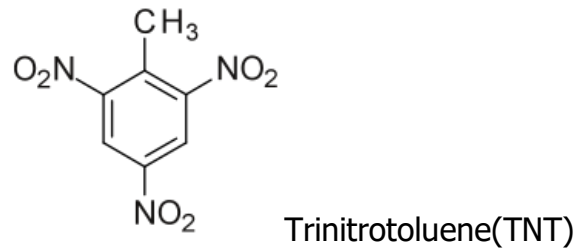
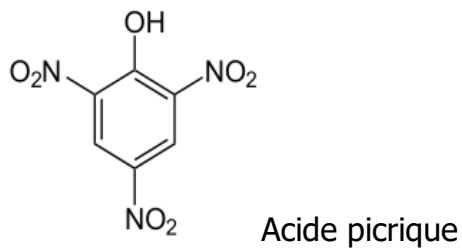
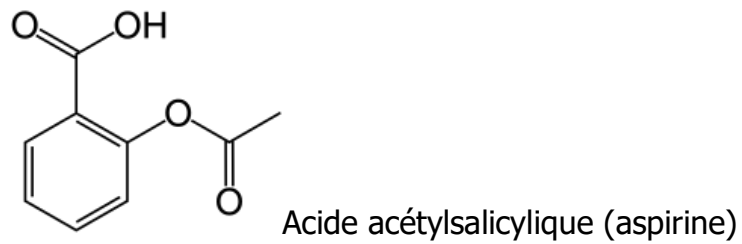
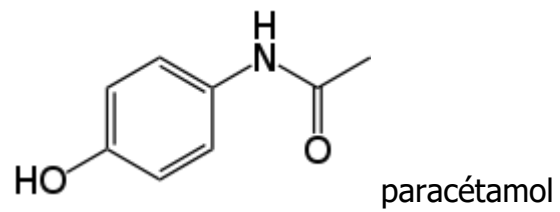
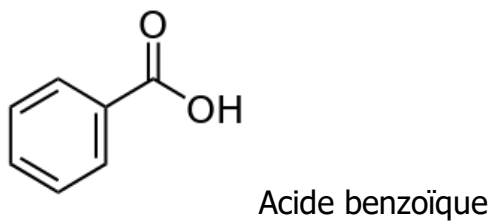
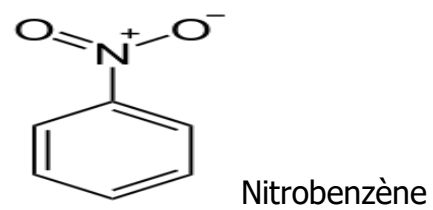
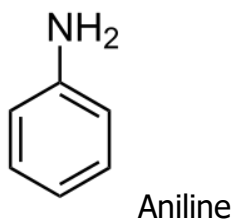
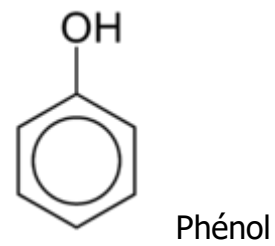
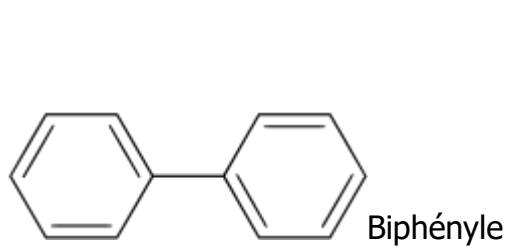
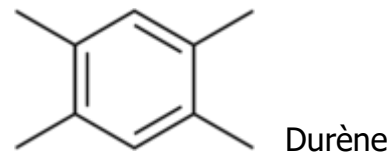
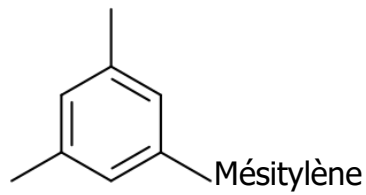
- Sont en général aromatiques (à quelques exceptions) ;
- Leur ratio carbone-hydrogène est élevé ; de ce fait, ils brûlent avec une flamme jaune dégageant beaucoup de fumée ;
- La forte concentration en charge négative sur le cycle le rend nucléophile, et favorise les réactions de type substitution électrophile aromatique.

Le cycle benzénique a aussi la propriété de stabiliser les charges. Par exemple, dans le cas du phénol ( $C_6H_5 - OH$ ), lorsque le groupe hydroxyle (OH) est déprotoné, la

charge négative sur l'atome d'oxygène est partiellement délocalisée sur le cycle benzénique, par mésomérie, ce qui stabilise la forme anionique, et rend de fait le proton du phénol bien moins basique ( $pK_a = 9.95$ ) que celui d'un alcool linéaire ( $pK_a$  entre 18 et 20). Cette délocalisation de la charge favorise les réactions sur le cycle, tels que les substitutions nucléophiles aromatiques et les substitutions électrophiles aromatiques.

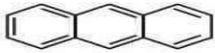


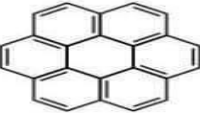




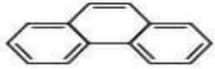
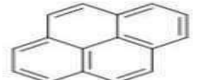
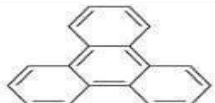
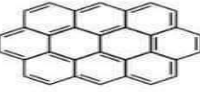
On parle de dérivé benzénique (ou de dérivé du benzène) pour les composés comportant un noyau central de benzène substitué par un à six groupes. Par exemple, le phénol et le toluène sont des dérivés benzéniques monosubstitués, le premier possédant un groupe hydroxyle, le second un groupe méthyle attaché au noyau benzénique. Lorsque le noyau benzénique possède plus d'un substituant leur répartition spatiale est la cible d'une nomenclature spéciale, et on répartit les composés dans les différents groupes, ortho, méta et para en fonction de la position respective de chaque groupe. Par exemple, il existe trois isomères du crésol, en fonction de la disposition des groupes hydroxyle et méthyle sur le cycle ; si les deux groupes sont voisins, il s'agit de l'isomère ortho (1,2-méthylphénol), s'ils sont séparés par un atome de carbone non substitué, il s'agit de l'isomère méta (1,3-méthylphénol) et s'ils sont opposés sur le cycle, il s'agit de l'isomère para (1,4-méthylphénol). De même, le xylénol possède deux groupes méthyle et un groupe hydroxyle, ce qui lui donne six isomères.





**Figure 7** Représentation de dérivés benzéniques.

**b.2 Hydrocarbure Aromatique Polycyclique (HAP)** une importante famille des hydrocarbures aromatiques. Ce sont des composés comportant plusieurs cycles benzéniques fusionnés.

Composé chimique	Structure	Composé chimique	Structure
Anthracène		Benzo[a]pyrène	
Chrysène		Coronène	
Corannulène		Tétracène	
Naphtalène		Pentacène	
Phénanthrène		Pyrène	
Triphénylène		Ovalène	

On compte parmi les HAP les plus courants le naphtalène, constitué de deux cycles benzéniques fusionnés, l'anthracène qui en compte trois, alignés, le tétra cène (quatre, alignés) et le penta cène (cinq, alignés). Le phénanthrène et le triphénylène sont des exemples d'HAP avec connexions non linéaires. Des HAP plus « exotiques » sont par exemple les Héli cènes et le corannulène.

Ces composés sont particulièrement présents dans les dérivés lourds du pétrole et du charbon (goudron de houille). Ils font partie des polluants organiques persistants les plus répandus, restant dans l'environnement marin sur les plages très longtemps après une marée noire. Ils sont toxiques et généralement cancérogènes.

## 2 Les carbures métalliques

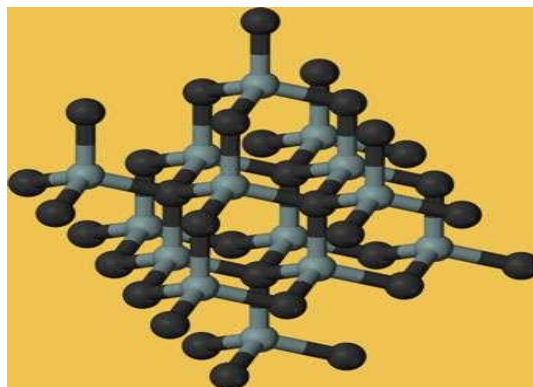
Les carbures métalliques sont des molécules qui font intervenir le carbone et un métal, le plus souvent, ou un non-métal comme le silicium. Le méthane pourrait être considéré comme du carbure d'hydrogène.

**2.1 Cémentite ou carbure de Fe:**  $Fe_3C$  c'est un composé cristallin de fer et de carbure de fer, la cémentite est magnétique jusqu'à 210 °C. C'est une combinaison très dure mais très fragile. Elle a une très bonne tenue à l'abrasion et à l'érosion. Elle est très présente dans d'autres constituants : perlite, tröstite, sorbite.

## 2.2 Les carbure de silicium SiC

Le carbure de silicium est aussi connu sous le nom de carborundum ou de moissanite. Formule chimique SiC, composé noir dont la température de fusion avoisine les 3000 K, et la densité est de 3,217. Sa dureté est de 30GPa son module d'Young de 450 GPa et sa résistance à la flexion de 400 MPa. Minéral presque exclusivement artificiel, il est utilisé :

- En bijouterie, sous le nom de moissanite, comme imitation du diamant ;
- Comme abrasif : carborundum (marque déposée de Dupont) ;
- En électronique, comme semi-conducteur à large bande ;
- Avec l'aluminium, pour former l'Al-SiC, un isolant aux propriétés thermiques intéressantes ;
- En mécanique ;
- Dans la construction de certains fours.



**Figure 8** Carbure de silicium

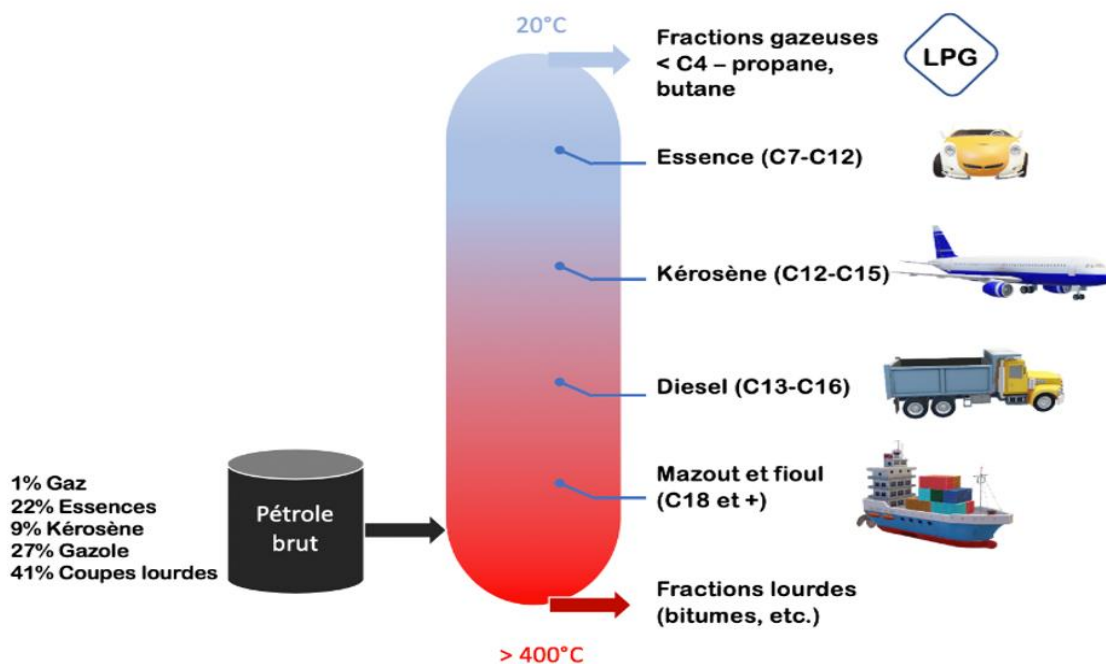
La moissanite a été synthétisée par le chimiste français Henri Moissan (1852-1907). Le carbure de silicium est formé par action à chaud du silicium sur le carbone ou par réduction de la silice par un excès de carbone. Les carbures sont des corps thermiquement stables, durs et chimiquement inertes.

La carborandite est une céramique composée de silicium et de carbone. C'est un minéral artificiel résultant du chauffage à plus de 1200 °C d'un mélange de carbone et de silice en présence d'un fondant contenant des éléments métalliques. La couleur du minéral peut varier selon son état d'oxydation. Déchet de fabrication du carborundum, il est apprécié des collectionneurs de minéraux. C'est une pierre très légère et résistante aux chocs.

### 2.3 Carbure de tungstène (WC)

Il est très utilisé dans les outils de coupe (55 %), les trépan (20). Le principe de fabrication des carbures cémentés est le suivant : la poudre de W est portée à 1.500 °C en présence de noir de fumée. WC ainsi obtenu est broyé en présence, éventuellement, de poudre de Co et /ou de TiC et TaC. La poudre est pressée puis frittée sous vide à 1.400 °C. On obtient ainsi un composite, formé d'une phase très dure (WC) dans une phase liante (Co). Exemple de composition : WC : 88 %, Co : 12%

***Dans le notre étude comme étant des énergéticien nous basant sur Les hydrocarbures couramment utilisés :***



**Figure 9** Carburant, biocarburants couramment utilisés



## ➤ L'essence

L'essence est produite à partir du pétrole brut par raffinage, c'est un mélange d'hydrocarbures qui contient de quatre à sept atomes de carbone.

### ***Caractéristiques***

- Masse volumiques est entre 0,72 à 0,78 Kg/dm<sup>3</sup> à 15°C
- Très volatile (hydrocarbures légers)
- Température d'ébullition -30°C à 190°C

### ***Composition massique de l'essence***

Carbone (C) 84 % ; hydrogène (H) 16 %

Indice du carbone :  $84 / 12 = 7$  ; indice de l'hydrogène :  $16 / 1 = 16$

Formule chimique :  $C_7H_{16}$

## ➤ Le gazole

Le gazole est produit à partir du pétrole brut par raffinage c'est un mélange d'hydrocarbures qui contient de 12 à 22 atomes de carbone.

### ***Caractéristiques***

- Masse volumiques est entre 0,82 à 0,85 Kg/dm<sup>3</sup> à 15°C.
- Peu volatile (hydrocarbures lourds).
- Température d'ébullition -180°C à 360°C.

### ***Composition massique du gazole***

Carbone (C) 87 % ; hydrogène (H) 13 %

Indice du carbone :  $87 / 12 = 7,25$  ; indice de l'hydrogène :  $13 / 1 = 13$

Formule chimique :  $C_{7,25}H_{13}$

## ➤ **Le GPL**

Le gaz pétrole liquéfié (GPL) est produit à partir du pétrole brut ou par purification du gaz naturel, les deux principaux hydrocarbures qui composent le GPL sont (le Butane  $C_4H_{10}$  et le propane  $C_3H_8$  ), mais la réglementation actuelle impose un volume de propane compris entre 19 et 50%.

### ***Caractéristiques***

Etat gazeux à température ambiante (20°C) et pression atmosphérique.

La température d'ébullition (Butane 0°C, Propane -40°C).

Gaz incolore inodore plus lourd que l'air.

Additif colorant pour le déceler (Mercaptan).

Masse volumiques est entre 0,51 à 0,58 Kg/dm<sup>3</sup> à 15°C (liquide).

***N.B*** : Le Butane et le Propane se liquéfient dès qu'ils sont soumis à une faible pression (à 15°C, une pression de 1,5bar suffit pour liquéfier le Butane et une pression de 7,5 bar suffit pour liquéfier le Propane ce qui implique réservoir sous P : 4 à 15b suivant la température Le GPL se dilate très fortement sous l'emprise de la chaleur, les réservoirs de GPL ne doivent être remplis qu'à 85% de leur capacité.

### ***Composition du GPL***

Butane (  $C_4H_{10}$  ) 50 % ; propane (  $C_3H_8$  ) 50 %

Formule chimique approchée :  $C_{3,5}H_9$

## ➤ **Gaz naturel, le biogaz**

Carburant naturel à base de Méthane et de Co<sub>2</sub> qui offre de bonnes performances motrices mais qui pose des problèmes de sécurité (explosion en cas des fuites) et de stockage (600 bars).

Le Méthanol est carburant (Alcool) produit à partir du bois qui offre de bonnes performances moteur mais qui pose deux problèmes majeurs : l'alcool nécessite une chaleur assez important pour être vaporisée ce qui provoque un problème à froid, il fournit moins d'énergie que les trois autres carburants ce qui nous donne une consommation élevée.

L'Ethanol également un Carburant (Alcool) produit à partir de céréales qui offrent les mêmes avantages et inconvénients que le Méthanol.

### → Carburant avion

Carburants aéronautiques actuels turboréacteurs et turbopropulseurs qui équipent la majorité des avions ou des hélicoptères (civils ou militaires) utilisent du kérosène; un carburéacteur (jet fuel) utilisé en aviation pour les réacteurs qui a plusieurs usages différents (Alimentation des avions à réaction, emploi comme combustible de chauffage ou d'éclairage). Son usage en aviation est principalement dû à son fort pouvoir calorifique de 43,15 MJ/Kg pour le jet A1, qui autorise une plus grande autonomie à masse embarquée égale, ou, en d'autres termes, qui permet d'alléger la masse totale à emporter à autonomie constante. Le kérosène doit remplir des conditions particulières, notamment au niveau des propriétés physiques. Le carburant pour avion est ainsi un kérosène particulier ayant notamment un point de congélation très bas (-47°C pour le Jet A1), car à 11000m d'altitude, la température externe est proche de -56,5°C.

→ **Le kérosène** est un dérivé de la distillation du pétrole brut, issu d'une distillation entre 150 et 250°C, dite coupe kérosène. Selon l'origine du pétrole, la coupe kérosène ne donne pas le même résultat (Kirk 78) et des normes ont été définies pour standardiser le Kérosène, qui appartient à la classe nommée (pétroles lampants) et nécessite des précautions de manipulation et d'utilisation. Sa viscosité est plus importante que celles du fioul et de l'essence, mais il lubrifie mieux les pièces mécaniques. Il se compose d'alcane ayant des formules brutes de la forme  $C_nH_{2n+2}$ , allant de  $C_{10}H_{22}$  à  $C_{14}H_{30}$

### Propriétés Physiques

Le kérosène est un mélange d'hydrocarbures obtenu par raffinage du pétrole. Selon le niveau de raffinage il est classé en plusieurs catégories dont les plus connues sont :

-Le TR0 de densité moyenne 0,79 est le plus répandu.

-Le TR4 plus volatil que le TR0 mais de densité équivalente (de moins en moins utilisé car il pose des problèmes de tenue des pompes à carburant).

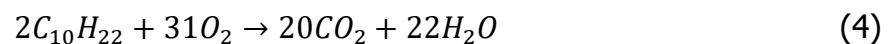
-Le TR5 qui a un haut point d'éclair et qui a une densité moyenne 0,81, il est employé sur les porte-avions.

-Le coefficient de dilatation volumique du kérosène est  $0,0007\text{k}^{-1}$

### Propriétés chimique

Le kérosène est un hydrocarbure saturé de premier type Alcane. Sa formule moyenne est  $C_{10}H_{22}$ . L'oxydation du kérosène par l'oxygène donne de la vapeur d'eau et du gaz carbonique en dégageant de la chaleur. Le pouvoir calorifique inférieur de cette combustion est de 10300 kcal/kg de carburant. Le pouvoir calorifique inférieur d'une réaction chimique exothermique est la quantité de chaleur cédée à l'extérieur quand on a ramené les produits de la réaction dans leur état vapeur sans récupérer leur chaleur latente de vaporisation.

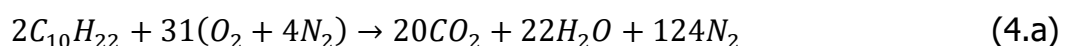
*L'équation chimique de la réaction :*



On définit la richesse en carburant du mélange carburant/Oxygène par le rapport de masse de carburant à la masse d'oxydant.

- Dans le cas de la réaction complète équilibrée, on dit de cette richesse qu'elle est stœchiométrique

-Dans le cas du turboréacteur, la combustion du kérosène se fait dans l'air et non dans l'oxygène pur ; l'équation de la réaction est alors la suivante :



La température de fin de combustion du mélange carburé (kérosène /air) est donnée par l'équation suivante :

$$C_p \times (T_2 - T_1) = \alpha \times Pc_{eff} \quad (5)$$

Avec:

$C_p$  : Chaleur massique à pression constante de l'air.

$T_2$  : Température de fin de combustion.

$T_1$  : Température d'entrée du mélange carburé.

$Pc_{eff}$  : Pouvoir calorifique efficace, inférieur à  $Pc_i$  (pouvoir calorifique inférieur), car la vapeur d'eau et le gaz carbonique, en se dissociant sous l'effet de la forte température, absorbent une partie des calories libérées par la combustion

$\alpha$ : Richesse injectée ou quantité de carburant suffisante et inférieure à la richesse stœchiométrique dans l'oxygène pur

Bio-kérosènes sont des alternatives au kérosène, produits à partir de la biomasse ou issu de la fermentation du sucre de canne.

## → Propergol

Un propergol est un produit de propulsion, constitué d'un mélange de comburant et de combustible, les ergols. La réaction chimique, entre cet oxydant et ce réducteur, fournira l'énergie au moteur-fusée. Les constituants peuvent se présenter à l'état de gaz, de liquide, de solide ou de plasma.

**Monergol et catergol** un monergol est un ergol de formation souvent endothermique, qui a la propriété de se suffire à lui-même pour assurer la réaction chimique, comme l'hydrazine. Lorsque la présence d'un catalyseur est nécessaire, il porte alors le nom de catergol.

**Diergol ou biergol** un propergol est dit diergol, ou biergol, lorsqu'il est constitué de deux ergols stockés séparément. C'est le cas de la plupart des propergols liquides.

Selon l'état en peut classer les propergols comme suit :

- **Propergol solide**, ou poudre, est un produit métastable: il est à l'état solide stable à température ordinaire, et instable à température élevée. Il peut être soit homogène comme la nitrocellulose, soit hétérogène avec un combustible finement disséminé dans la masse du comburant. Homogène à une combustion à

impulsion spécifique faible. Pour améliorer les performances des propergols solides, une technique consiste à incorporer une faible quantité de produit explosif. Les propergols solides offrent l'avantage d'être stables et facilement entreposables, mais possèdent l'inconvénient majeur de ne pas pouvoir en arrêter la combustion, une fois celle-ci commencée. Pour pallier cet inconvénient, l'explosif solide destiné à la propulsion est extrudé encore pâteux en cordons, puis tronçonné en fines plaquettes ou fins granules avant leur solidification par évaporation des solvants. L'autre forme est celle d'une poudre compactée, dont les granules peuvent se détacher sur une surface de combustion relativement régulière. Pour les formes avancées comme les propergols solides des gros lanceurs d'appoints des fusées, ils sont coulés encore liquide dans le bloc propulseur où ils sont solidifiés en fines couches successives régulières, ou bien ils sont produits de façon plus traditionnelle sous forme de blocs de poudre compactée. En fin de combustion du bloc propulseur, la combustion n'est plus aussi régulière (surtout sous la forme de poudre compactée) et le bloc propulseur qui produit des vibrations importantes doit être éjecté avant que le bloc restant de propergol solide ne se fragmente en morceaux importants qui explosent brutalement au sein même de la chambre de combustion, ce qui pourrait être dangereux pour le reste de la charge transportée si l'enveloppe du propulseur ne reste pas étanche. Cependant, s'ils sont utilisés en explosifs (pour le génie civil, la démolition ou l'extraction minière) et destinés alors à être entièrement consommés en une seule fois, les propergols solides sont conditionnés soit en petits blocs sous forme pâteuse ductile (forme dangereuse à manipuler, et non destinée aux charges explosives importantes), soit sous la forme de bâtons pré-calibrés prêts à l'emploi, dans un emballage protecteur, non conducteur et étanche à la fois aux solvants contenus ainsi qu'à l'air et l'environnement pour lesquels ils sont destinés.

- **Propergol liquide** est un produit stable à l'état liquide à température ordinaire. Les ergols nécessitant un stockage à très basse température sont cryogéniques, comme l'oxygène comburant dont la température d'ébullition est de  $-183$  °C. Un couple d'ergols est hypergolique s'il entre en réaction spontanée au moindre contact, comme le couple peroxyde d'azote et 1,1-diméthylhydrazine (UDMH,

pour Unsymmetrical DiMethylHydrazine). Les propergols liquides possèdent l'inconvénient majeur d'être difficilement entreposables, mais possèdent l'avantage de pouvoir régler et même arrêter la combustion, très simplement via le réglage ou l'arrêt de l'injection dans la chambre de combustion.

- **Propergol hybride** ou lithergol, est un produit stable à température ordinaire, constitué d'un ergol solide et d'un ergol liquide.

**I.2 La carburation** consiste à réaliser un mélange carburé qui permette au moteur de fonctionner en toute circonstances. Le mélange carburant plus comburant devra satisfaire plusieurs conditions pour permettre une combustion la plus parfaite possible:

- Etre à l'état gazeux pour mélanger et enflammer le mélange carburant plus comburant, il est nécessaire que les deux corps aient le même état (gazeux). Pour réaliser et rendre plus active la vaporisation d'un liquide, trois solutions s'offrent à nous. Il faut agir sur 3 facteurs (La température en effet la vaporisation d'un liquide ne peut se faire sans absorption de chaleur, la pression car plus celle-ci est basse, plus l'évaporation est élevée, La surface d'évaporation, en pulvérisant l'essence, on augmente la surface en contact avec l'air donc il n'y a plus de volatilisation). Pour obtenir une vaporisation maximum, il faut augmenter la vitesse de l'air, augmenter la surface, donc l'efficacité de la pulvérisation, augmenter la dépression à l'admission; utilisé un carburant de grande volatilité)
- Etre homogène l'homogénéité il faut donc créer des turbulences lors du remplissage moteur, afin de favoriser le brassage de l'air et des molécules de carburant L'homogénéité du mélange est réalisée par la forme des tubulures d'admission et du piston.
- Etre parfaitement dosé (le dosage) La formation du mélange débute par l'introduction du carburant dans l'air aspiré. Le remplissage des cylindres dépend des conditions de fonctionnement du moteur.

### **I. 3 Combustion**

La combustion est une réaction chimique où un corps se combine à l'oxygène. La réaction a lieu en phase gazeuse si  $T > T_{\text{seuil}}$  (peu d'inflammation spontanée) et est

accompagnée de dégagement de chaleur (supérieur aux pertes) attribué à une réaction chimique exothermique et rapide.

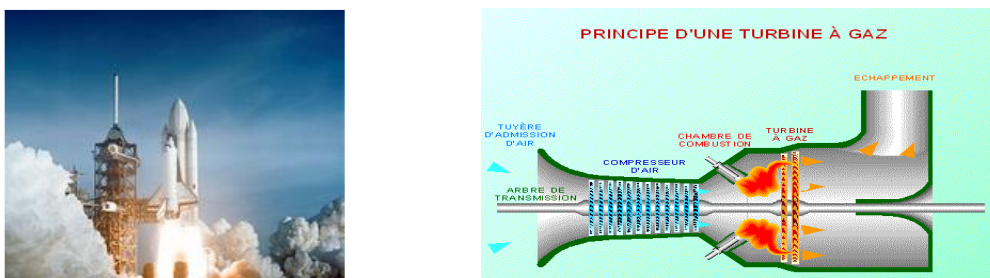
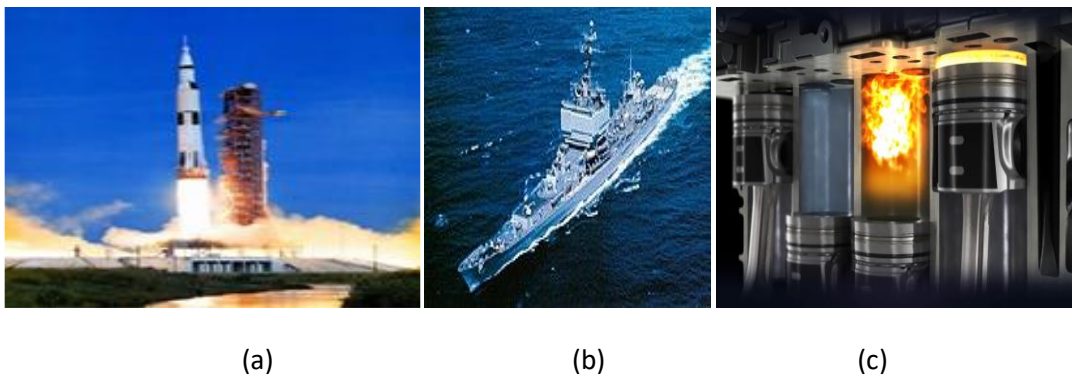


La combustion est une interaction complexe entre plusieurs disciplines incluant :

- la thermodynamique
- la cinétique chimique
- la mécanique des fluides et turbulence
- le transfert de masse et de chaleur
- la structure et le comportement des matériaux.

les Domaines d'application de la combustion sont:

- Propulsion fusée.
- Auto mobile.
- Turbine à gaz.
- propulsion navale & Aéronautique.

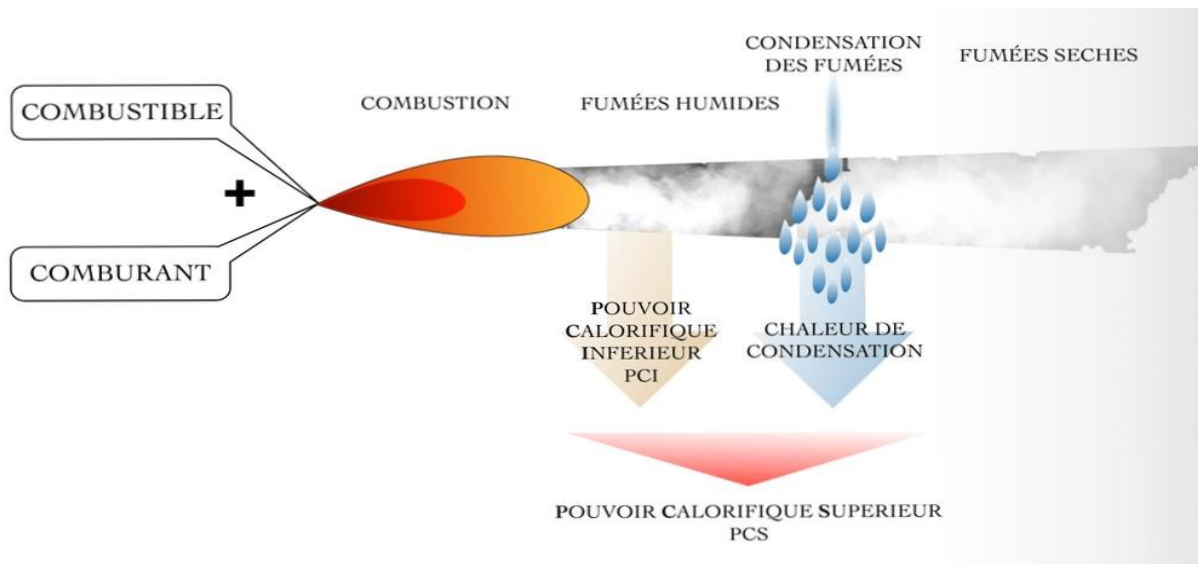


**Figure 10** différents domaines d'application d'une combustion. (a : navette spatiale, b : propulsion navale, c : moteur à essence, d : moteur fusée, e : turbine à gaz)



## I.4 Effet de la combustion sur l'environnement

Les rejets polluants Lorsque les lois de la stœchiométrie sont respectées, les gaz d'échappement ne contiennent que de l'azote gazeux ( $N_2$ ), du dioxyde de carbone ( $CO_2$ ) et de l'eau à l'état de vapeur ( $H_2O$ ). Ces corps existent en grandes quantités dans la nature, ils sont chimiquement stables et sont indispensables au maintien des équilibres naturels, ce ne sont donc pas des polluants. Mais lorsque les lois de la stœchiométrie ne sont plus respectées on considère deux configurations opposées : mélange riche (trop de carburant, pas assez d'air) et mélange pauvre (peu de carburant, trop d'air). Dans la première configuration, certains atomes qui constituent la molécule d'hydrocarbure ne trouvent pas de "partenaire oxygène" en nombre suffisant puisque l'air manque, ils ne sont donc pas oxydés complètement et se retrouvent dans les gaz d'échappement sous forme de particules carbonées, d'hydrocarbures imbrûlés (symbole chimique HC) ou de monoxyde de carbone (symbole chimique CO), gaz qu'il ne faut surtout pas confondre avec le  $CO_2$  : l'un est très toxique, l'autre pas du tout. Dans la seconde configuration, un excès d'air (c'est toujours le cas lorsque le moteur est suralimenté) fortement comprimé à haute température (c'est particulièrement le cas des moteurs diesel) peut entraîner la formation de monoxyde d'azote (symbole chimique NO), suite à une réaction entre l'oxygène ( $O_2$ ) et l'azote ( $N_2$ ). Une fois expulsé, le monoxyde d'azote présente la particularité de se transformer spontanément en dioxyde d'azote (symbole chimique  $NO_2$ ) au contact de l'air, générant au passage une mutation de l'oxygène atmosphérique en ozone (symbole chimique  $O_3$ ). Ces deux gaz sont très toxiques pour les organismes vivants.



**Figure 11** effet d'une réaction chimique de la combustion

## I.5 Thermodynamique appliquée à la combustion

### ***Réaction à volume constant***

D'après le 1er principe de la thermodynamique pour un système fermé

$$W_p + Q_v = \Delta U \quad (6)$$

Transformation isochore  $W_p = - \int p \cdot d_v = 0$  (car  $v = \text{cte}$ ). (7)

$$Q_v = \Delta U = U_f - U_i \quad (8)$$

Dans une réaction à volume constant, la quantité de chaleur mise en jeu, est égale à la variation de l'énergie interne  $\Delta U$ .

### ***Réactions à pression constante***

D'après le 1er principe de la thermodynamique pour un système ouvert

$$W_T + Q_p = \Delta H \quad (9)$$

Transformation isobare  $W_T = - \int V \cdot d_p = 0$  (car  $p = \text{cte}$ ). (10)

$$Q_p = \Delta H = H_f - H_i \quad (11)$$

La quantité de chaleur mise en jeu au cours de cette réaction à pression constante, pour un processus réversible est égale à la variation d'enthalpie  $\Delta H$  et que

$\Delta H > 0$  Endothermique.

$\Delta H < 0$  Exothermique.

La Relation entre  $Q_p$  et  $Q_v$  d'une réaction chimique gazeuse est comme suit:

$$Q_v = \Delta U = U_f - U_i$$

$$Q_p = \Delta H = H_f - H_i = (U_f + P \cdot V_f) - (U_i + P \cdot V_i) = (U_f - U_i) + P(V_f - V_i) \quad (12)$$

$$Q_p = Q_v + P(V_f - V_i) \quad (12.a)$$

Pour un gaz parfait on a :

$$P \cdot V = nRT \rightarrow P(V_f - V_i) = (n_f - n_i)R \cdot T = \Delta n \cdot R \cdot T \quad (13)$$

Avec :

$n_i$  : Nombre de moles du gaz avant réaction.

$n_f$  : Nombre de moles du gaz après réaction.

$n = 0$  : Pour liquide.

$$\text{Soit: } Q_p = Q_v + \Delta n \cdot RT \quad (14)$$

Dans tous ce qui suit nous allons considérer  $Q_v = Q_p$  et à la place de la chaleur de réaction, on parlera de l'Enthalpie de réaction.

### **Chaleur de réaction**

Dans le cas d'une réaction chimique, à la variation d'énergie interne ou d'enthalpie, correspond une variation de l'état d'avancement de la réaction chimique :  $Q_v$  ou  $Q_p$  respectivement. Rapporté à une mole d'avancement, on les nomme « chaleur de réaction » à volume constant ou pression constante respectivement. On note :

$$\Delta U = Q_v \text{ et } \Delta U = Q_p$$

Relation entre  $\Delta U$  et  $\Delta H$  (entre  $Q_p$  et  $Q_v$ )

$$\Delta H = \Delta U + \Delta n_{\text{gaz}}RT \quad (15)$$

Avec :

$\Delta n$  : Variation du nombre de moles de gaz

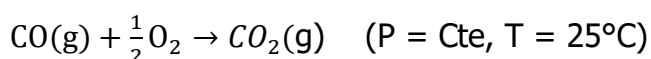
On observe que lorsque  $\Delta n_{\text{gaz}} = 0$ , les deux grandeurs s'identifient. Les applications de cette relation sont fréquentes pour les réactions totales et plus particulièrement pour les réactions de combustion.

### Chaleur standard de réaction

Un corps est à **l'état standard** lorsqu'il est pris à l'état pur sous la pression de 1atm et la température de 298,16°k (25°C).

Une réaction chimique s'effectue dans les conditions standards, lorsqu'elle est conduite de façon telle que les réactifs et les produits soient pris à l'état standard ( $T = 298^\circ\text{K}$ ,  $P = 1\text{atm}$ ).

Exemple :



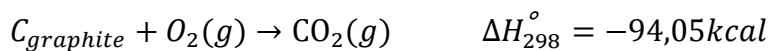
$$\Delta H_{298}^\circ = -283\text{kJ}. \quad \text{Chaleur standard de réaction.}$$

### Chaleur ou enthalpie de formation – loi de HESS:

**L'Enthalpie de formation** d'un corps composé est l'enthalpie de sa réaction de synthèse, à partir des éléments constituants à l'état de corps simples sous la pression atmosphérique (état standard). On peut également définir l'enthalpie de formation d'un corps dans un état physique donné. La variation d'enthalpie correspondante à la réaction de formation dans les conditions standards d'une mole de ce corps pur à partir des corps simples pris également dans les conditions standards. Elle est symbolisée par  $\Delta H_f^\circ$

Les corps de base (corps simples) ayant une enthalpie de formation nulle. Les corps choisis sont les corps formés d'une sorte d'atomes sous la forme où ils existent à l'équilibre dans l'état de référence  $O_2, H_2, Cl_2, N_2, C_{graphite}$ . La variation de l'enthalpie standard de formation du  $CO_2$  à l'état gazeux est égale à la variation d'enthalpie de la réaction.

$$(\Delta H_f^\circ)_{CO_2(g)} = \Delta H_{298}^\circ$$



$$\Delta H_{298}^\circ = (\Delta H_f^\circ)_{CO_2(g)} - (\Delta H_f^\circ)_{C_{graphite}(g)} - (\Delta H_f^\circ)_{O_2} \quad (16)$$

$$\text{Où} \quad (\Delta H_f^\circ)_{C_{graphite}(g)} = 0 \quad , (\Delta H_f^\circ)_{O_2} = 0$$

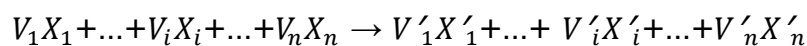
$$(\Delta H_f^\circ)_{CO_2(g)} = \Delta H_{298}^\circ = -94.05kcal/mole$$

La chaleur de réaction  $\Delta H_{298}^\circ$  est égale à la différence entre les sommes des chaleurs de formation des produits de la réaction et celles des chaleurs de formation des corps qui entrent en réaction.

$$\Delta H_{298}^\circ$$

Réactifs  $\longrightarrow$  Produits

La Généralisation de la Loi de Hess donne:



$$\Delta H_{298}^\circ = \sum_{i=1}^n V'_i (\Delta H_f^\circ X'_i) - \sum_{i=1}^n V_i (\Delta H_f^\circ X_i) \quad \text{Loi de Hess} \quad (17)$$

- **variation de  $\Delta H$  d'une réaction avec la température ( $P = 1 \text{ atm}$ )**

$$1er\ principe \rightarrow \delta W_t + \delta Q = dH \Rightarrow \delta Q = dH - \delta W_t = dH - Vdp \quad (18)$$

A pression constante  $\Rightarrow \frac{\delta Q}{\delta T} = \left(\frac{\delta H}{\delta T}\right)_p = C_p$  chaleur massique à pression constante.

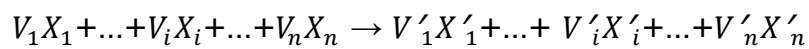
Dans une réaction chimique **A**  $\rightarrow$  **B** ; A (réactifs) ; B (produits) ;

$$\Delta H = H_B - H_A$$

$H_B$  et  $H_A$  Sont respectivement les enthalpies sensibles des réactifs et des produits.  
( $T_0=298^\circ\text{k} \rightarrow T \text{ }^\circ\text{k}$ )

$$\left(\frac{\delta H}{\delta T}\right)_p = \left(\frac{\delta H_B}{\delta T}\right) - \left(\frac{\delta H_A}{\delta T}\right) = (C_{pB}) - (C_{pA}) = \Delta C_p \quad (19)$$

Soit la réaction suivante :



(Réactifs)

(Produits)

$$d\left(\frac{\Delta H}{dT}\right) = \sum_{i=1}^{n'} V'_i (Cp)_{X'_i} - \sum_{i=1}^n V_i (Cp)_{X_i} \quad (20)$$

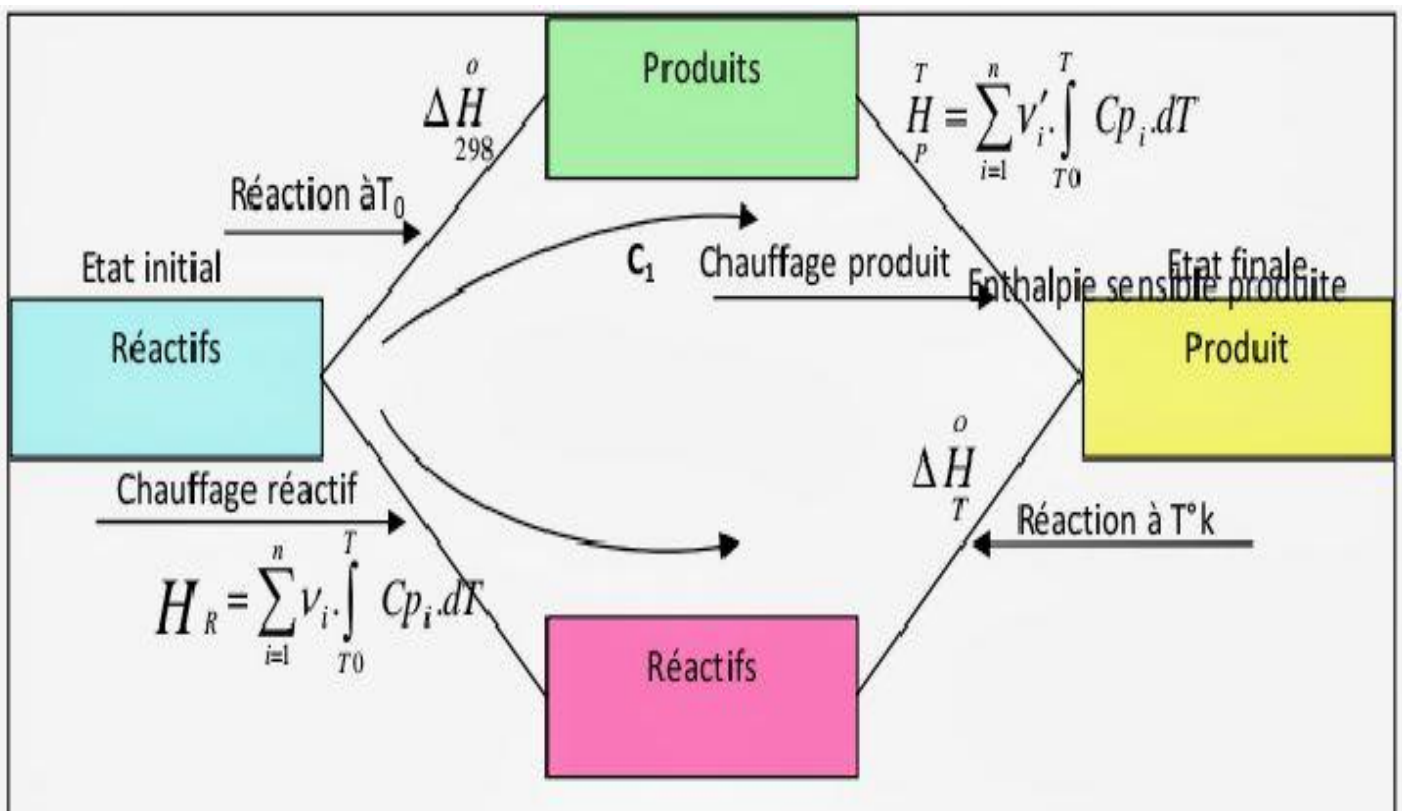
Ici  $C_p$  : chaleur molaire, et  $v$  : Nombre de moles.

## Expression de Kirchhoff

$$C_1 = C_2 \rightarrow$$

$$\Delta H_{298}^{\circ} + H_p^S = H_R^S + \Delta H_T^{\circ}$$

$$\Delta H_T^{\circ} = \Delta H_{298}^{\circ} + H_p^S - H_R^S = \Delta H_{298}^{\circ} + \sum_{i=1}^n V'_i \int_{T_0}^T C_{p \cdot X_i} dT - \sum_{i=1}^n V_i \int_{T_0}^T C_{p \cdot X_i} dT$$



$$\Delta H_T^{\circ} = \Delta H_{298}^{\circ} + \sum_{i=1}^n V'_i \int_{T_0}^T (Cp)_{X_i} dT - \sum_{i=1}^n V_i \int_{T_0}^T (Cp)_{X_i} dT \quad (21)$$

### **N.B.:**

- S'il y a changement d'état physique d'un ou plusieurs corps (réactifs ou produits) dans l'intervalle de température utilisée, il faut utiliser le principe de l'état initial et de l'état final.
- On peut également calculer la chaleur de réaction en utilisant l'enthalpie globale.

$$H^T = (\Delta H_f^{\circ})_{T=0} + \int_{T=0}^T (Cp) dT \quad (22)$$

Ce qui donne:

$$\Delta H_T^\circ = \sum_{i=1}^n H_{(p)}^T - \sum H_{(R)}^T$$

• si  $\Delta T = T - T_0$  <variation très faible> on peut considérer que  $C_p \cong C_{te}$

$$\int_{T_0}^T C_p = C_p(T - T_0)$$

$$\Delta H_T^\circ = \Delta H_{298}^\circ + (\sum v_i' C_{p_x i}) - (\sum v_i C_{p_{xi}})(T - T_0) \quad (23)$$

## Pouvoir calorifique

On appelle pouvoir calorifique d'un combustible la quantité de chaleur fournie ou dégagée par la combustion complète de 1 kg de combustible solide ou liquide ou de 1 Nm<sup>3</sup> de combustible gazeux.

Le Nm<sup>3</sup> est donnée dans les conditions normales de pression et de température (0°C, 760 mm Hg = 1013 mbar).

Le pouvoir calorifique Pc est fonction de l'état physique du produit de combustion.

On distingue le pouvoir calorifique supérieur (PCS) et inférieur (PCI).

– Le pouvoir calorifique est dit **supérieur PCS** (mesuré au calorimètre) si l'on suppose ramener à 25°C tous les produits de la combustion, la vapeur d'eau étant alors condensée (l'eau est à l'état liquide).

– Le pouvoir calorifique est dit **inférieur PCI** (à utiliser dans les applications industrielles) si l'on suppose refroidir à 100°C les produits de combustion sans condensation de la vapeur d'eau (l'eau est à l'état vapeur).

Le pouvoir calorifique dépend des conditions opératoires.

- Le pouvoir calorifique à pression constante  $(Pc)_P = Q_P/m_c$
- Le pouvoir calorifique à volume constant  $(Pc)_V = Q_V/m_c$

Pour les exprimer, on les ramène en kJ/kg pour combustible solide ou liquide et kJ/Nm<sup>3</sup> pour combustible gazeux à (0°C et 760 mm Hg)



$Nm^3$  : Mètre cube normale.

D'après **DULONG**, le pouvoir calorifique peut être calculé approximativement par la formule suivante :

**1 Pouvoir calorifique supérieur ( $P_{cs}$ ):**

$$P_{cs} = 8080.C + 34450 \left( H - \frac{O}{8} \right) + 2250.S \text{ en } \frac{\text{Kcal}}{\text{Kg}} \quad (24.a)$$

$$P_{cs} = 33823.C + 144206 \left( H - \frac{O}{8} \right) + 9419.S \text{ en } \frac{\text{kJ}}{\text{Kg}} \quad (24.b)$$

**2 Pouvoir calorifique inférieur ( $P_{ci}$ ) :**

$$P_{ci} = 33823.C + 121076 \left( H - \frac{O}{8} \right) + 9419.S \text{ en } \frac{\text{kJ}}{\text{Kg}} \quad (25.a)$$

$$P_{ci} = 8080.C + 28924 \left( H - \frac{O}{8} \right) + 2250.S \text{ en } \frac{\text{Kcal}}{\text{Kg}} \quad (25.b)$$

**Pouvoir Comburivore ou rapport stœchiométrique de combustion:**

On appelle **pouvoir comburivore** d'un combustible, la quantité d'air (exprimée en masse ou en volume) strictement nécessaire pour assurer la combustion de 1 kg de combustible.

$A_0$  = kg d'air / kg de combustible

Or pour 100 kg de combustible, il faut  $(x + y/4 - z/2) * 137,4$  kg d'air

Donc :  $A_0 = (x + y/4 - z/2) * 137,4 / 100$  kg d'air/kg combustible.

**N.B**: Tous les combustibles ont un pouvoir comburivore de l'ordre de 14.

Pour que la combustion puisse avoir lieu, il est indispensable de fournir au combustible une quantité d'air déterminée.

Suivant la quantité d'air fournie, la combustion peut être **complète** ou **incomplète**.

– **La combustion complète du combustible** est un phénomène de combinaisons chimiques des éléments combustible du produit (combustible) avec

l'oxygène de l'air ayant lieu à une température déterminée et accompagnée d'un dégagement maximal de chaleur.

– **La combustion sera dite incomplètes** dans le cas où certaines particules du combustible n'ont pas le temps d'être brûlées et sont entraînées à l'extérieur du foyer avec les cendres et les scories.

## **Combustion oxydante complète avec Excès d'air**

### ***a. Excès d'air***

Dans la réalité, la quantité d'air théoriquement indispensable à la combustion ( $A_0$ ) s'avère insuffisante (une partie rentrante dans le foyer ne se mélange pas intimement au combustible) et une partie de celui-ci (combustible) s'échappe sans prendre part à la réaction. Donc, il faudrait fournir plus d'air qu'il est théoriquement indispensable ( $A$ ).

La combustion réelle se caractérise par le rapport entre le volume d'air effectivement fournie ( $V$ ) et le volume d'air nécessaire à la combustion ( $V_0$ ).

$$\lambda = \frac{V}{V_0} = \frac{A}{A_0} = 1 + \frac{e}{100} \Rightarrow = \frac{V-V_0}{V_0} \cdot 100 \quad (26)$$

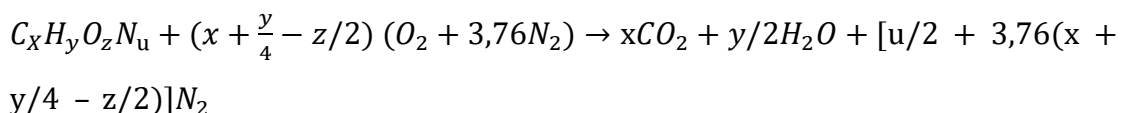
Où  $e=100 (\lambda-1)$

Avec :  $\lambda$  : Coefficient d'excès d'air.

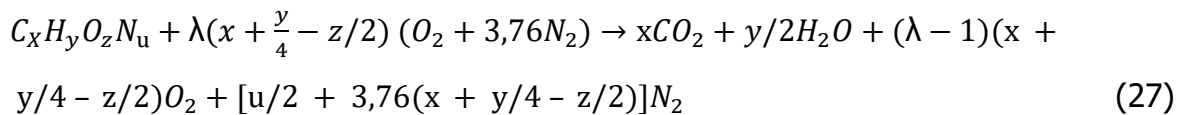
$e$  : Excès d'air. ( $e$  : peut-être  $>0$  ou  $<0$ ,  $= 0$ ).

### ***Equation de combustion complète avec excès d'air***

Rappelons l'équation de combustion stœchiométrique (théorique) :



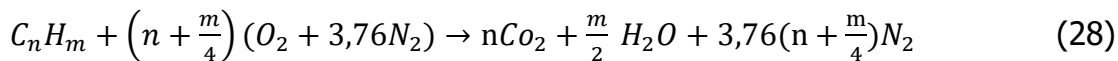
L'équation de combustion complète avec excès d'air est donnée par :



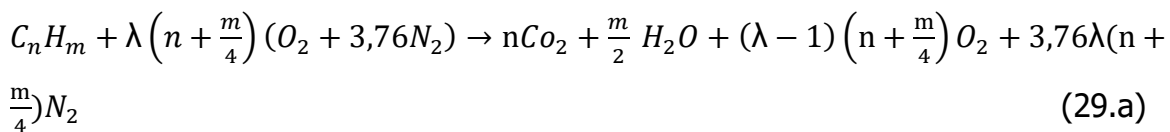
Soit :

100 kg combustible +  $\lambda(x + y/4 - z/2)137,4$  kg d'air  $\rightarrow x$  44 kg CO<sub>2</sub> +  $y/2$  18 kg H<sub>2</sub>O +  $(\lambda - 1)(x + y/4 - z/2)32$  kg O<sub>2</sub> +  $[u/2 + 3,76\lambda(x + y/4 - z/2)]$  28 kg N<sub>2</sub>  
 Pour un hydrocarbure C<sub>n</sub>H<sub>m</sub> on a :

L'équation de combustion Stœchiométrie :



Equation de combustion avec excès d'air :



Sachons que :

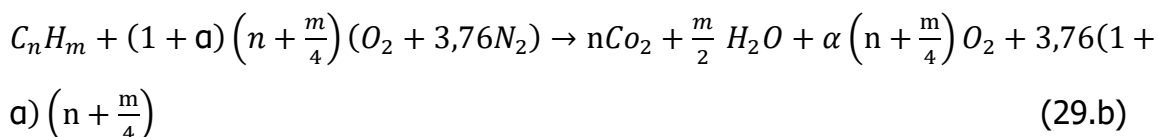
$$\lambda = 1 + e/100 = 1 + \alpha \text{ avec } \alpha = e/100$$

$\lambda$  : Coefficient d'excès d'air

e : Excès d'air en %

$\alpha$  : Excès d'air exprimé numériquement

On a:



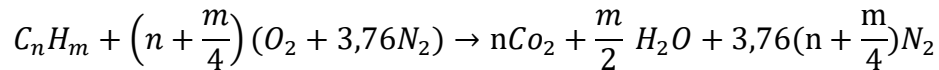
○ **Combustion réductrice (Ménagée)**

Combustion ménagée ou avec défaut d'air c'est une combustion dans laquelle la quantité de carburant mise en jeu est supérieure à la quantité dans les conditions stœchiométriques. Dans ce cas, on parle de richesse ou de défaut d'air.

D'une manière générale, c'est une combustion complexe à analyser par rapport aux précédentes, mais importante sur le plan valorisation chimique.

○ **Richesse**

L'équation de combustion Stœchiométrie sera :



Le rapport Stœchiométrie (Dosage Stœchiométrique) = masse combustible /masse comburant = (C/A)<sub>s</sub>

$$\left(\frac{C}{A}\right)_s = \frac{12n+m}{\left(4n+\frac{m}{4}\right)(O_2+3,76N_2)} = 0,02911 \frac{12n+m}{4n+m} \quad \text{Où} \quad \left(\frac{A}{C}\right)_s = 34,328 \frac{4n+m}{12n+m} \quad (30)$$

On définit la richesse φ comme le rapport entre le dosage réel et le dosage Stœchiométrique.

$$\varphi = \frac{\left(\frac{C}{A}\right)}{\left(\frac{C}{A}\right)_s}$$

-Combustion stœchiométrie φ = 1

-Mélange pauvre φ < 1

-Mélange riche φ > 1

$$\varphi = \frac{(Masse \text{ du carburant} / Masse \text{ d'air})}{(Masse \text{ du carburant} / Masse \text{ d'air})_{St}} = \frac{C}{A} \cdot \left(\frac{A}{C}\right)_s$$

$$\left[ \frac{Masse \text{ du carburant}}{Masse \text{ d'air}} \right]_{r\acute{e}el} \cdot r \quad \text{Avec } r = \left(\frac{A}{C}\right)_s$$

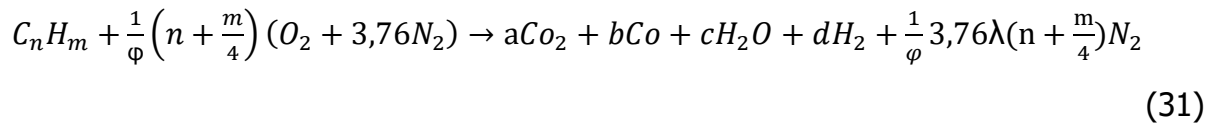
○ **Relation entre richesse φ et coefficient d'excès d'air λ**

λ = A / A<sub>s</sub> Coefficient d'excès d'air

$$\varphi = \frac{C}{A} \cdot \left(\frac{A}{C}\right)_s = \frac{A_s}{A} \quad \rightarrow \quad \lambda = \frac{1}{\varphi} = 1 + \frac{e}{100} \quad (30)$$

Avec  $e/100 = (1 - \varphi) / \varphi = \alpha$

L'équation de combustion en mélange riche (défaut d'air,  $\varphi > 0$ )



Avec a, b, c, d représentent respectivement les nombres de moles du CO<sub>2</sub>, CO, H<sub>2</sub>O, H<sub>2</sub> des produits de combustion.

### **Indice d'octane et de cétane**

L'indice d'octane (pour l'essence et le GPL-C) et l'indice de cétane (pour le gazole) sont des caractéristiques importantes des carburants, ils déterminent le comportement du carburant pendant la combustion, les réglages et performances du moteur.

#### **a. L'indice d'octane (IO)**

L'indice d'Octane (IO) est un nombre qui caractérise le délai d'inflammation du carburant (essence et GPL). Plus IO est élevé, plus le délai d'inflammation est élevé le carburant résiste bien à la détonation

IO élevé ce qui implique délai élevé : combustion contrôlée ;

IO faible ce qui implique délai faible risque de combustion de combustions incontrôlées (cliquetis).

Il existe deux types d'indice d'octane :

-L'indice d'octane RON (indice recherche) qui est déterminé dans des conditions d'essais très éloignées de la réalité de fonctionnement des moteurs thermiques.

-L'indice d'octane MON (indice moteur) qui est plus sévère et plus juste car il est déterminé dans des conditions plus proche de la réalité de fonctionnement des moteurs

L'indice moteur est inférieur environ de 10 points à l'indice recherche

Exemple : si RON = 95, MON = 85 c'est le cas de super plomb.

**N.B :**

pour avoir des carburants ayant IO compatible avec les exigences actuelles, il faut faire appel à des additifs antidétonants, jusqu'à présent cet additif était le plomb l'arrivée des nouvelles normes anti-pollution (PREMIER JANVIER 1993, les pétroliers ont trouvé un nouvel antidétonant pour remplacer le Pb celui-ci détruit les pots catalytiques qui a été remplacé par le benzène qui révèle être cancérigène.

***b. L'indice de Cétane (IC)***

L'IC est un nombre qui caractérise la capacité du gazole à s'enflammer rapidement après avoir atteint la température d'auto-inflammation pour assurer un bon déroulement de combustion dans le moteur Diesel (contrainte mécaniques et thermiques modérées, bruit modéré) il faut un indice de cétane élevé.

-IC élevé ce qui implique délai faible ce qui donne un moteur peu bruyant, contraintes modérées

-IC faible ce qui implique dai élevé ce qui donne un moteur bruyant, contraintes élevées (Longévité moteur réduite) soient :

$T_0$ : le début injection constant

$T_1$ : le début combustion

$T_2$  : L'instant de fin injection constant

T: le temps total d'injection constant

La quantité de gazole injectée entre  $T_0$  et  $T_1$  ne dépend que du dai à l'instant  $T_1$ , fin du dai toute la quantité de gazole injectée entre  $T_0$  et  $T_0$  va s'auto enflammer spontanément plus cette quantité est importante, plus la montée en pression spontanée dans le cylindre va être forte d'où chocs de pression sur le piston ; contraintes mécaniques élevées, bruit important.

**I.6 L'inflammation**

L'inflammation est une transition d'un état non réactif vers un état réactif durant lequel une excitation extérieure a conduit à un emballement thermodynamique suivie par une rapide transition vers une combustion auto-entretenu. La principale

motivation des études de l'inflammation est la compréhension des phénomènes physico-chimiques impliqués dans cette transition avec pour intérêts majeurs:

- prévenir les risques incendie;
- développer des allumeurs et des sources d'énergie reproductibles pour l'allumage;
- étudier l'inflammabilité d'un matériau sous des conditions initiales données pour une énergie fournie donnée;
- déterminer l'énergie minimum exigée pour atteindre l'inflammation;
- étudier les effets des paramètres physiques et chimiques sur le délai d'inflammation.

Les processus d'inflammation sont généralement très complexes et impliquent plusieurs étapes, ils sont transitoires et déclenchés par des phénomènes thermiques également transitoires. Afin de prédire ou interpréter ces phénomènes d'inflammation, des mécanismes chimiques détaillés doivent être connus; malheureusement la mesure des espèces chimiques pendant un temps très court est très difficile. Aussi, les scientifiques ont postulé l'existence de quelques mécanismes chimiques de base fonction de l'excitation et des conditions ambiantes. Les problèmes fondamentaux importants sont le mélange combustible oxydant, le mouvement turbulent des fluides, l'interaction chimie turbulence, les phénomènes tridimensionnels et instationnaires souvent difficiles à résoudre.

Les conditions classiques de l'allumage sont données par la règle des 3T :

- Température: elle doit être assez élevée pour induire une réaction chimique ou une pyrolyse;
- Temps: il doit être assez long pour permettre à la chaleur apportée d'être absorbée par les réactifs afin que les phénomènes thermochimiques fugitifs puissent se produire;
- Turbulence: elle doit être suffisante pour obtenir un bon mélange combustible oxydant et pour que la chaleur puisse être transférée du milieu réactif vers le milieu non réactif.

Il existe deux types d'inflammation :

- inflammation spontanée ou explosion thermique ;
- inflammation forcée (source).

## **1 Inflammation spontanée ou explosion thermique (*L'auto inflammation*)**

Quand un mélange réactif est formé, atteint une température et une pression donnée, puis laissé seul, il peut brûler dans une flamme après un certain délai, alors se produit l'emballement thermique, émission de rayonnement visible, et l'activité chimique.

Le processus d'auto inflammation des mélanges combustibles homogènes est caractérisé par le développement d'une réaction chimique rapide ; accompagnée de l'apparition d'une flamme à partir du développement relativement lent de réaction pré flamme. L'auto inflammation est la conséquence du déséquilibre entre la puissance thermique dégagée par les réactions chimiques et celles échangées par le système à la réaction avec le milieu extérieur qui conduit à l'accroissement progressif à la vitesse de la réaction. Il existe deux types de l'auto inflammation chimique et thermique.

### ***a. Inflammation chimique***

Est une réaction en chaîne résulte de la multiplication isotherme des radicaux élémentaires. Dans la théorie chimique de la réaction en chaînes, l'inflammation commence par une chaîne de réactions ramifiées, c'est à dire liées entre elles, la chaleur qui est dégagée n'a guère d'effet secondaire. Cette théorie explique entre autre l'existence de flammes froides.

### ***b .Inflammation thermique***

Le taux de chaleur crée par l'exotherme de la réaction dans un volume V est très supérieur à la chaleur perdue aux parois. L'augmentation de la température devient rapide et incontrôlable, il y a apparition de la flamme lorsque cette température est suffisamment élevée. La théorie thermique est basée sur l'hypothèse que le processus de combustion ne peut être initié qu'à une température suffisamment



élevée pour que les collisions moléculaires aient lieu avec une fréquence suffisamment élevée.

Pour l'analyse théorique de l'auto inflammation thermique appliquée à un volume de gaz permet de caractériser les grandeurs fondamentales :

- délai d'inflammation
- température critique d'auto inflammation
- condition spécifique de l'inflammation

### **Excitation de l'inflammation**

Elles peuvent se classer en trois catégories :

- Excitation thermique:** c'est un transfert d'énergie thermique vers les réactifs par conduction, convection, rayonnement ou autre combinaison de ces modes de transfert de base;
- Excitation chimique:** introduction d'agents réactifs hypergoliques;
- Excitation mécanique:** Impact mécanique, frottement ou onde de choc.

Ces effets peuvent être obtenus par des bougies d'allumage, des fils chauds, des pétards, des allumeurs pyrotechniques, des allumeurs hypergoliques, des percuteurs, etc.

Les dispositifs d'allumage sont également des tubes à choc, des arcs, des lasers à CO<sub>2</sub>, des condenseurs d'énergie solaire, etc.

### **Limites d'inflammabilité**

- la nécessité de compenser les pertes thermiques par une partie de la chaleur générée par la réaction de combustion détermine pour chaque mélange une plage de compositions (richesses) en dehors de laquelle une flamme ne peut pas se propager de façon autonome.

- on définit ainsi deux limites d'inflammabilité : la limite inférieure (pauvre/lean) et la limite supérieure (riche/rich).

- les limites sont en général définies pour des mélanges avec l'air ou l'oxygène.

- la limite inférieure est la plus importante en ce qui concerne les problèmes de sécurité; elle diffère peu pour l'air et l'oxygène.

## **I.6 Combustion et Températures des références**

### ***a. Point-éclair***

Température pour laquelle la vapeur en équilibre avec le liquide est suffisamment concentrée pour produire une déflagration au contact d'un point chaud (ex: flamme/étincelle à proximité) dans des conditions normalisées.

### ***b. Température d'auto-inflammation***

La température d'auto-inflammation d'un carburant est la température à laquelle le mélange carburant-comburant s'enflamme de lui-même

Quelques valeurs : super, super sans plomb : 450°C, gazole : 250°C

### ***c. Délai d'auto-inflammation (dai) :***

A partir de l'instant où le mélange gazeux (carburant-comburant) est porté à la température d'auto-inflammation, le mélange ne s'enflamme pas instantanément.

Le délai d'auto-inflammation est le temps qui sépare le moment où la température d'auto-inflammation est atteinte et le début de la combustion. soit :  $t_1$   $t_0$  ordre de grandeur 1ms

$t_0$  : Instant où la température d'auto-inflammation est atteinte

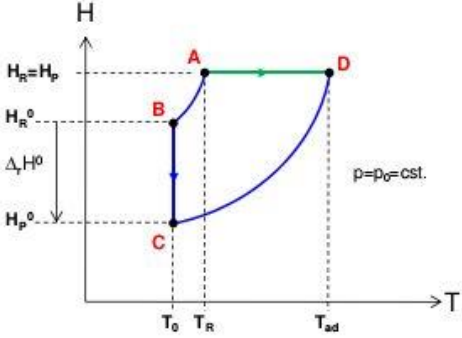
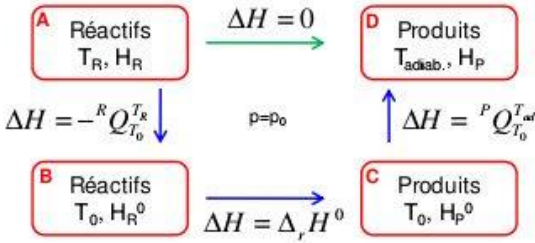
$t_1$  : Début de la combustion

$t_1 - t_0$  : Délai d'auto-

### ***d. Température de flamme adiabatique :***

La température adiabatique est la température de fin de combustion lorsque toute la chaleur libérée par la réaction a servi à chauffer les produits. Selon les conditions opératoires, plusieurs définitions sont possibles. Ici, nous travaillons à pression constante. Cela implique que l'enthalpie du système est constante.

La température adiabatique est fonction du facteur d'air  $\lambda$  et est maximale pour des conditions stœchiométriques.



## Partie II

---

# Flammes prémélange & de diffusion Sous régime laminaire & Turbulent.

### Introduction

Une flamme est le lieu de réactions de combustion vive se produisant dans une zone d'épaisseur faible : elle produit de la chaleur et émet en général de la lumière. Elle est à l'origine de la production du feu. La caractéristique principale des flammes est l'émission de lumière ; c'est la partie visible des réactions d'oxydation vive en phase gazeuse. C'est cette propriété qui est principalement utilisée dans l'étude des flammes. Suivant la nature des gaz de combustion, la lumière diffère en quantité et en qualité. Certaines flammes, telles celles émises par la combustion de l'hydrogène dans de l'air pur peuvent n'être pratiquement pas lumineuses. Une autre caractéristique essentielle des flammes est l'élévation rapide de température qu'elles génèrent : souvent au-delà de 1000 °C, elles atteignent 2500 °C pour un mélange hydrogène-oxygène. Là encore, la température diffère suivant la nature des gaz inflammables. Certains hydrocarbures donnent, dans certaines conditions de température et de pression, des « flammes froides ». Pour des mélanges proches de la limite inférieure d'inflammabilité, la température la plus élevée se situe vers le bas et dans l'axe de la flamme ; pour des mélanges proches de la limite supérieure, les températures les plus élevées sont atteintes au pourtour de la flamme, là où le mélange se combine avec l'air.

### II.2 Les différents types de flammes

Combustion: ensemble de réactions chimiques d'oxydoréduction entre un combustible (C) et un oxydant (Ox).

L'étude des écoulements réactifs nous amène à distinguer deux types de flammes : les flammes de prémélange et les flammes de diffusion.

#### II.2.1 Flamme de diffusion

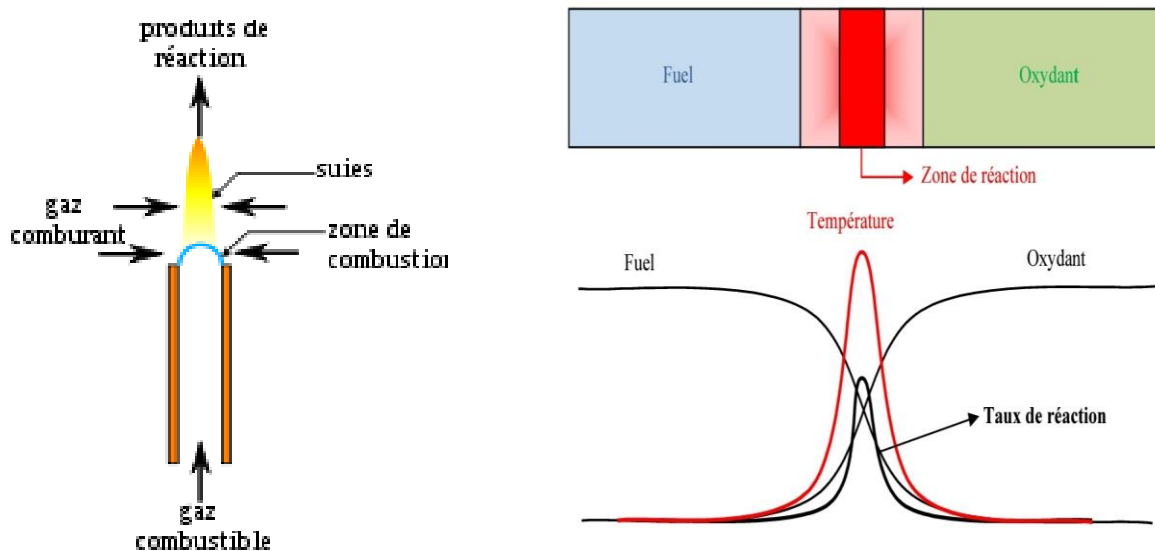
L'oxydant et le combustible ne peuvent coexister dans la même particule fluide s'ils réagissent très rapidement. Mais des mélanges variables d'oxydants et de produits peuvent se rencontrer d'une part et d'autre d'une surface de réaction.

J Toor a été le premier à résoudre le problème du calcul du champ de valeurs moyennes de la fraction massique. Il avait supposé qu'une réaction unique et irréversible se produirait entre l'oxydant et le combustible, et avait remarqué que la fonction du scalaire passif satisfaisait une équation sans terme de production chimique.

Il a été démontré plus tard que la prise en compte de l'équilibre chimique adiabatique complet en chaque point permet de calculer toutes les espèces en fonction d'une espèce fictive inerte, qui peut être la concentration d'un type particulier d'atomes.

- C et Ox initialement séparés.
- C et Ox doivent diffuser au travers des divers composants du mélange pour se rencontrer et réagir.
- Flamme contrôlée par la diffusion des espèces.
- Taux chimique  $\ll$  Taux diffusion

**Applications:** foyers domestiques et industriels, turbines à gaz, moteurs fusées, MACI.



**Figure 1** Structure d'une flamme de diffusion

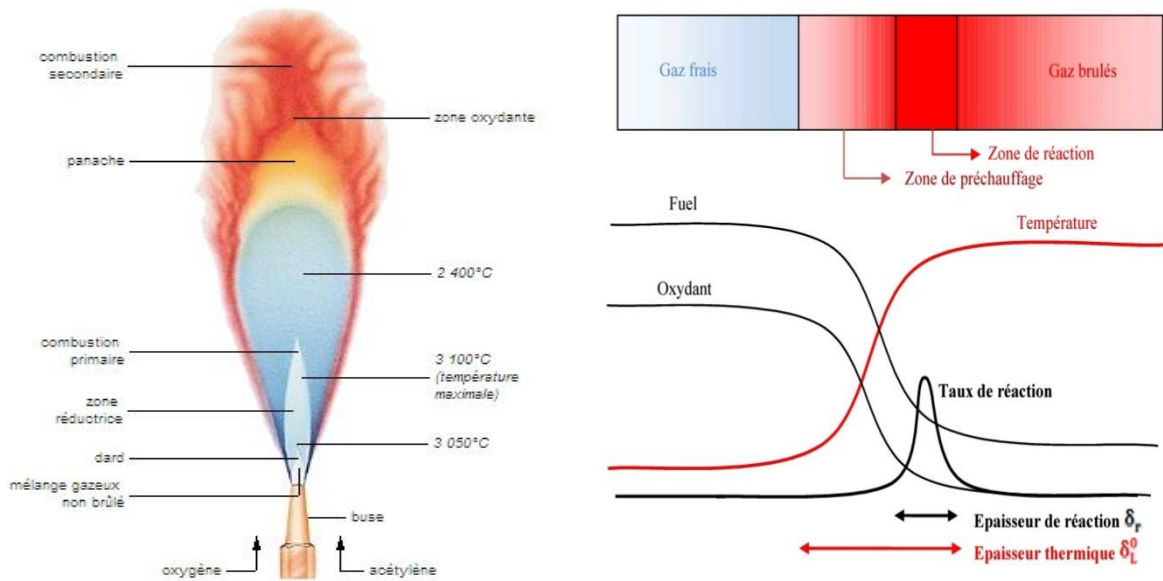
## II.2.2 Flamme de prémélange

Les flammes turbulentes prémélangées sont des milieux gazeux composés de gaz frais ou brûlés (à l'équilibre chimique).

Le problème a été posé par K N C Bray et B Moss en 1973. Ils ont montré que le taux de réaction moyen était proportionnel à une variable d'avancement de la combustion. Spalding a démontré que le taux de réaction était indépendant de la chimie, et est contrôlé par la turbulence elle-même.

- C et Ox initialement pré mélangés.
- Rien ne s'oppose à ce que C et Ox réagissent immédiatement.
- Flamme contrôlée par la cinétique chimique.

**Applications:** brûleurs, bec Bunsen, MACI à allumage commandé.



**Figure 2** Structure d'une flamme prémélange

### II.3 Buts et difficultés de la modélisation :

Résoudre un problème de combustion c'est comprendre le passage des gaz frais combustible et un oxydant (C + Ox) aux gaz brûlés (Pr).

Dans le cas des mélange réactifs et brûlés sont gazeux connaissant :

- La nature du mélange combustible.
- La géométrie de la chambre ou brûleur.

**On détermine :**

- La température T et la concentration locales des espèces.
- Géométrie de la surface de flamme.
- Les débits (par apport à la puissance dégagée par la combustion).

Combustion intervient d'un écoulement à mélange gazeux, échange de matière et de chaleur et d'une réaction chimique, qui permet considération plusieurs discipline tell que la mécanique fluides, thermodynamique et chimie.

**Les inconnues :**

- |                              |                       |            |
|------------------------------|-----------------------|------------|
| ✓ Masse volumique de mélange | $\rho(\vec{x}, t)$    | 1 inconnue |
| ✓ Pression de mélange        | $P(\vec{x}, t)$       | 1 inconnue |
| ✓ Température de mélange     | $T(\vec{x}, t)$       | 1 inconnue |
| ✓ Vitesse d'ensembles        | $\vec{V}(\vec{x}, t)$ | 3 inconnue |
| ✓ Enthalpie du mélange       | $h(\vec{x}, t)$       | 1 inconnue |
| ✓ Fractions massiques        | $Y_k(\vec{x}, t)$     | n          |

Soit un totale de  $n + 7$  inconnues.

**Les équations dont on dispose :**

✓ Bilan de masse du mélange	1 Equation
✓ Bilan de quantité de mouvement (3D)	3 Equations
✓ Bilan d'énergie	1 Equation
✓ Equation d'état des gaz	1 Equation
✓ Equation d'état énergétique	1 Equation
✓ Bilan de masse des espèces k	n

Totale  $n + 7$  équations.

Equation sont non – linéaires : coefficient (diffusion – viscosité – calorifique...) nombreux et fonction de température; le tout est fonction de temps.

La résolution simplifiée  $\Rightarrow$  Solution analytique possible en faisant des approximations :

- ✓ Régime établi.
- ✓ Gaz parfaits éventuellement non visqueux.
- ✓ Écoulements monodimensionnels.
- ✓ Laminaire.
- ✓ Coefficients constants.

## II.4 Hypothèse fondamentale

Chaque élément du mélange est en Equilibre Thermodynamique Local (ETL), mais pas en équilibre chimique (EC).

L'E.T.L est obtenue au tout d'un temps de relaxation  $\tau$  **thermodynamique**  $\Rightarrow$  temps nécessaire à l'équipartition par choc intermoléculaire des énergies des molécules.

Le temps de relaxation chimique  $\tau_c$   $\Rightarrow$  temps nécessaire à l'obtention d'un nombre élevé de collisions entre molécules de natures différentes composant a une réaction chimique.

On désigne par P la probabilité :

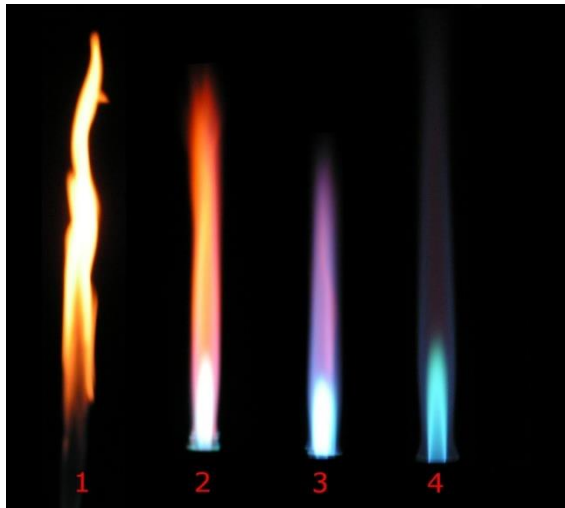
Collision d'une molécule quelconque  $>$  Collision d'une molécule des nature différentes.  $P(E.T.L) > P(E.C)$

## II.5 Exemple de problèmes modélisables :

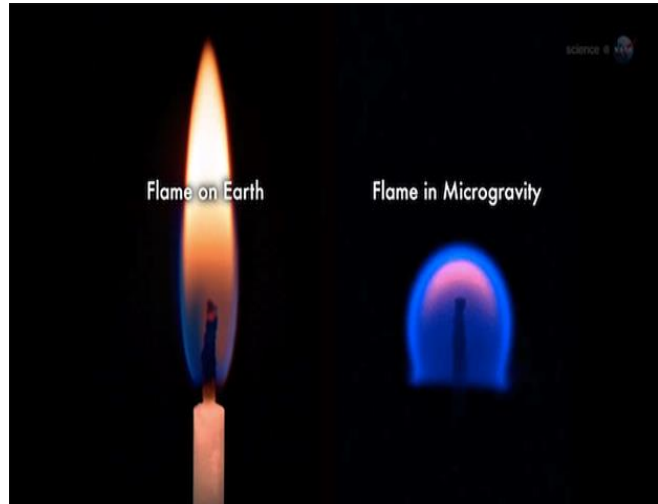
### II.5.1 Flammes de diffusion

Combustion d'une goutte d'hydrocarbure il ya diffusion du carburant et de l'oxydant vers la flamme à travers les produits de combustion en détermine en fction du rayon :

- ✓ La concentration des espèces.
- ✓ Les températures.
- ✓ Les débits (durée de combustion).



(a)



(b)

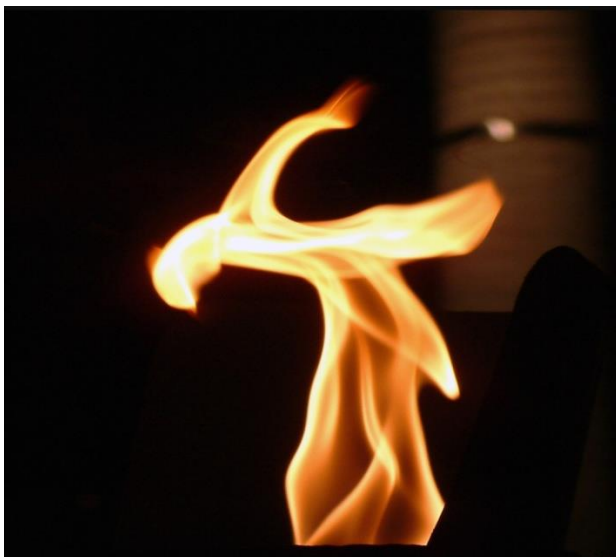
**Figure 3** Flammes de diffusion

### II.5.2 Flammes de prémélange

On détermine selon la distance à la flamme.

- ✓ La concentration des espèces.
- ✓ Les températures.
- ✓ Les débits, donc la puissance dégagée.

Pour un brûleur, type bec Bunsen, on détermine la forme du front de flamme (cône amorti).



(c)



(d)

**Figure 4** Flamme de prémélange



## II.6 Equations de bilan local des milieux gazeux réactifs

**Tableau 1:** notions et définitions des termes utilisés

Grandeur	Espèce k	Mélange	Définition
<i>masse molaire</i>	$M_k$	$M$	Dans le cas où toutes les espèces ont la même masse molaire $M_k$ on $X_k = Y_k$
<i>masse</i>	$m_k$	$m = \sum_{k=1}^n m_k$	Masse de mélange dans le volume v
<i>fraction massique</i>	$Y_k = \frac{m_k}{m}$	$\sum_{k=1}^n Y_k = 1$	/
<i>masse volumique</i>	$\rho_k = \frac{m_k}{V} = Y_k \rho$	$\rho = \frac{m}{V}$	$\sum_{k=1}^n \rho_k = \rho$
<i>nombre de moles</i>	$X_k = \frac{m_k}{M_k}$	$N = \sum_{k=1}^n X_k$	/
<i>Nombre de moles par unité de masse</i>	$X_k^u = \frac{X_k}{m}$	$N^u = \sum_{k=1}^n X_k^u = \frac{N}{m}$	/
<i>fraction molaire</i>	$X_k = \frac{X_k}{N} = \frac{X_k^u}{N^u}$	$\sum_{k=1}^n X_k = 1$	$\left( X_k = \frac{Y_k/M_k}{\sum (Y_k/M_k)} \right)$
<i>vitesse</i>	$\vec{V}_k$	$\vec{V} = \sum_{k=1}^n Y_k \vec{V}_k$	$\vec{V} = \sum_{k=1}^n \frac{\rho_k}{\rho} \vec{V}_k$
<i>vitesse de diffusion</i>	$\vec{V}_{d,k} = \vec{V}_k - \vec{V}$	$\sum_{k=1}^n Y_k \vec{V}_{d,k} = 0$	La vitesse de diffusion est par définition c'est la différence entre $\vec{V}_k$ et $\vec{V}$
<i>densité de débit massique</i>	$\dot{m}_k = \rho_k \cdot \vec{V}_k \cdot \vec{n}$	$\dot{m} = \rho \vec{V} \cdot \vec{n}$	/
<i>température</i>	$T_k = T$	$T$	/

<i>pression</i>	$P_k (= X_k P)$	$P = \sum_{k=1}^n P_k$	Loi de Dalton
<i>enthalpie</i>	$H_k = U_k + P_k V$	$H = U + PV$	/
<i>enthalpie massique</i>	$h_k = U_k + \frac{P_k}{\rho Y_k}$	$h = \sum_{k=1}^n Y_k h_k = U + \frac{P}{\rho}$	/

## II.6.1 Equation thermodynamiques

### II.6.1.1 Équation d'état : $f_k(P_k, X_k, V, T) = 0$

Chaque espèce k est un gaz ; dont  $X_k$  moles à T et  $P_k$  occupent le volume V.

**Cas du gaz parfait :**  $P_k \cdot V = X_k \cdot R \cdot T$

$$P_k = r X_k^u R T = \rho_k \frac{R}{M_k} T$$

$$\left( r = \frac{R}{M_k} \right) \quad , \quad \left( \rho = \frac{m}{V} \right)$$

r : constant thermodynamique du gaz considère ( $r = 278 \text{ J} \cdot \text{Kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ ).

R : constant universelle des gaz parfaits ( $R = 8.315 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ ).

Si le mélange obéit à la loi de Dalton :  $P = \sum P_k$

$$P \cdot V = N \cdot R \cdot T \quad \Rightarrow \quad P = \rho \cdot N^u \cdot R T$$

(Le mélange est lui aussi un gaz parfait).

### II.6.1.2 Équation d'état énergétique

$$dh = C_p dT + \left( \frac{T}{\rho^2} \frac{\partial P}{\partial T} \right)_P + \frac{1}{\rho} dP$$

L'enthalpie est parfaitement définie si on connaît :

- La loi d'état du gaz.
- La capacité calorifique  $C_p (T, P, N^u(T, P))$

Cas du gaz parfait : ( $P = \rho \cdot N^u \cdot R \cdot T$ )

$$dh = C_p dT - \frac{1}{\rho} \left( \frac{\partial \ln N^u}{\partial \ln T} \right)_P dP$$

$$C_p - C_v = \frac{R}{M} \left( 1 + \frac{\partial \ln N^u}{\partial \ln T} \right)_V \left( 1 + \frac{\partial \ln N^u}{\partial \ln T} \right)_P$$

Gaz parfait sans dissociation :  $dh = C_p dT$

$$C_P - C_V = \frac{R}{M} \quad ; \quad C_P = \frac{\gamma}{\gamma-1} \frac{R}{M} = C^{te} \quad ; \quad C_V = \frac{1}{\gamma-1} \frac{R}{M} = C^{te}$$

Variation d'enthalpie entre l'état courant (T, P) et l'état de référence (T\*, P\*).

$$h_k(T, P) = \hat{h}_k + h_{F,k}^*$$

$\hat{h}_k$  : Variation d'enthalpie.

$h_{F,k}^*$  : Enthalpie de formation de l'espèce k à l'état T\*, P\*.

Pour un mélange :  $h = \sum Y_k h_k = \sum Y_k \hat{h}_k + \sum Y_k h_{F,k}^*$

Soit  $h = \hat{h} + h_F^*$

Pour calculer la variation d'enthalpie  $\hat{h}$  il faut intégrer l'équation d'état  $dh = dh(T, P)$  compte tenu de la loi d'état et celle du mélange.

## II.7. Flux et densité de flux d'une grandeur extensive B

- B directement proportionnelle à la masse de matière considérée.

- b grandeur intensive associée.  $\mathbf{B} = \mathbf{m} \mathbf{b}$

**Cas d'un mélange :**

$$B_K = m_k b_k$$

$$B = \sum B_K$$

$$b = \sum Y_K b_k$$

Densité de flux de B à travers S : quantité de B qui traverse de surface dS par unité de temps.

$$\dot{B} = \frac{\partial B}{\partial s \partial t} = \rho b \vec{w} \cdot \vec{n}$$

Flux de B à travers S : quantité de B qui traverse S par unité de temps.

$$\Phi_B = \frac{\partial B}{\partial t} = \iint_S \rho b \vec{w} \cdot \vec{n} ds$$

**Cas de la masse :**

- Fluide seul :  $b = 1$  et  $B = m$   
 $\dot{m} = \rho \vec{W} \cdot \vec{n}$  ( $= \rho \vec{V} \cdot \vec{n}$  si S fix)
- Espèce k en mélange :  $b = Y_k$  et  $B = m_k$   
 $\dot{m}_k = \rho Y_k \vec{V}_k \cdot \vec{n}$

$$\vec{V}_k = \vec{V} + \vec{V}_{d,k} \Rightarrow \dot{m}_k = \underbrace{Y_k \dot{m}}_{\text{flux convectif}} + \underbrace{\rho Y_k \vec{V}_{d,k} \cdot \vec{n}}_{\text{flux diffusif}}$$

- Mélange :

$$\dot{m} = \sum_{k=1}^n \dot{m}_k$$

$$\dot{m} = \sum_{k=1}^n \rho Y_k \vec{V}_k \cdot \vec{n} = \rho \vec{V} \cdot \vec{n}$$

### Cas d'une grandeur extensive B :

- Espèce k en mélange

$$\begin{aligned} B_k = m_k b_k &\Rightarrow \dot{B}_k = \dot{m}_k b_k = b_k \rho Y_k \vec{V}_k \cdot \vec{n} \\ \dot{B}_k &= b_k Y_k \dot{m} + b_k \rho Y_k \vec{V}_{d,k} \cdot \vec{n} \\ &= \dot{B}_{c,k} + \dot{B}_{d,k} \end{aligned}$$

- Mélange

$$\begin{aligned} \dot{B} &= \sum_{k=1}^n \dot{B}_k = \sum_{k=1}^n \dot{B}_{c,k} + \sum_{k=1}^n \dot{B}_{d,k} \\ \dot{B}_c &= \dot{m} b = b \rho \vec{V} \cdot \vec{n} \\ \dot{B}_d &= \rho \sum_{k=1}^n b_k Y_k \vec{V}_{d,k} \cdot \vec{n} \end{aligned}$$

- Grandeur vectorielle

$$\vec{\dot{B}} = \rho \vec{b} (\vec{V} \cdot \vec{n}) = \rho (\vec{b} \otimes \vec{V}) \vec{n}$$

## II.8 Structure générale d'une équation de bilan local :

### II.8.1 Formulation générale :

Volume V, S,  $\vec{n}$  positive orientée vers l'extérieur.

Bilan de la grandeur extensive B dans un volume fixe (de surface S) par rapport à un repère « laboratoire » (Euler) :

$$\underbrace{\frac{\partial B}{\partial t}}_{\text{Taux de variation de B dans } \Delta} = \underbrace{- \int_S \dot{B} dS}_S_{\text{Flux de B à travers S}} + \underbrace{\left( \frac{\partial B}{\partial t} \right)_{prod}}_{\text{Production de B dans } \Delta (\dot{M} \text{ cte})} \quad (1)$$

## II.8.2 Etude des trois termes de la relation

### a. taux de variation

$$\frac{\partial B}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \left( \int_v \rho b \, dv \right) = \int_v \frac{\partial(\rho b)}{\partial t} \, dv$$

Si le domaine vêtait mobile à la vitesse  $\vec{D}$ , il apparait 1 terme convectif  $\int_s \rho b \vec{D} \vec{n} \, ds$

### b. terme de flux diffusif

La densité de flux  $\dot{B}$  d'un mélange :  $\dot{B}_C + \dot{B}_D = \rho b \vec{V} \vec{n} + \sum \rho Y_k b_k V_{D,k}$

On appelle vecteur densité de flux diffusif le terme  $\vec{B}_D = \sum \rho Y_k b_k \vec{V}_{D,k} = \vec{\varphi}_{D,k}$

$$- \int_s \dot{B} \, ds = - \int_s (\rho \vec{V}_b + \vec{\varphi}_{D,B}) \vec{n} \, ds = - \int_v \text{div}(\rho b \vec{V}) \, dv - \int_v \text{div} \vec{\varphi}_{D,k} \, dv$$

### c. taux de production

La production se fait à masse constant ( $\rho$  constant)

$$\left( \frac{\partial B}{\partial t} \right)_{prod} = \frac{\partial}{\partial t} \int_v (\rho b)_{prod} \, dv = \int_v \frac{\partial(\rho b)}{\partial t} \Big|_{prod} \, dv = \int_v \rho \frac{\partial b}{\partial t} \Big|_{prod} \, dv$$

Notation  $b^* = \left( \frac{\partial b}{\partial t} \right)_{prod}$  donc  $\left( \frac{\partial B}{\partial t} \right)_{prod} = \int_v \rho b^* \, dv$

## II.8.3 Formulation locale de l'équation de bilan

$$\int_v \frac{\partial(\rho b)}{\partial t} \, dv = - \int_v \text{div}(\rho b \vec{V} + \vec{\varphi}_{D,B}) \, dv + \int_v \rho \frac{\partial b}{\partial t} \Big|_{prod} \, dv$$

Ceci est valable quelque soit le volume ( $v$ ).

$$\frac{\partial(\rho b)}{\partial t} + \text{div}(\rho b \vec{V}) + \text{div}(\vec{\varphi}_{D,B}) = \rho \frac{\partial b}{\partial t} \Big|_{prod} = \rho b^*$$

### N.B :

- Les termes de diffusion et de production dépendent des «lois phénoménologiques» régissant le mélange considéré.
- Dimension : le terme intensif  $b$  est relatif à l'unité de masse, donc  $\rho b$  à l'unité de volume de même que  $\text{div}(\vec{\varphi}_{D,B})$  et la production  $\rho b^*$
- Dans le cas où le terme intensif vectoriel  $\vec{b}$ , on obtient une équation de bilan analogue avec pour un de convection  $\text{div}(\rho \vec{b} \otimes \vec{V})$  et pour terme de diffusion le vecteur  $\overrightarrow{\text{div}} \underbrace{(\vec{\varphi}_{D,B})}_{\text{tenseur}}$
- Cette formulation est valable pour une grandeur extensive  $B$  et non partielle  $B_k$
- En introduisant la dérivée particulière  $\frac{D}{Dt} \left( = \frac{d}{dt} \right)$  on obtient :

$$\underbrace{\frac{D(\rho b)}{Dt}}_{\text{variation local}} + \underbrace{div(\rho b \vec{V})}_{\text{flux convectif}} + \underbrace{div \vec{\varphi}_{D,B}}_{\text{flux diffusif}} = \underbrace{\rho b^*}_{\text{terme source}} \quad (2)$$

### II.8.4 Nouvelle forme de l'équation de bilan :

$$\left(\rho \frac{\partial b}{\partial t} + b \frac{\partial \rho}{\partial t}\right) + \left(b \operatorname{div}(\rho \vec{V})\right) + \rho \vec{V} \cdot \overrightarrow{\operatorname{grad} b} + \operatorname{div} \vec{\varphi}_{D,B} = \rho b^*$$

Qui se réduit à

$$\rho \frac{\partial b}{\partial t} + \rho \vec{V} \cdot \overrightarrow{\operatorname{grad} b} + \operatorname{div} \vec{\varphi}_{D,B} = \rho b^* \quad (\text{Conservation de masse})$$

$$\text{Dérivée particulière : } \frac{D}{Dt} = \underbrace{\frac{\partial}{\partial t}}_{\text{dérivée local}} + \underbrace{\vec{V} \cdot \overrightarrow{\operatorname{grad}}}_{\text{dérivée convective}}$$

$$\rho \frac{Db}{Dt} + \operatorname{div} \vec{\varphi}_{D,B} = \rho b^* \quad (3)$$

## II.9 Application des lois de bilan :

### II.9.1 Bilan de masse global (continuité)

Posons  $b = 1$  donc  $B = \int b \, dm = m$  (masse mélange)

$$\vec{\varphi}_{D,B} = \vec{m}_d = \sum_{k=1}^n \rho b_k Y_k \vec{V}_{d,k} = \vec{0} \quad \text{Avec } (b_k = 1)$$

$b^* = 0$  (Pas de production de masse de mélange),  $b^* = \left(\frac{\partial b}{\partial t}\right)_{\text{prod}}$

$$\Rightarrow \frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \vec{V}) = 0 \quad (4)$$

Ecoulement 1D plan stationnaire :  $\frac{\partial}{\partial x}(\rho V) = 0 \quad \Rightarrow \dot{m} = c^{\text{te}}$

### II.9.2 Bilan de masse d'une espèce k

Cas général : posons  $b = Y_k \quad B = m_k$

$\vec{\varphi}_{d,B} = \rho Y_k \vec{V}_{d,k}$  : Flux de k par diffusion

$\rho b^* = \omega_k$  : Taux volumique de production de k par réaction chimique

$\sum \omega_k = 0$  :

$$\rho \frac{\partial Y_k}{\partial t} + \rho \vec{V} \cdot \overrightarrow{\operatorname{grad} Y_k} + \operatorname{div}(\rho Y_k \vec{V}_{d,k}) = \omega_k \quad (5)$$

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho Y_k \vec{V}) + \operatorname{div}(\rho Y_k \vec{V}_{d,k}) = \omega_k$$

Ecoulement 1D plan stationnaire :  $\frac{d}{dx}(\rho Y_k \vec{V}) = \omega_k \Rightarrow \dot{m} \frac{d\varepsilon_x}{dx} = \omega_k$

Diffusion d'une espèce sans réaction chimique (1D stationnaire) :

$$V_{d,k} = -\frac{D}{Y_k} \frac{\partial Y_k}{\partial x} \quad (\text{Loi de Fick en monodimensionnelle})$$

$$\omega_k = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{\dot{m}}{\rho D} Y_k - \frac{dY_k}{dx} = C^{te} \quad (\text{intégrable car } \dot{m} = C^{te})$$

K : constituant

### II.9.3 Bilan de quantité de mouvement

$$\begin{aligned} \vec{b}_k &= \vec{V}_k & \vec{b} &= \sum_{k=1}^n Y_k \vec{V}_k = \vec{V} & \vec{B} &= m\vec{V} \\ \Rightarrow \rho \frac{\partial \vec{V}}{\partial t} + \rho(\overline{\text{grad}} \vec{V})\vec{V} + \overline{\text{div}}\overline{\Phi}_{d,B} &= \overline{\rho b^*} \end{aligned} \quad (6)$$

**Terme de diffusion :**

$$\overline{\Phi}_{d,B} = \overline{P} = \overline{P}I + \overline{\tau} \quad \text{Tenseur des contraintes (fluides newtonien)}$$

$$\overline{\tau} = 2\mu\overline{D} + \eta\text{div}\vec{V}\vec{I} \quad \text{Tenseur des contraintes visqueuses}$$

$$\overline{D} = \frac{1}{2}(\overline{\text{grad}} \vec{V} + \overline{\text{grad}}_T \vec{V}) \quad \text{Tenseur des taux de déformation}$$

$$k = \eta + \frac{2}{3}\mu = 0 \quad \text{Hypothèse de lamé on de stokes}$$

**Terme source :**

$$\overline{\rho b^*} = \rho \left( \frac{\partial \vec{V}}{\partial t} \right)_{pr} = \rho \frac{\partial}{\partial t} \sum_{k=1}^n Y_k (\vec{V}_k)_{pr} = \rho \sum_{k=1}^n Y_k \underbrace{\left( \frac{\partial \vec{V}_k}{\partial t} \right)_{pr}}_{=0} + \rho \sum_{k=1}^n \left( \frac{\partial Y_k}{\partial t} \right)_{pr} \vec{V}_k = \rho \sum_{k=1}^n Y_k \vec{f}_k$$

$$\text{Avec : } \vec{f}_k = \left( \frac{\partial \vec{V}_k}{\partial t} \right)_{pr} \quad \text{et} \quad \sum_{k=1}^n \omega_k \vec{V}_k = \vec{0}$$

$f_k$  : Force extérieure appliquée à l'unité de masse de l'espèce k

$$\vec{f}_k = \vec{f} \quad (\text{Pesanteur}) \quad \Rightarrow \quad \sum_{k=1}^n Y_k \vec{f}_k = \vec{f}$$

$$\underbrace{\rho \frac{\partial \vec{V}}{\partial t} + \rho \overline{\text{grad}} \vec{V} \vec{V} + \overline{\text{grad}} P + \overline{\text{div}}(\eta \text{div} \vec{V} \vec{I} + 2\mu \overline{D})}_{\text{Navier-Stokes}} = \sum_{k=1}^n \rho Y_k \vec{f}_k \quad (7)$$

**En combustion :**

Fluide non visqueuse :  $\mu = \eta = 0$

Pas de force extérieure :  $f = 0$

$$\rho \frac{\partial \vec{V}}{\partial t} + \rho \overline{\text{grad}} \vec{V} \vec{V} + \overline{\text{grad}} P + \underbrace{\overline{\text{div}}(\eta \text{div} \vec{V} \vec{I} + 2\mu \overline{D})}_{=0} = \underbrace{\sum_{k=1}^n \rho Y_k \vec{f}_k}_{=0} \quad (8.a)$$

Donc égal :

$$\underbrace{\rho \frac{\partial \vec{V}}{\partial t} + \rho \overline{\text{grad}} \vec{V} \vec{V} + \overline{\text{grad}} P}_{\text{Euler}} = \vec{0} \quad (8.b)$$

## II.9.4 Bilan d'énergie

$$\underbrace{e_t}_{\text{total}} = \underbrace{u}_{\text{interne}} + \underbrace{e_c}_{\text{cinétique}} + \underbrace{e_p}_{\text{potentielle}}$$

### Energie interne $u$

On pose  $b = u$        $B = m u$

$$\Rightarrow \rho \frac{Du}{Dt} + \text{div} \vec{\Phi}_{d,u} = \rho u^* \quad (9)$$

### Energie cinétique $e_c$

$$b = \frac{V^2}{2} \quad B = m \frac{V^2}{2}$$

$$\Rightarrow \rho \frac{De_c}{Dt} + \text{div}(\overline{P} \vec{V}) = \overline{P} : \overline{\text{grad}} \vec{V} + \sum_{k=1}^n \rho_k \vec{f}_k \vec{V} \quad (10)$$

### Energie potentielle $e_p$

$$b = e_p \quad B = m e_p$$

La force extérieure  $\vec{f}$  appliquée à l'unité de masse du système dérive d'une fonction  $e_p$ , indépendantes du temps  $\vec{f} = -\overline{\text{grad}} e_p$  (dérivée d'une potentiel)

$$\frac{De_p}{Dt} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{V} \overline{\text{grad}} e_p \quad (\text{car } \frac{\partial e_p}{\partial t} = 0)$$

$$\vec{V} \vec{f} = -\vec{V} \text{grad}_{e_p} = -\frac{De_p}{Dt}$$

$$\text{Elle se réduit à : } \rho \frac{De_p}{Dt} = -\rho \vec{V} \cdot \vec{f} \quad (11)$$

### Energie totale $e_t$

$$b = e_t \quad B = m e_t$$

La production de l'énergie totale est nulle, d'après le 1<sup>er</sup> principe de la thermodynamique.

Grandeur conservative :  $e_t^* = 0$



Il résulte :

$$u^* + e_c^* + e_p^* = 0 \implies \rho u^* + \bar{P} : \overline{\text{grad}} \vec{V} + \rho \vec{V} \vec{f} - \rho \vec{V} \vec{f} = 0$$

D'où la valeur de la production :

$$\rho \frac{Du}{Dt} + \text{div} \Phi_{d,u} = -\bar{P} : \overline{\text{grad}} \vec{V} \quad (12)$$

### Enthalpie $h$

$$b = h \quad B = mh$$

$$u = h - \frac{P}{\rho} \quad \text{soit} \quad \frac{Du}{Dt} = \frac{Dh}{Dt} - \frac{1}{\rho} \frac{DP}{Dt} + \frac{P}{\rho^2} \frac{D\rho}{Dt} \quad (\text{Conservation de masse})$$

$$\frac{D\rho}{Dt} = -\rho \text{div} \vec{V} \quad ; \quad \frac{Du}{Dt} = \frac{Dh}{Dt} - \frac{1}{\rho} \frac{DP}{Dt} - \frac{P}{\rho} \text{div} \vec{V}$$

D'où le bilan d'entropie :

$$\rho \frac{Dh}{Dt} - \frac{DP}{Dt} - P \text{div} \vec{V} + \text{div} \vec{\Phi}_{d,u} = -\bar{P} : \overline{\text{grad}} \vec{V}$$

$$(\text{Avec } \bar{P} = P \bar{I} + \bar{\tau})$$

$$\implies \rho \frac{Dh}{Dt} + \text{div} \vec{\Phi}_{d,u} = \frac{DP}{Dt} - \bar{\tau} : \overline{\text{grad}} \vec{V} \quad (13)$$

### II.9.5 Terme de flux diffusif

$\vec{\Phi}_{d,u} = \vec{q}$  : C'est un terme de flux de chaleur

$$\begin{cases} \vec{q}_1 = -\lambda \overline{\text{grad}} T & (\text{diffusion de chaleur}) \\ \vec{q}_2 = \sum_{k=1}^n \vec{\Phi}_{d,mk} h_k = \rho \sum_{k=1}^n Y_k h_k \vec{V}_{d,k} & (\text{diffusion de matière}) \end{cases}$$

Cas d'un écoulement stationnaire, non visqueux, à faible vitesse (subsonique), sans forces extérieures.

L'écoulement dans l'étude des flammes hypothèses :  $\partial/\partial t = 0$ ,  $f_k = 0$ ,  $\mu = \eta = 0$

Les équations de bilan :

$$\text{div} \rho \vec{V} = 0 ; \quad \rho \overline{\text{grad}} \vec{V} \vec{V} + \overline{\text{grad}} P = 0$$

$$\text{div} \rho Y_k \vec{V}_k = \omega_k ; \quad \rho \vec{V} \cdot \overline{\text{grad}} h + \text{div}(-\lambda \overline{\text{grad}} T + \sum_{k=1}^n \rho Y_k h_k \vec{V}_{d,k}) = \vec{V} \cdot \overline{\text{grad}} P$$

$$P + \rho V^2 = C^{te} \quad \text{Avec} \quad \rho V^2 = \rho a^2 M^2 = M^2 \gamma P \ll P$$

$$M = \frac{a}{V} = \sqrt{\gamma r T} : \text{Nombre de Mach}$$

$$(M \ll 1)$$

L'équation se réduit à  $P = C^{te}$  une flamme est subsonique et quasi –isobare

## II.10 Relations phénoménologiques terme de flux et de production

L'écriture des équations de bilan reste incomplète si on ne précise pas l'expression du terme densité de flux diffusif et du terme de production :

Il faut connaître pour les flux :

- Flux de masse  $\vec{m}_{D,k}$
- Tenseur de quantité de mouvement  $\bar{P}$
- Flux de chaleur  $\vec{q}$

Pour la production, terme de production chimique  $\omega_k$  l'expression de ces termes dépend de la nature physique du phénomène considéré. et les expressions sont dites « phénoménologiques ».

### II.10.1 Terme de flux

Au voisinage de l'équilibre thermique les densités de flux des grandeurs extensives sont des fonctions linéaires des 'forces généralisées' constituées par des gradients des termes intensifs ( $Y_k, P, h, T$ ) et des forces appliquées au système.

Le couplage 'flux-force' n'est possible que pour des grandeurs de même nature respectivement scalaire, vecteur et tenseur.

Il en résulte :

Densité de flux de masse de k  $\vec{\Phi}_{D,k} = \dot{m}_{D,k}$  est fonction gradient.

- Fraction massique (loi de Fick).
- Pression (Baro – diffusion).
- Température (effet Soret).

Les deux effets sont en général négligeables:

- ✓ effet Soret : contribution de la diffusion de la chaleur au transfert de masse.
- ✓ effet Dufour : contribution de la diffusion de la matière aux transferts thermiques.

La densité de flux de quantité de mouvement  $\bar{P}$  est un tenseur s'exprime en fonction de  $\overline{\text{grad}} \vec{V}$  chaque élément du tenseur par rapport  $\frac{\partial v_j}{\partial x_i}$  effet direct (loi de Newton).

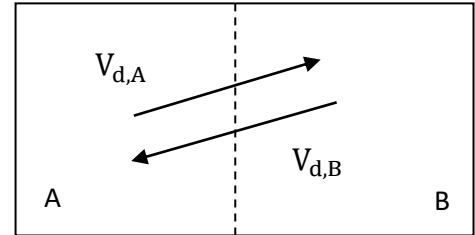
La densité de flux d'énergie est fonction des gradients.

- Fraction massique (effet Dufour).
- Température (effet direct- loi de Fourier).
- La diffusion d'enthalpie due à la diffusion de matière.
- Du flux rayonné.

## II.10.2 diffusion de la masse

Mise en évidence expérimentale.

Deux gaz initialement à la repose en supprimant la Cloison (l'ensemble reste à la repose  $\vec{V} = 0$ ) il ya un Mélange progressif des deux gaz donc de diffusion Des espèces ( $\vec{V}_k \neq 0, \vec{V}_{D,k} \neq 0$ ).



### Equation de diffusion :

On calcul  $\vec{V}_{D,k}$  de k dans le mélange en écrivant le bilan de quantité de mouvement, avec les hypothèses :

- gaz parfait, non visqueux ( $\mu = \eta = 0$ ).
- diffusion thermique négligée (effet Soret),
- indépendance des espèces dans le mélange les unes par rapport aux autres (loi de Dalton).

Bilan de quantité de mouvement appliqué à l'espèce k :

$$\rho Y_k \frac{D\vec{V}}{Dt} + \text{div} P_k \vec{\bar{I}} = \rho \vec{b}^*$$

$$\rho \vec{b}^* = \rho Y_k \vec{f}_k + \underbrace{\sum_{i \neq k} v_{ki} M_{ki} (\vec{V}_{di} - \vec{V}_{dk})}_{\text{théorie cinétique des gaz}}$$

$v_{ki}$  : Fréquence de collision

$M_{ki}$ : Masse molaire réduite du couple i, k

$$M_{ki} = \frac{M_i M_k}{M_i + M_k}$$

Bilan de quantité de mouvement appliqué au mélange :

$$\rho \frac{D\vec{V}}{Dt} + \text{div} P \vec{\bar{I}} = \sum_{i=1}^n \rho Y_i \vec{f}_i$$

En remarquant que :

$$\text{div} P_k \vec{\bar{I}} = \text{grad} P_k = X_k \text{grad} P + P \text{grad} X_k$$

$$\sum_{i=1}^n Y_k Y_i \vec{f}_i - \vec{f}_k = \sum_{i=1}^n Y_k Y_i (\vec{f}_i - \vec{f}_k)$$

On obtient l'expression de l'équation de diffusion de la masse :

$$\overrightarrow{\text{grad}}X_k = \sum_{i=1}^n \frac{X_i X_k}{D_{i,k}} (\overrightarrow{V}_{d,i} - \overrightarrow{V}_{d,k}) + \frac{Y_k - X_k}{P} \overrightarrow{\text{grad}}P + \frac{\rho}{P} \sum_{i=1}^n Y_i Y_k (\overrightarrow{f}_k - \overrightarrow{f}_i)$$

Coefficient de diffusion binaire :  $D_{i,k} = \frac{X_i X_k P}{v_{ki} M_{ki}}$

### Loi de Fick

Pour simplifier cette équation, on se place dans le cas où :

- La pression est constante  $\overrightarrow{\text{grad}}P = 0$ .
- L'effet Soret est négligeable.
- Les force extérieurs, toutes identique (pesanteur).

$$-\frac{D}{Y_k} \overrightarrow{\text{grad}}Y_k = \overrightarrow{V}_{d,k}$$

**Tableau II.2:** Propriétés du coefficient de diffusion massique

- $[D] = L^2 T^{-1} (m^2 S^{-1})$
- Les coefficients  $D_{i,j}$  sont fonction de P, T, composition (masse réduite) du mélange.
- $D \propto P^{-1}$
- $D \propto T^{3/2}$

T(k)	300	600	1000
D(CH <sub>4</sub> - O <sub>2</sub> )	0,23 10 <sup>-4</sup>	0,8 10 <sup>-4</sup>	1,95 10 <sup>-4</sup>
D(H <sub>4</sub> - O <sub>2</sub> )	0,82 10 <sup>-4</sup>	2,88 10 <sup>-4</sup>	5,79 10 <sup>-4</sup>

- $D \propto M_i, M_k$

i, j	N <sub>2</sub> - CO <sub>2</sub>	N <sub>2</sub> - H <sub>2</sub>	N <sub>2</sub> - He	H <sub>2</sub> O - H <sub>2</sub>	CH <sub>4</sub> - N <sub>2</sub>
D <sub>i,j</sub>	0,17 10 <sup>-4</sup>	0,78 10 <sup>-4</sup>	0,69 10 <sup>-4</sup>	0,99 10 <sup>-4</sup>	0,16 10 <sup>-4</sup>

### II.10.3 diffusion de la quantité de mouvement

Densité de flux diffusif de quantité de mouvement : tenseur des contraintes

Contrainte tangentielle ou de cisaillement : force surfacique s'exerçant selon Ox sur le plan perpendiculaire à Oy.

Loi de Newton :  $\tau_{x,y} = -\mu \frac{\partial V_x}{\partial y}$        $\mu$  : coefficient de viscosité dynamique

Généralisation :  $\bar{P} = P\bar{I} - 2\mu \bar{D} + \eta \operatorname{div} \bar{V}$

Contrainte à la paroi :  $\vec{t}_p = \bar{P}\vec{y} = P\vec{y} - \mu \frac{\partial V_x}{\partial y} \vec{x}$

Loi de Sutherland :  $\frac{\mu}{\mu_0} = \sqrt{\frac{T}{T_0}} \frac{1+C/T_0}{1+C/T}$

C : constante de Sutherland (111K pour l'air à température modérée).

### II.10.4 diffusion de l'énergie

Densité de flux diffusif d'énergie interne :  $\vec{\Phi}_{d,u} = \vec{q} = \sum \vec{q}_i$

$\vec{q}_1$  : Gradient de température dans un milieu au repos.

Loi de Fourier de la conduction :  $\vec{q}_1 = -\lambda \overrightarrow{\operatorname{grad}} T$

$\vec{q}_2$  : Diffusion de la matière.

$$\vec{q}_2 = \sum_{k=1}^n \vec{m}_{d,k} h_k = \rho Y_k \vec{V}_{d,k} h_k = - \sum_{k=1}^n \rho D h_k \overrightarrow{\operatorname{grad}} Y_k$$

$\vec{q}_3$  : Gradient de fraction massique (effet Dufour), négligé.

$\vec{q}_4$  : Rayonnement, négligé sauf dans le cas des flammes très lumineuses (particules de charbon, suies, etc.)

Évaluation de  $\lambda$  pour un gaz unique (formule d'Eucken) :  $\lambda = \frac{9\gamma-5}{4} \mu C_V$  ;  $\gamma = \frac{C_P}{C_V}$

Pour le nombre de Prandtl :  $P_r = \frac{\mu C_P}{\lambda} = \frac{4\gamma}{9\gamma-5}$

Pour un gaz diatomique :  $\gamma = 1,4$  ;  $P_r = 0,75$

### II.10.5 forme unifiée des équations de transport

Densité de flux diffusif de B (m, mV, H) :

$$\vec{\Phi}_{d,b} = -D \overrightarrow{\operatorname{grad}} b \quad \text{Avec : } [D] = \text{ML}^{-1}\text{T}^{-1} = \text{kg m}^{-1}\text{S}^{-1}$$

D : Coefficient de transfert généralisé de la grandeur extensive B.

Grandeur		Loi de flux			Coefficient de transfert généralisé
Extensive	Intensive	Densité de flux	Classique	Généralisée	
B	b	$\vec{\varphi}_{D,B}$		$-D \overrightarrow{\text{grad}} b$	D
$m_k$	$Y_k$	$\dot{m}_{D,k}$	$-\rho D \overrightarrow{\text{grad}} Y_k$	$-D_m \overrightarrow{\text{grad}} Y_k$	$D_m = \rho D$
$mV_x$	$V_x$	$\tau_{x,y}$	$-\mu \frac{\partial V_x}{\partial y}$	$-D_m V \frac{\partial V_x}{\partial y}$	$D_m V = \mu$
H	H	$\dot{q}_1$	$-\frac{\lambda}{C_p} \overrightarrow{\text{grad}} h$	$-D_h \overrightarrow{\text{grad}} h$	$D_h = \lambda / C_p$

Nombres sans dimension : rapports des coefficients de transport généralisés.

⇒ influence respective des phénomènes de transfert mis en jeu.

Diffusion dans un milieu inerte, au repos avec  $\rho D = C^{te} \Rightarrow \frac{\partial Y_k}{\partial t} = D \Delta Y_k$

Conduction de la chaleur  $\Rightarrow \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\lambda}{\rho C_p} \Delta T$

⇒  $L_e = \frac{\lambda}{\rho C_p D}$  (diffusion de masse / diffusion thermique)

Hypothèse fréquente :  $L_e = 1$

Nombre de	Définition	Valeur
Lewis	$\frac{D_h}{D_m} = \frac{\lambda / C_p}{\rho D}$	$L_e = \frac{\lambda}{\rho C_p D}$
Prandtl	$\frac{D_m V}{D_h} = \frac{\mu}{\lambda / C_p}$	$P_r = \frac{\mu C_p}{\lambda}$
Schmid	$\frac{D_m V}{D_m} = \frac{\mu}{\rho D}$	$S_c = \frac{\mu}{\rho D} = L_e \cdot P_r$

## II.10.6 Termes de production

### ✓ Concentration molaire $C_k$

Nombre de moles de l'espèce k (unité de volume de mélange en gaz parfait).

$$C_k = \frac{X_k}{V} \left( = X_k \frac{P}{RT} \right) \quad (\text{en mol m}^{-3})$$

### ✓ Vitesse de réaction chimique $V_r$

Nombre de moles de l'espèce k produites (à n k près) par unité de volume et de temps.

$$V_r = \frac{1}{v_{kr}} \frac{1}{V} \frac{\partial X_k}{\partial t} \quad (\text{en mol m}^{-3} \text{s}^{-1})$$

$$\frac{\partial C_k}{\partial t} = \frac{1}{V} \frac{\partial X_k}{\partial t} + X_k \frac{\partial (1/V)}{\partial t} = v_k V_r + X_k \frac{\partial (1/V)}{\partial t}$$

$$\Rightarrow V_r = \frac{1}{v_k} \frac{\partial C_k}{\partial t} \quad \text{Si } (V=C^{\text{te}})$$

### ✓ Degré d'avancement $\lambda$

Soit une réaction non réversible défini par un état initiale 0 (mélange ne contient que des réactifs) et un état final b (mélange ne contient que des produits brulés) et un état interne.

Soit  $Y_{k0}$  ;  $Y_{kb}$  et  $Y_k$  par définition :

$$\lambda = \frac{Y_k - Y_{k0}}{Y_{kb} - Y_{k0}}$$

Qu'ou peut écrire autrement :

$$\lambda = \frac{X_k - X_{k0}}{X_{kb} - X_{k0}} \quad \text{Ou} \quad \lambda = \frac{C_k - C_{k0}}{C_{kb} - C_{k0}} \quad (\text{si } V = \text{constant pendant la réaction})$$

$$Y_k = \frac{M_k}{m} X_k = M_k X_k^U \quad \text{Et} \quad C_k = \frac{X_k}{V}$$

Si k est le réactif pauvre, la réaction s'arrête lorsqu'il est consommé.

$$\Rightarrow Y_{kb} = 0$$

$$\Rightarrow \lambda = 1 - \frac{Y_k}{Y_{k0}}$$

### Taux de production massique $\omega_k$

$$\omega_k = \frac{\partial^2 m_k}{\partial V \partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{\partial m_k}{\partial V} \right) = \frac{\partial}{\partial t} \left( Y_k \frac{\partial m}{\partial V} \right)$$

$$\omega_k = \rho \left( \frac{\partial Y_k}{\partial t} \right)_{\text{prod}}$$

$$V_r = \frac{1}{v_k M_k V} \frac{\partial m_k}{\partial t} \quad \text{Et} \quad m_k = Y_k m$$

$$\text{On en déduit : } \omega_k = \left( \frac{M_k \partial X_k}{V \partial t} \right)_{prod} = v_k M_k V_r$$

### **Loi d'action de masse**

La vitesse des réactions est liée à la concentration des espèces réactives par loi.

Pour une réaction élémentaire :

$$\frac{1}{v_{ir}} \frac{dC_i}{dt} = K_{rd} \prod_{k=1}^n C_k^{v'_{kr}} = V_r$$

$K_{rd}$ : Constante de vitesse (sans direct)

$v'_{kr}$ : Ordre par rapport à K

$\sum v'_{kr}$ : Ordre global de la réaction

Si la réaction est réversible :

$$\Rightarrow V_r = V_{rd} - V_{ri} = K_{rd} \prod_{k=1}^n C_k^{v'_{kr}} - K_{ri} \prod_{k=1}^n C_k^{v''_{kr}}$$

À l'équilibre :  $V_r = 0$

**Constante d'équilibre  $K_c$**

$$K_c = \frac{K_{rd} \prod_{k=1}^n C_{k, \text{éq}}^{v''_{kr}}}{K_{ri} \prod_{k=1}^n C_{k, \text{éq}}^{v'_{kr}}} = \prod_{k=1}^n C_{k, \text{éq}}^{v_{kr}}$$

(Équilibre thermodynamique et chimique)

### **Loi d'Arrhenius**

La constante de réaction est donnée par la loi d'Arrhenius (justifiée par la théorie cinétique) d'une manière générale :

$$K_{rd} = B T^\alpha \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right)$$

$B T^\alpha$ : Terme pré exponentiel ( $B \propto 10^{10} - 10^{20}$ )

$\alpha$  : Facteur (empirique) d'ajustement (-3 à 0)

$E_a$  : Energie d'activation (2.5 à 50 kJmol<sup>-1</sup>)

D'où l'expression de  $V_{rd}$  (réaction globale)



$$V_{rd} = BT^\alpha \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) \prod_{k=1}^n C_k^{v_{kr}}$$

$V_{ri}$  Et  $K_{ri}$  sont obtenues à l'aide de  $K_c$

### **Taux de production massique de k**

**Pour une seule réaction :**  $\omega_{kr} = M_k v_{kr} V_r$

**Pour R réaction :**  $\omega_k = \sum_{r=1}^R \omega_{kr}$

D'où l'écriture la plus générale, pour un gaz parfait :  $\omega_k = \sum_{r=1}^R M_k v_{kr} V_r$

Avec :

$$V_r = B_r T^{\alpha_r} \left[ \prod_{k=1}^n \left(\frac{X_k P}{RT}\right)^{v_{kr}} - \frac{1}{K_c} \prod_{k=1}^n \left(\frac{X_k P}{RT}\right)^{v_{kr}'} \right] \exp\left(-\frac{E_{a,r}}{RT}\right)$$

( $C_k$  a été remplacé par  $\frac{X_k P}{RT}$ )

**Pour une réaction globale :**



$$V_r = \frac{1}{v_{ir}} \frac{dC_i}{dt} = K \prod_{\text{reactifs}} C_k^{\alpha_{kr}} = BT^\alpha \prod_{\text{reactifs}} C_k^{\alpha_{kr}} \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right)$$

$\alpha_{kr} \neq v_{kr}'$  : Ordre apparent de la réaction par rapport à l'espèce K.

$\sum \alpha_{kr} = n$  Ordre global de la réaction

$n \neq 1 + \nu$       $\alpha_C \neq 1$       $\alpha_{Ox} \neq \nu$

En général,  $n \approx 2$  pour la réaction d'oxydation d'un combustible.

**Cas simple : R → P**

**Ordre n = 1**

$$Y_P = 1 - Y_R \quad , \quad M_P = M_R \quad \Rightarrow \quad X_k = Y_k$$

$$v_R = -1 \quad v_P = 1 \quad , \quad \frac{M_P P}{RT} = \rho$$

$$\omega_P = BT^\alpha \rho (1 - Y_P) \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right)$$

**Enthalpie de réaction**

Bilan d'enthalpie entre les produits initiaux (température  $T_0$ ) et finaux (température  $T_{ad}$ ):  $h_R^{T_0} = h_P^{T_{ad}}$

$Q_m^* = -\Delta_r h^*$ : Quantité de chaleur dégagée par combustion (à l'état de référence \*) par unité de masse de mélange.

$$h_R^{T^*} = h_P^{T^*} + Q_m^*$$

En introduisant l'enthalpie de formation  $h_{f,R}^*$  (à  $T^*$ ) de l'espace K :

$$h_K^T = h_{f,k}^* + \int_{T^*}^T C_{P,k} dT \Rightarrow h_{f,R}^* = h_{f,P}^* + Q_m^*$$

$$h_R^{T_0} = h_P^{T_{ad}} - Q_m^*$$

Si  $C_p = C^{te}$  (indépendant de la composition et de la température):  $Q_m^* = C_p(T_{ad} - T_0)$

## II.11 Flammes de diffusion

### II.11.1 les équations de shvab et zeldovich

Pour tout type de flamme (diffusion ou prémélange), les équations de conservation se simplifient en faisant les hypothèses suivantes :

- Régime stationnaire et laminaire ( $\partial/\partial t = 0$ )
- Ecoulement non visqueux ( $\mu = 0$ )
- Pas de forces extérieures,  $\vec{f} = \sum Y_k \vec{f}_k = 0$
- Ecoulement très subsonique ( $M \ll 1 \Rightarrow P = C^{te}$ )
- Capacité calorifique et coefficient de diffusion identique et constantes  $\forall k$ ;  $C_{pK} = C_p$  indépendant de T et  $D_K = D$
- Diffusion des espèces selon la loi de Fick :  $\vec{V}_{d,k} = -\frac{D}{Y_k} \overrightarrow{grad} Y_K$
- Nombre de Lewis égal à 1 :  $Le = \frac{\lambda}{\rho C_p D} = 1$

#### II.11.1.2 Bilan de masse d'une espèce

Cas général :

$$\rho \underbrace{\frac{\partial Y_K}{\partial t}}_{=0} + \rho \vec{V} \cdot \overrightarrow{grad} Y_K + \text{div}(\rho Y_K \vec{V}_{d,K}) = \omega_K$$

$$\vec{V}_{d,k} = -\frac{D}{Y_k} \overrightarrow{grad} Y_K$$

$$\Rightarrow \rho \vec{V} \cdot \overrightarrow{grad} Y_K + \text{div}(-\rho D \overrightarrow{grad} Y_K) = \omega_K$$

$\omega_K$  : Taux de production massique

$$\omega_K = \rho \left( \frac{\partial Y_k}{\partial t} \right)_{pr} = v_k M_k V_r$$

$$\text{div}(\rho \vec{V}) = 0$$

$$\text{div}(\rho \vec{V} Y_k - \rho D \text{grad} Y_k) = \omega_k$$

1<sup>er</sup> équation de Schvab et Zeldovich

### II.11.1.3 Bilan d'enthalpie :

Cas général :

$$\rho \frac{Dh}{Dt} + \text{div} \vec{\Phi}_{d,u} = \frac{DP}{Dt} - \bar{\tau} : \overline{\text{grad}} \vec{V}$$

Ecoulement stationnaire, non visqueux à faible vitesse, sans force extérieure :

$$\Rightarrow \text{div}(\rho \sum_{k=1}^n Y_k \vec{V}_k \hat{h}_k - \lambda \overline{\text{grad}} T) = - \sum_{k=1}^n \omega_k h_k + h_{F,k}^*$$

$$C_{P,k} = C_P \quad \Rightarrow \quad \hat{h}_k = \hat{h}$$

$$\text{Avec : } h_k = \hat{h}_k + h_{F,k}^* \quad \vec{V} = \sum_{k=1}^n Y_k \vec{V}_k$$

$$\Rightarrow \text{div}(\rho \vec{V} \hat{h} - \lambda \overline{\text{grad}} T) = - \sum_{k=1}^n \omega_k h_{f,k}^*$$

$$Le = \frac{\lambda}{\rho C_P D} = 1 \quad \Rightarrow \quad \lambda \overline{\text{grad}} T = \rho D \overline{\text{grad}} \hat{h}$$

$$\text{div}(\rho \vec{V} \hat{h} - \rho D \overline{\text{grad}} \hat{h}) = - \sum_{k=1}^n \omega_k h_{f,k}^*$$

2<sup>ème</sup> équation de Schvab et Zeldovich

### II.11.1.4 Variable de Zeldovich :

$$m_{kr}^* = M_k \nu_{kr}$$

$m_{kr}^*$  : Le coefficient stœchiométrique massique de  $E_k$

$\nu_{kr}$  : Coefficient stœchiométrique molaire

réactifs :  $\nu_{kr} < 0$                       produits :  $\nu_{kr} > 0$

$$\Rightarrow Q^* = -\Delta_r H = - \sum_{k=1}^n m_{kr}^* h_{f,k} \quad (Q^* = m Q_m^*)$$

$$Q_m^* = h_{f,R}^* - h_{f,P}^*$$

$Q_m^*$  : Chaleur de réaction

$h_{f,R}^*$  : L'enthalpie de formation, réactifs

$h_{f,p}^*$  : L'enthalpie de formation, produits

$$\omega_k = m_{kr}^* V_r$$

$\omega_k$  : Taux de production massique

$$\Rightarrow \omega_k = \rho \left( \frac{\partial Y_k}{\partial t} \right)_{pr} = v_k M_k V_r$$

$V_r$  : Vitesse de réaction

$$\Rightarrow V_r = \frac{1}{v_{kr}} \frac{1}{V} \frac{\partial X_k}{\partial t}$$

Les fonctions  $Z_i$ , dites variable de Zeldovich, combinaisons linéaires convenables des termes  $Y_k$  et  $h$  :

$$Z_1 = \frac{Y_i}{m_i^*} - \frac{Y_j}{m_j^*} \quad \left( \frac{Y_c}{m_c^*} - \frac{Y_{ox}}{m_{ox}^*} \right)$$

$$Z_2 = \frac{\hat{h}}{Q^*} - \frac{Y_k}{m_k^*} \quad \left( \frac{\hat{h}}{Q^*} - \frac{Y_{ox}}{m_{ox}^*} \right)$$

$$Z_3 = h$$

Ou encore les variable normées  $F$ , dites fraction de mélange :  $F = \frac{Z - Z_{ox}}{Z_c - Z_{ox}}$

Les variable  $Z_i$  ou  $F$  (ou une quelconque de leurs combinaisons linéaires) vérifient une seule et même équation différentielle linéaire :

$$\Rightarrow \text{div}(\rho \vec{V} Z - \rho D \overrightarrow{\text{grad}} Z) = 0$$

équation de Shvab et Zeldovich

Pas de terme de production  $\omega_k$

Flux de convection de  $Z$  = flux de diffusion de  $Z$

## II.11.2 Cas des flammes :

**II.11.2.1 Cas général :** on suppose que flammes de diffusion est phénomène lent, on considère, en plus, un mécanisme de cinétique globale simple, le mélange est constitué de trois espèces : Carburant (C), Oxydant (Ox) et produits (P).

La réaction chimique globale se réduit à :  $m_c^* C + m_{ox}^* Ox \rightarrow m_p^* P$

Avec :  $m_c^* < 0$   $m_{ox}^* < 0$  et  $m_p^* > 0$

C et Ox initialement séparés se rencontrent et régissent dans la zone de flamme qui contient C, Ox et P les produits quittent ensuite la zone de flamme de sorte qui celle-ci sépare deux domaines :

- L'un contenant carburant et produits.
- L'autre contenant oxydant et produits.

Les fonctions Z seront choisies en conséquence :

Exemple :  $Z_1 = \frac{Y_C}{m_C^*} - \frac{Y_{Ox}}{m_{Ox}^*}$  se réduit à :  $Z_1 = \frac{Y_C}{m_C^*}$  côté carburant (où  $Y_{Ox} = 0$ )

La connaissance de cette fonction  $Z_1$ , donne la fraction massique  $Y_C$  en carburant.

### ***Approximation de Burke –Shumann :***

$\tau_{diff} \gg \tau_{chim}$ , la flamme se produit instantanément à l'en droit où le mélange C –Ox est stœchiométrique.

La zone de flamme est infiniment mince et ne contient que des produits.

$$\begin{array}{ccc}
 Y_C + Y_P = 1 & \mathbf{F} & Y_{Ox} + Y_P = 1 \\
 \underbrace{\hspace{10em}} & & \\
 Y_C = 0 \quad Y_P = 1 \quad Y_{Ox} = 0 & & 
 \end{array}$$

La résolution des équations en Z donnée la concentration des espèces en chaque point, les débits (puissance dégagée) et la durée de combustion, température, la position de la surface de flamme est donnée par la relation :  $Z_1(C, Ox) = 0$

### **II.11.2.2 Cas de la goutte sphérique d'hydrocarbure**

Les équations précédentes pour un régime permanent ne sont pas valables pour une goutte d'hydrocarbure liquide dont le rayon diminue avec le temps par évaporation vers la zone de flamme. On suppose les équations valable a l'extérieur de la goutte, en considérant que les vitesses matérielles de phases gazeuses sont très supérieure à celle de régressions du rayon de la goutte  $\frac{dr_g}{dt} \ll V_k$ .

Repère lie à la surface de la goutte,  $r_g = r_g(t)$ ,  $r_g$  : rayon de la goutte.

$$V_k|_{fixe} = V_k|_{surface} + \frac{dr_g}{dt} \approx V_k|_{surface}$$

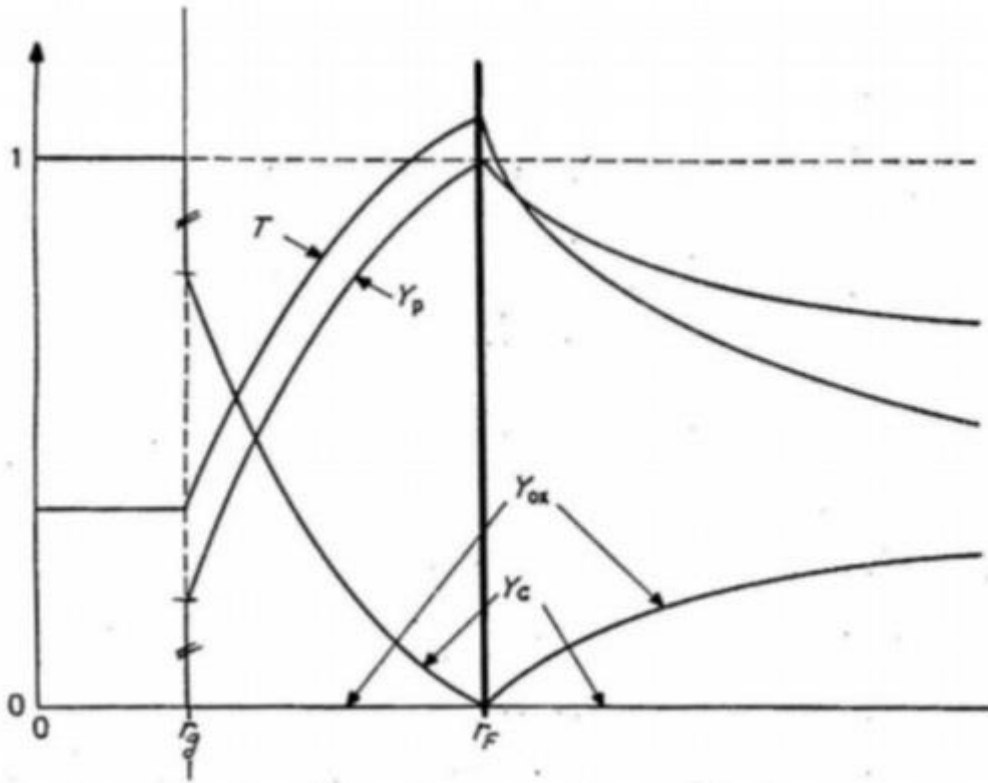
Hypothèses justifiées pour de nombreux cas usuels brûleurs – foyer de moteurs alternatifs et turboréacteur état quasi – stationnaire.

### ***Profils de fractions massiques et de température***

Ce graphique tient compte de l'éventuelle présence d'une espèce inerte (azote de l'air).

Pour calculer la loi de régression  $d_g(t)$  de la goutte, on ne tient plus compte de l'hypothèse quasi-stationnaire valable pour  $r > r_g$ , et on utilise la valeur du débit en  $r = r_g$ . On montre que :  $d^2 - d_0^2 = Kt$

K : constante de combustion



**Figure II-7** : Profil de concentration et température en fonction de la distance au centre de la goutte

### II.11.2.3 Résultats expérimentaux

Mesure :  $d_g(t), \dot{M} = 4\pi r^2 \dot{m}$

Deux conditions sont différentes :

- Etat stationnaire.
- Symétrie sphérique.

#### *Méthode de la sphère poreuse*

Carburant s'écoule l'une sphère solide, poreuse, le rayon de la goutte est fixe, l'écoulement est stationnaire mais la symétrie sphérique non respectée.

$$Z(r) = A + B \exp\left(-\frac{\dot{m}r}{\rho D}\right) \text{ Avec } \dot{m}r^2 = C^{te}$$

Il en résulte que les variables ( $Y_i, T \dots$ ) sont des fonctions exponentielles du lieu.

	Carburant	produits	oxydant	Température
$r = r_g$	$Y_C + Y_P = 1$		$Y_{OX} = 0$	T ébullition goutte

$r_g < r < r_F$	$Y_C + Y_P = 1$		$Y_{OX} = 0$	
$r = r_F$	$Y_C = 0$	$Y_P = 1$	$Y_{OX} = 0$	T combustion
$r_F < r < \infty$	$Y_C = 0$	$Y_P +$	$Y_{OX} = 1$	
$r = \infty$	$Y_C = 0$	$Y_P = 0$	$Y_{OX} = 1$	$T_\infty$

- En régime stationnaire, la fraction massique  $Y_{Pg}$  des produit sur la goutte est constante, le milieu, coté carburant, étant fini cela suppose. Qu'il n'ya pas accumulation des produits sur la goutte donc  $\dot{m}_P = 0$  pour  $r = r_g$ .

On montre que  $\dot{m}_P = 0$  pour  $r_g < r < r_F$ , c'est l'hypothèse du film stagnant d'oxyde.

- En première approximation,  $T_{eb} =$  température d'ébullition à la pression du mélange.

En fait,  $T_{eb}$  à la pression partielle du carburant sur la goutte  $P_{Cg} = X_{Cg}P$ .

$$\Rightarrow T_{eb} = T_{eb}(Y_{Cg})$$

### ***Méthode de goutte réelle***

On mesure le diamètre de la flamme pour une goutte d'hydrocarbure :

- goutte sur fil de quartz pas de symétrie, goutte déformée.

Il n'ya pas symétrie sphérique (force extérieure de pesanteur non nulle).

- goutte en microgravité (chute libre, vol parabolique, satellite).

Il ressort que  $d$  : devient linéairement avec  $t$  : durée de la combustion).

$$\underbrace{d^2}_{=0} = d_0^2 - Kt \Rightarrow t = \frac{d_0^2}{K}$$

$$\Rightarrow \begin{cases} K = 1 \text{ à } 1,5 \text{mm}^2 \text{S}^{-1} \\ K P^{0,5} = C^{te} \end{cases}$$

- Influence de la convection : quand la combustion de la goutte s'effectue dans un écoulement la symétrie sphérique non respectée et des pertes de chaleur apparaissent.

Des formules empiriques donnent le rapport débit réel (avec convection) débit théorique.

$$\frac{\dot{m}}{\dot{m}_{th}} = 1 + 0,276Re^{1/2}Pr^{1/3}$$

Avec  $Re = \frac{\rho V}{\mu} \cdot d_g$  et  $Pr = \frac{\mu C_p}{\lambda} \approx 3/4$  pour l'air.

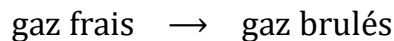
## II.12 Flamme de prémélange

### II.12.1 Vitesse fondamentale de flamme

La vitesse de propagation de la flamme (turbulente ou laminaire) par rapport au mélange frais peut être mesurée sur brûleurs, en bombe ou encore dans les tubes. Elle est déterminée sur brûleur en mesurant la surface de la flamme  $S_f$ . Si  $Q$  représente le débit volumique de mélange frais par rapport au front de flamme, la vitesse de propagation de la flamme ou vitesse de déflagration s'écrit  $U_L = Q/S_f$ .

La vitesse de la flamme est définie comme étant la vitesse à la quelle les gaz frais sont happées par la flamme. Ce n'est donc pas la vitesse de l'interface gaz frais/gaz brûlés. Cette vitesse dépend de plusieurs paramètres (température, pression, richesse, type de fuel ...etc.) et est définie différemment suivant le régime d'écoulement (laminaire ou turbulent).

La flamme (ou déflagration) consomme les gaz frais.



La vitesse de déplacement du front de flamme est liée à la vitesse de consommation des gaz frais et à la puissance dégagée.

Flamme laminaire plane : régime de référence de la déflagration.

Vitesse fondamentale de flamme  $V_F$  : composante normale à la surface de flamme de la vitesse des gaz frais par rapport à cette surface.

$V_F$  = vitesse minimale de consommation des gaz frais

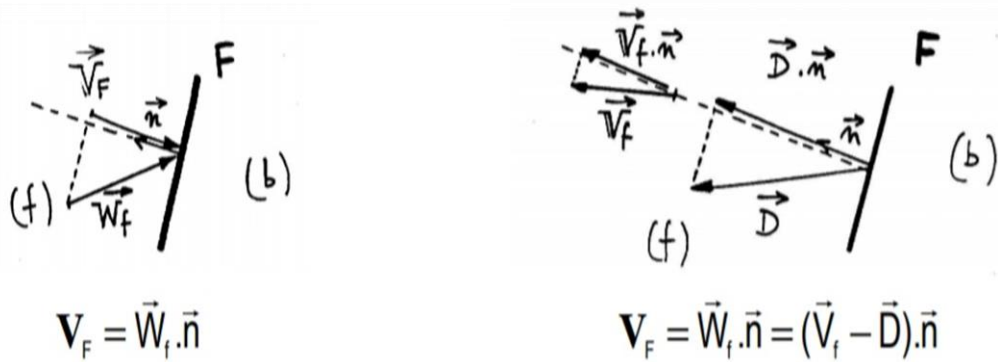
$$\varphi = 1 \begin{cases} V_F(H_2 - air) = 1.7 \text{ m s}^{-1} \\ V_F(C_3H_8 - air) = 0.44 \text{ m s}^{-1} \\ V_F(C_2H_4 - air) = 0.68 \text{ m s}^{-1} \\ V_F(C_2H_2 - air) = 1.44 \text{ m s}^{-1} \end{cases}$$

$w_f$  : vitesse des gaz frais par rapport au front de flamme

$V_f$  : vitesse des gaz frais par rapport à un repère fixe

$D$  : célérité du front de flamme par rapport à un repère fixe





Débit surfacique de gaz frais consommé par la flamme :

$$\dot{m}_f = \rho_f \vec{W}_f \cdot \vec{n} = \rho_f V_F$$

$V_F = V_F$  (composition,  $T_0, P_0$ )

## II.12.2 Réalisation de la déflagration stationnaire

Il existe toujours un mouvement relatif entre le mélange combustible et la flamme : soit que le mélange se déplace, la flamme étant alors stabilisée sur un brûleur, soit que la flamme se propage dans un mélange statique contenu à l'intérieur d'un récipient. Il existe plusieurs méthodes pour mesurer la vitesse de propagation de la flamme.

La réaction de propagation est dite :

**Déflagration** : si la vitesse de propagation est subsonique (quelques cm/s).

**Détonation** : si la vitesse de propagation est supersonique (milliers m/s).

La déflagration se propage sous forme d'une onde de combustion appelée front de flamme cependant la propagation de la détonation s'accompagne d'une onde de choc entre tenue par la réaction qui suit immédiatement.

L'onde de choc d'une part et le front de flamme d'autre part constituent une zone de séparation de fine épaisseur entre le domaine réactif (produits initiaux) et celui des produits de combustion (produits finaux).

### • Gaz frais au repos :

$V_f = 0$  (Par rapport au laboratoire)

$$V_F = -\vec{D} \cdot \vec{n}$$

$V_F$  Est la vitesse de déplacement du front de flamme

⇒ propagation d'une flamme plane dans un tube (cas idéal!)

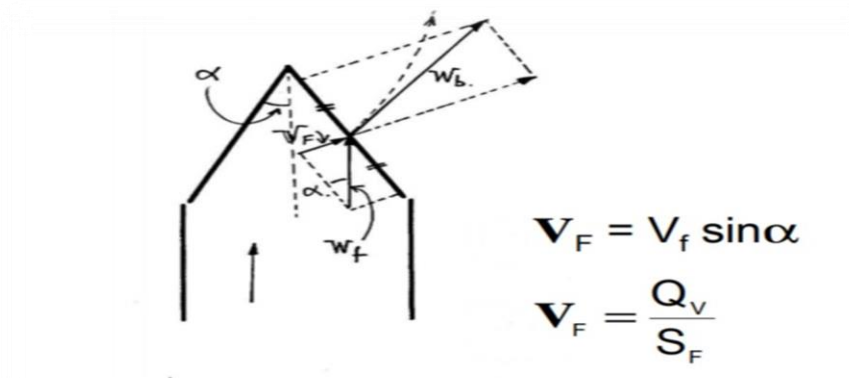
### • Flamme fixe :

$D = 0$  (Par rapport au laboratoire)

$$V_F = \vec{V}_f \cdot \vec{n} = \vec{W}_f \cdot \vec{n}$$

⇒ Brûleur à flamme plate

⇒ Bec bunsen (flamme conique)



### II.12.3 Hypothèse de la flamme sans épaisseur

La flamme est une surface de discontinuité  $\Sigma$ .

Les transferts thermiques et la diffusion des espèces chimiques internes à la flamme sont quasi-instantanés.

#### *Hypothèses supplémentaires*

- régime stationnaire (célérité  $D$  et vitesse  $V$  constantes)
- écoulement 1D plan, adiabatique, non visqueux
- gaz parfait avec  $C_p = C^{te}$

#### *Equations de conservation à travers $\Sigma$*

$$\begin{cases} \dot{m} = \rho_f w_f = \rho_b w_b \\ P_f + \dot{m} w_f = P_b + \dot{m} w_b \\ h_f + \frac{1}{2} w_f^2 = h_b + \frac{1}{2} w_b^2 \end{cases}$$

- continuité + conservation de la quantité de mouvement :

$$\Rightarrow P_b - P_f = -\dot{m}^2 \left( \frac{1}{\rho_b} - \frac{1}{\rho_f} \right)$$

$$-\dot{m}^2 = -\rho_f^2 w_f^2 = \frac{P_b - P_f}{1/\rho_b - 1/\rho_f} = \frac{P_b - P_f}{V_b - V_f} \quad \text{Droite de Rayleigh –Michelson}$$

- conservation de l'énergie :

$$\Rightarrow h_b - h_f = \frac{w_f^2}{2} - \frac{w_b^2}{2} = \hat{h}_b - \hat{h}_f + \Delta_r h^*$$

$$\Rightarrow \hat{h}_b - \hat{h}_f = Q_m^* - \frac{1}{2} \left( \frac{\dot{m}^2}{\rho_f^2} - \frac{\dot{m}^2}{\rho_b^2} \right)$$

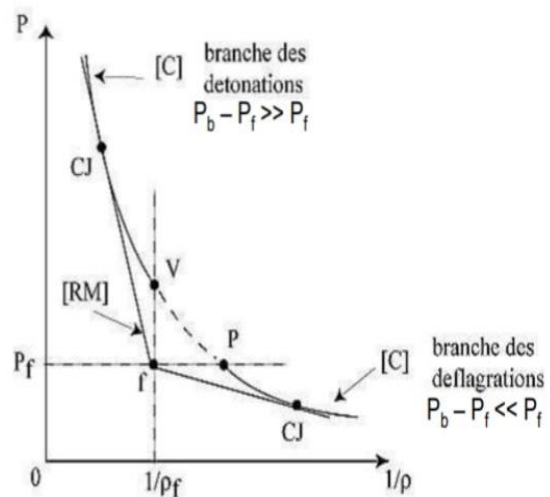
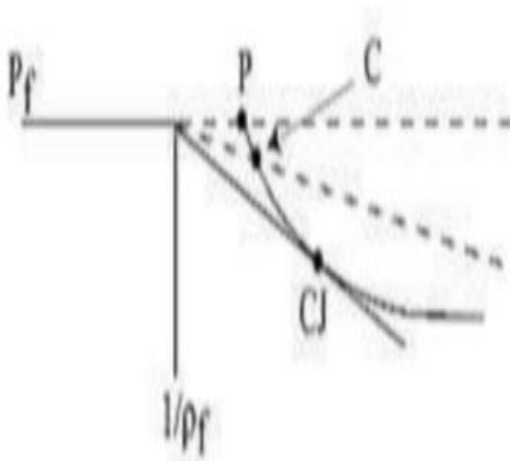
$$\hat{h}_b - \hat{h}_f = Q_m^* + \frac{1}{2} (P_b - P_f) \left( \frac{1}{\rho_f} + \frac{1}{\rho_b} \right) \quad \text{Courbe de Crussard}$$

• Si  $C_p$  et  $C_v = C^{tes}$  :  $\hat{h} = \frac{\gamma RT}{\gamma-1} - h^* = \frac{\gamma PV}{\gamma-1} - h^*$

$$\frac{\gamma}{\gamma-1} (P_b V_b - P_f V_f) = Q + \frac{1}{2} (P_b - P_f) (V_b - V_f)$$

• état brûlé :  $C \cap RM$

• branche des déflagrations :



Point CJ pas observé (expérience).

Point C représentatif de la flamme plane laminaire.

### ***L'hypothèse de la flamme infiniment mince convient mal à la déflagration***

La déflagration est lente, et soumise aux phénomènes :

- de transport moléculaire : diffusion de la chaleur, de la masse
- de production chimique non infiniment rapide

La déflagration est isobare (en première approximation)

⇒ la détermination du débit ne peut se faire que par la résolution des équations de conservation dans un milieu continu, dont la difficulté dépend de la complexité du modèle choisi.

## II.12.4 Théorie élémentaire de la flamme plane de prémélange

(Ou théorie thermique de Mallard et le Chatelier, fin XIX<sup>ème</sup> siècle)

### *Le modèle*

Les réactifs froids doivent être chauffés avant de brûler. La flamme est décomposée en:

- une zone thermique, où le phénomène prépondérant est l'élévation de la température des réactifs.
- une zone chimique, où le phénomène prépondérant est la réaction chimique.

La puissance dégagée en zone chimique par la combustion d'une masse  $m$  de réactif sert à chauffer une masse identique de réactif en zone thermique.

On note  $\Delta$  l'épaisseur de la zone thermique et  $\delta$  celle de la zone chimique.

### *Mise en équation et résolution*

Pour déterminer les caractéristiques de flamme on écrit :

Puissance absorbée « Z – T » = puissance produit « Z – C ».

### *Hypothèses*

- Zone chimique infiniment mince :  $\delta \approx 0 \Rightarrow V_r \rightarrow \infty$
- $C_p$  et  $\lambda$  constants.
- Pas de diffusion des espèces.
- L'écoulement est 1D plan, isobare, adiabatique et stationnaire, et la flamme est supposée fixe.
- Le sens positif adopté est celui des gaz frais ( $-\infty$ ) vers les gaz brûlés ( $+\infty$ ).
- réaction globale :  $-R + P + Q_m^* \rightarrow 0$
- Dans  $\Delta$ , les réactifs sont portés de  $T_f$  à  $T_b = T_{ad}$  par le flux de chaleur issu de  $\delta$ .  $\Delta$  est assimilée à un mur passif immobile recevant un flux de chaleur sur une de ses faces.
- Dans  $\delta$ , la combustion instantanée des réactifs produit le flux de chaleur précédent.

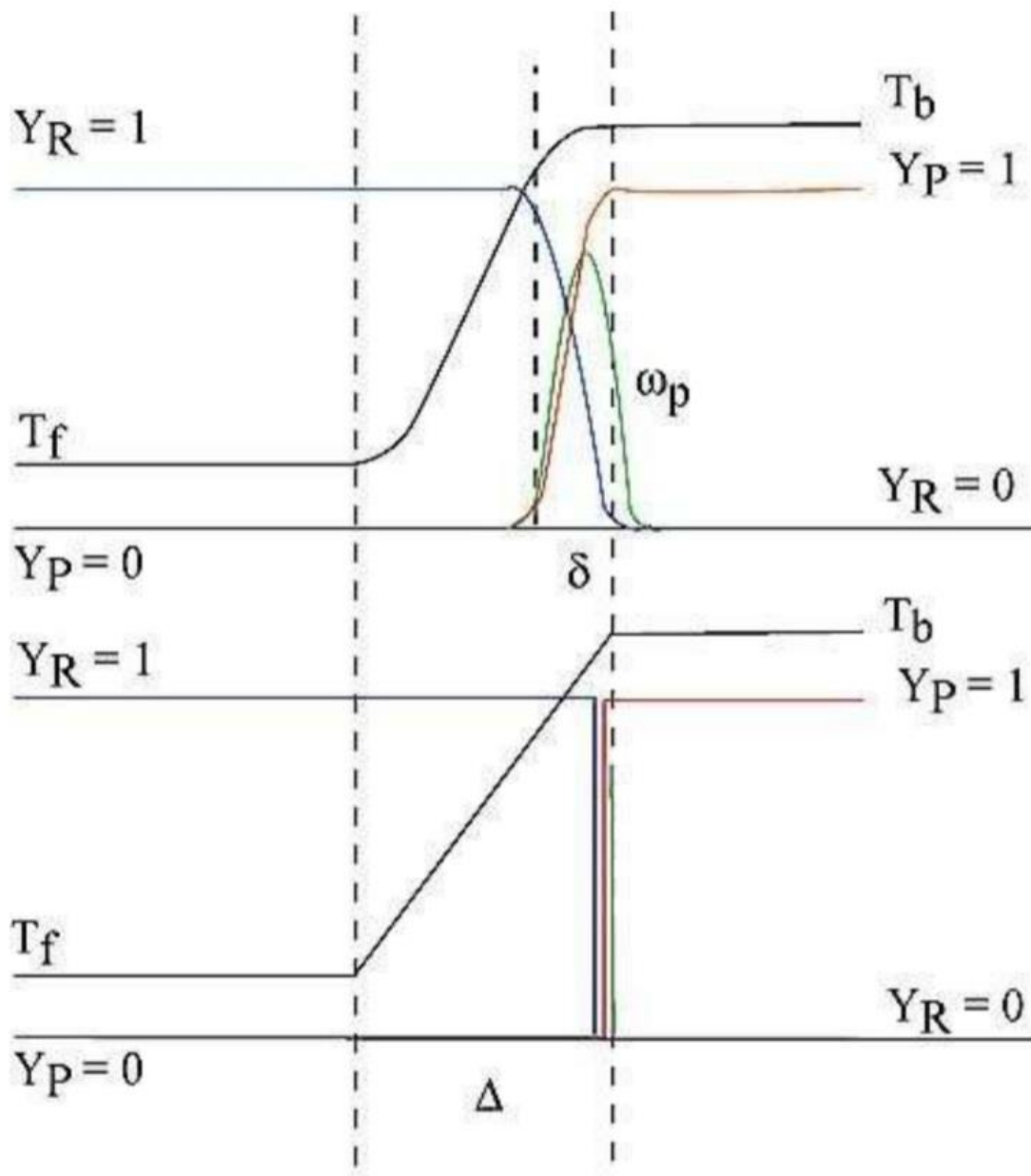
$\Rightarrow$  l'évolution de la température  $T(x)$  est linéaire dans  $\Delta$ .

Les fractions massique sont égales à :

Réactifs  $Y_R = 1$  en zone thermique  $Y_R = 0$  ailleurs.

Produits  $Y_P = 0$  en zone thermique  $Y_P = 1$  ailleurs.

La production se situe sur la zone chimique infiniment mince.



Figure

### Bilan thermique

- Puissance thermique transmise par conduction dans la zone thermique :

$$P_{th} = -\left(-\lambda \frac{\partial T}{\partial x}\right) S = \lambda \frac{T_b - T_f}{\Delta} S$$

$\Delta$  : épaisseur de flamme

- Chaleur de réaction :

$$T_b - T_f = \frac{Q_m^*}{C_p} \Rightarrow P_{th} = \frac{\lambda Q_m^* S}{C_p \Delta}$$

### ***Bilan chimique***

- Puissance chimique produite dans la zone thermique :

$$P_{ch} = \dot{M}_R Q_m^*$$

$\dot{M}_R$  : Masse de réactif consommée par unité de temps (ou masse de produits formée)

$$\Rightarrow P_{th} = w_P Q_m^* V = w_P Q_m^* S \Delta$$

### ***Bilan global***

$$P_{th} = P_{ch} \quad \Rightarrow \quad \Delta = \left( \frac{\lambda}{C_P w_P} \right)^{1/2}$$

$$\dot{M} = w_P S \Delta = \rho_f w_f S = \rho_f V_f S$$

$$\Rightarrow V_F = \frac{\Delta w_P}{\rho_f} = \frac{1}{\rho_f} \left( \frac{\lambda}{C_P} w_P \right)^{1/2} \quad V_F \propto P^0$$

$$\Rightarrow \Delta = \frac{\lambda}{\dot{m} C_P} \quad \Delta \propto P^{-1}$$

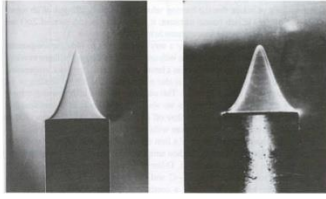
$\Delta$  Et  $V_F$  dépendent de  $\lambda$ ,  $C_P$  et  $w_P$

**Pour une cinétique globale :**

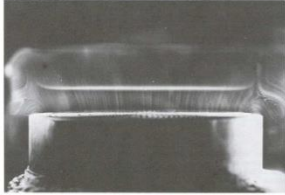
$$\omega_P = M_P B T_b^\alpha \left( \frac{P}{RT_b} \right)^n \exp \left( - \frac{E_a}{RT_b} \right)$$

## **II.12.5 Mesure expérimentale de la vitesse fondamentale de flamme**

• bec bunsen

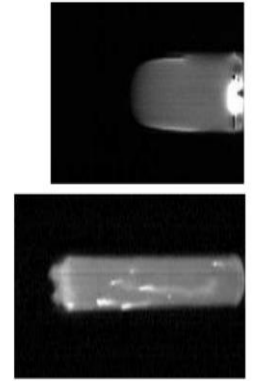
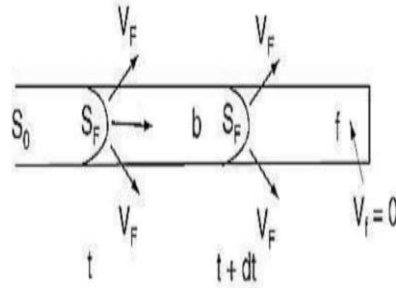


• brûleur à flamme plate

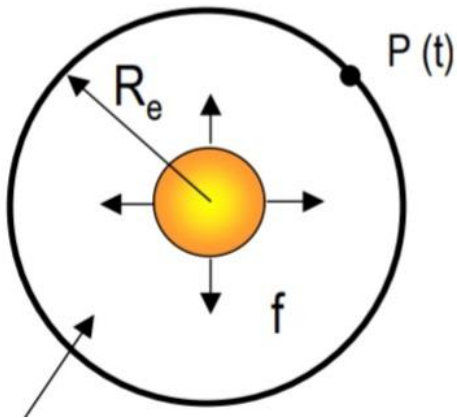


(a)

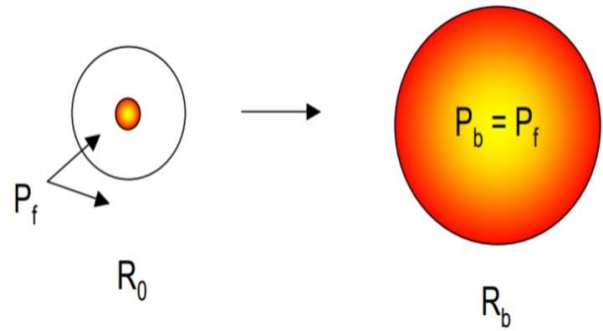
D : vitesse spatiale de la flamme



(b)



(c)



(d)

- (a) Méthode du brûleur.
- (b) Méthode du tube.
- (c) Méthode de la bombe à volume constant.
- (d) Méthode de la bulle de savon.

## Références

- [1] Cours de combustion, Zoom professeur Frendi Kader 2022  
Université Alabama USA;
- [2] Cours de combustion Professeur Hui Ying Wang 2012 institut P'  
ENSMA Poitiers France;
- [3] Cours de combustion Magistère 2002 de Professeur Aminallah  
Miloud Université de Sidi Bel Abbes.