

Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique

Université Akli Mohand Olhadj-Bouira

Faculté des Sciences et des Sciences Appliquées

Département de Génie Mécanique



Polycopié de Combustion

Réalisé par

Dr : MAHFOUD Brahim

2015

Avant-propos

La combustion est aujourd'hui un des principaux moyens de conversion de l'énergie. Elle est utilisée dans de nombreux systèmes pratiques aussi bien pour produire de l'énergie thermique (chaudières ou fours domestiques et industriels) ou de l'électricité (centrales thermiques), que pour le transport (moteurs automobiles et aéronautiques, moteurs fusée, ...) ou encore la destruction de déchets (incinérateurs). La combustion peut être caractérisée comme une (ou des) réaction(s) irréversible(s) fortement exothermique(s) entre un combustible (ou réducteur) et un comburant (ou oxydant) selon le schéma global



Cette réaction induit un fort dégagement de chaleur qui a lieu dans une zone très mince. Les combustibles le plus divers, qu'ils soient gazeux, liquides ou solides peuvent être utilisés. Parmi les plus courants, citons le bois, le charbon, les hydrocarbures (méthane CH₄, propane C₃H₈, essence, gasoil, kérozène, fioul,...), l'hydrogène (H₂)... Le comburant est le plus souvent l'oxygène de l'air, plus exceptionnellement de l'oxygène pur (moteurs-fusée, certains fours industriels) qui permet d'atteindre des températures plus élevées.

Aujourd'hui, la croissance de la population mondiale, le développement industriel se traduisent par un développement croissant de la demande énergétique mondiale. Les activités humaines ont un impact sur le changement climatique et la dégradation de la biodiversité, du fait des émissions de polluants (oxydes d'azote NO_x, monoxyde de carbone CO, hydrocarbures imbrûlés HC...) et de dioxyde de carbone (CO₂), principal responsable de l'effet de serre.

Ce contexte énergétique et environnemental motive le perfectionnement des systèmes de combustion dans de nombreux secteurs tels que les transports ou les procédés industriels (moteurs à combustion interne, fours, brûleurs). Cette évolution passe par une meilleure maîtrise de la combustion et par l'amélioration des rendements de combustion avec une réduction sensible des émissions de polluants.

Ce polycopié s'adresse aux étudiants de Master en Energétique ou en fin de cursus dans les écoles d'ingénieurs. Il est rédigé de manière simplifiée afin que l'étudiant puisse assimiler le contenu du cours. Des exercices sans solutions sont donnés pour que l'étudiant s'y entraîne à la fin de chaque chapitre.

Ce polycopié est divisé en sept chapitres. Le contenu du premier chapitre concerne les différentes procédés de combustion, où les phénomènes interviennent conjointement : L'aspect chimique, l'aspect transfert de chaleur et l'aspect mécanique. Après nous avons présenté quelques exemples de la combustion dans l'industrie.



Le deuxième chapitre présente la thermodynamique de la combustion. On y rappelle le premier principe et le deuxième principe de la thermodynamique et variation de l'entropie lors d'une réaction chimique.

Les équations de base de l'aérothermochimie, pour un milieu formé par un mélange homogène de gaz réactifs, en constituent le troisième chapitre. Les notions de base nécessaires pour poser les problèmes de combustion en termes mathématiques sont énoncées : les variables caractéristiques du système à étudier, les relations d'états à associer au milieu gazeux considéré, les équations de bilans des divers variables, et enfin les lois des phénomènes irréversibles qui s'y produisent.

Le quatrième chapitre donne les éléments de cinétique chimique nécessaires pour la combustion. En rappelant d'abord la notion d'équilibre chimique qui permet de calculer la température adiabatique de fin de combustion. Puis en décrit les différents mécanismes de réactions en chaîne. Le calcul de vitesse de réaction ou taux de réaction est aussi présenté.

Les caractéristiques des flammes sont nombreuses et complexes, c'est pourquoi le cinquième chapitre traite seulement d'une de leurs principales caractéristiques; leur forme. Il existe plusieurs modèles de classification des flammes. Nous nous limiterons ici à une classification en fonction de la forme et du mélange réactionnel des flammes.

Le sixième chapitre est consacré à l'étude des flammes laminaires de prémélange. En effet, dans certains régimes de combustion turbulente, la flamme peut être considérée localement comme une flamme laminaire et la connaissance des caractéristiques de la flamme laminaire est alors indispensable à l'étude de la combustion turbulente. Ce chapitre constitue un bref rappel de la théorie des flammes laminaires de prémélange, et en particulier des flammes sphériques en expansion.

Dans le septième chapitre et le dernier, les flammes de diffusion sont abordées. Après une description qualitative et la démonstration des propriétés intéressantes mises en évidence lorsque les nombres de Lewis sont supposés égaux à l'unité, on présente l'approche historique de Burke et Schumann. On complète cette présentation par la généralisation concernant les flammes étirées.



Table des matières

Avant-propos	2
Listes des figures	8
Symboles et notations.....	11
Chapitre 1 : Introduction à la combustion et ses applications.....	13
1.1 Combustion phénomène à plusieurs aspects	13
1.2 Combustion dans l'industrie.....	14
1.2.1 Les moteurs	14
1.2.2 Les brûleurs :	19
1.3 Combustion dans la nature	22
Chapitre 2 : Thermodynamique de la combustion	23
2.1 Energie interne de réaction, enthalpie de réaction	23
2.2 Enthalpie de formation	24
2.3 Généralisation du 1 ^{er} principe aux systèmes réactifs	26
2.4 Variation de l'entropie dans un milieu réactif.....	35
2.4.1 Entropie d'un gaz parfait :	35
2.4.2 Variation de l'entropie lors d'une réaction chimique.....	35
2.5 Autres critères d'équilibre plus convenables	37
2.6 Equilibre chimique dans le cas d'un mélange de gaz parfait	39
2.6.1 La fonction de Gibbs ou enthalpie libre d'un gaz parfait.....	39
2.6.2 Mélange de gaz parfait à l'équilibre chimique.....	39
2.6.3 Equation de Van't Hoff (effet de la température sur K_p)	42
2.7 Algorithme de calcul	43
Chapitre 3: Cinétique chimique appliquée à la combustion.....	48
3.1 Introduction	48
3.2 Réactions élémentaires, réactions de bilan.....	48



3.3 Molécularité d'une réaction élémentaire.....	48
3.4 Vitesse de réaction ou taux de réaction.....	49
3.5 Lois expérimentales des vitesses de réaction et ordre réaction.....	50
3.6 Loi d'Arrhenius.....	51
3.7 Loi théorique de la vitesse d'une réaction élémentaire.....	52
3.8 Deux réactions élémentaires consécutives.....	55
3.9 Plusieurs réactions en chaine .Mécanisme :.....	56
3.10 Expression générale de la vitesse de réaction.....	57
Chapitre 4 : Les équations de bilan de l'aérothermochimie.....	61
4.1 Introduction.....	61
4.2 Structure générale d'équation de bilan.....	61
4.3 Bilan de masse du mélange dans sa globalité.....	61
4.4 Bilan de masse d'une espèce dans un mélange.....	62
4.5 Bilan de quantité de mouvement.....	63
4.6 Bilan d'énergie.....	64
Chapitre 5 : Les types de flammes.....	66
5.1 Introduction.....	66
5.2 Phénomènes impliqués dans une flamme.....	68
5.3 Flamme de diffusion turbulente.....	71
5.3.1 La flamme continue.....	71
5.3.2 La région de transition.....	71
5. 3.3 Le panache :.....	71
5.4 Flammes de diffusion laminaires.....	72
5.6 La forme des flammes :.....	73
Chapitre 6 : Flamme laminaire de prémélange.....	74



6.1 Structure d'une flamme laminaire de prémélange	74
6.2 Vitesse de propagation et vitesse de combustion laminaire	75
6.3 Epaisseur de flamme laminaire	77
6.4 Etirement du front de flamme	78
6.5 Principales configurations expérimentales des flammes laminaires de prémélange.....	79
6.6. Vitesse de combustion d'une flamme sphérique en expansion.....	80
6.6.1. Vitesse de combustion laminaire étirée.....	80
6.6.2. Vitesse de combustion laminaire non-étirée et longueur de Markstein	82
6.7. Instabilités du front de flamme.....	83
Chapitre 7 : Flamme de diffusion laminaire.....	87
7.1 Intérêt des flammes de diffusion laminaire	87
7.1.1 Structure des flammes de diffusion.....	89
7.2 Calcul d'une flamme de diffusion laminaire.....	90
7.2.1 Chimie infiniment rapide	94
7.2.2 Résolution de l'équation de Z_F	96
7.3 Utilisation du scalaire passif Z	98
7.3.1 Définitions.....	98
7.3.2 Description de la flamme en terme du scalaire passif Z	99
7.3.3 Remarques	103
7.4. Flammes de diffusion laminaires étirées	105
7.4.1 Introduction	105
7.4.2 Flamme de diffusion étirée stationnaire à contre-courant.....	106
7.4.3 Flamme de diffusion étirée instationnaire.....	112
7.5. Stabilisation des flammes de diffusion.....	114
7.5.1 Auto-inflammation.....	114



7.5.2 Stabilisation sur les lèvres du brûleur 115

7.5.3 Stabilisation par flamme triple 115

7.5.4 Stabilisation par zone de recirculation 117

7.5.5 Flamme pilote..... 117

Références 120



Listes des figures

Fig. 1-1 : Les différents phénomènes physiques qui jouent leur rôle, à différents endroits, dans une flamme de bougie.

Fig. 1-2 : Propagation d'une flamme dans un prémélangée gazeux ; une expérience qu'on peut faire dans une bouteille, mais avec précaution.[1]

Fig. 1-3 : Propagation de la flamme dans un moteur à allumage commandé, sans turbulence (à gauche) et turbulent (à droite) à différents t_1, t_2, t_3 [1]

Fig. 1-4 : Flamme dans un moteur Diesels schématisé, à injection directe [1]

Fig. 1-5a : Croquis d'un foyer de statoréacteur cylindrique, schématisé, avec une seule accroche flamme en gouttière torique [1]

Fig. 1-5b : Détail de la stabilisation de la flamme par noyau de recirculation, derrière l'accroche [1]

Fig. 1-6 : (a) Coupe axiale de a chambre de combustion annuaire d'un turboréacteur. (b)Vue des têtes d'injecteurs dans une portion de tube à flamme, par l'arrière [1]

Fig. 1-7 : Schéma de principe d'un moteur-fusée bi-liquide[1]

Fig. 1-8 : Vue en coupe d'un moteur-fusée à propergol solide[1]

Fig. 1-9a : Flamme-jet d'un briquet à gaz [1]

Fig. 1-9b : Flamme sur un bec de gaz classique [1]

Fig. 1-10 : Brûleur à gaz à contre-rotation, l'air est par deux séries de trous, chacune le mettant en rotation dans un sens différent [1]

Fig. 1-11 : Schéma d'un brûleur à fuel-oil dans un four industriel [1]

Fig. 1-12 : Flamme (à gauche) se développant près d'une paroi verticale couverte de polymère (à droite) sur un réservoir de combustible liquide [1]

Fig. 2-1 : Calorimètre à gaz

Fig. 2-2 : Enthalpie de formation

Fig. 2-3 : Energie interne et l'enthalpie pour O_2

Fig. 2-4 : Energie interne et l'enthalpie pour N_2

Fig. 2-5 : Energie interne et l'enthalpie pour CO_2

Fig. 2-6 : Energie interne et l'enthalpie pour H_2O

Fig. 2-7 : Energie interne et l'enthalpie pour CO

Fig. 2-8 : Energie interne et l'enthalpie pour H_2

Fig. 2-9 : L'état d'équilibre

Fig. 2-10 : Transformation spontanée s'effectuera jusqu'au point d'équilibre b.

Fig.3-1 : La variation des concentrations

Fig.3-2 : La variation de l'énergie potentielle

Fig.3-3 : Le comportement de la constante de vitesse k en fonction de la température

Fig.3-4: La distribution des énergies moléculaires

Fig.3-5 : L'état quasi-stationnaire.

Fig.5-1: Une classification des types de flammes en fonction de leur forme et de leur mélange réactionnel.

Fig. 5-2 : Flammes de diffusion.

Fig. 5-3 : Gravité, poussée d'Archimède et mouvements de convection impliqués dans une flamme de diffusion

Fig.5-3: Influence de la gravité sur la forme d'une flamme de diffusion.

Fig. 5-4 : Formes approximatives de flammes de diffusion turbulentes en fonction de l'état physique du combustible.

Fig.5-5: Zones d'une flamme de diffusion turbulente impliquant un carburant hydrocarbure.

Fig.5-6: Couleurs et températures des zones d'une flamme de chandelle (flamme de diffusion laminaire).

Fig.6-1 : Structure d'une flamme laminaire de prémélange.

Fig.6-2 : Notations utilisés pour les définitions des vitesses de flamme.

Fig.6-3 : Configuration de flammes laminaires : a) flamme conique, b) flamme plate flamme, c) à jets opposés, d) flamme sphérique[14].

Fig. 7-1 : Géométrie d'une flamme de diffusion laminaire obtenue par injection d'un jet de combustible dans une atmosphère oxydante au repos.

Fig.7-2 : (a) Combustion d'une goutte de combustible dans une atmosphère oxydante, (b) Feux de nappes.

Fig.7-3 : Trois situations sont représentées, selon que la combustion se déroule au-dessus du combustible **a**, au-dessous **b** ou le long d'une paroi **c**.

Fig.7-4 : Structure d'une flamme laminaire de diffusion (d'après [22]).

Fig.7-5 : Fractions massiques de combustible Y_F , d'oxydant Y_O et de produits de combustion Y_P en fonction du scalaire passif $Z_F = Y_F - Y_O/s$ pour une chimie infiniment rapide.

Fig. 7-6 : Profils du scalaire passif Z_F , des fractions massiques de combustible Y_F et d'oxydant Y_O et de température T dans la flamme de Burke et Schumann.

Fig. 7-7 : Fractions massiques réduites de combustible Y_F/Y_F^∞ et d'oxydant Y_O/Y_O^∞ et de température en fonction du (a) scalaire passif Z dans le cas d'un mélange inerte (b) du scalaire passif Z dans le cas d'une cinétique chimique infiniment rapide (solution de Burke et Schumann).

Fig.7.8 – (a) Fractions massiques réduites de combustibles Y_F/Y_F^∞ d'oxydant Y_O/Y_O^∞ et température en fonction du scalaire passif Z . Allure de la solution dans le cas général (écart à la solution de Burke et Schumann). **(b)** Domaine d'évolution de la fraction massique de combustible Y_F en fonction de la fraction de mélange Z .

Fig. 7-9 : Flamme plane de diffusion laminaire étirée à contre-courant.

Fig. 7-10 : Profils de la fraction de mélange Z et des fractions massiques réduites de combustible Y_F/Y_F^∞ , d'oxydant $Y_O = Y_O^\infty$ et de produits $2Y_P/Y_F^\infty (s + 1)$ dans une flamme plane de diffusion laminaire à contre-courant (étirement constant ε_s) tracés en fonction de la coordonnée spatiale adimensionnée $\sqrt{\varepsilon_s/2D} y$.

Fig.7-11 : Valeur absolue du taux de réaction d'une flamme laminaire étirée à contre-courant en fonction de l'étirement ε_s ou de la dissipation scalaire au front de flamme χ_f .

Fig.7-12 : Réponse d'une flamme de diffusion laminaire étirée à contre-courant à une perturbation instantanée de l'étirement.

Fig.7-13: Stabilisation d'une flamme de diffusion par auto-inflammation.

Fig.7-14 : Stabilisation d'une flamme de diffusion par la lèvre du brûleur si celle-ci reste suffisamment chaude.

Fig. 7-15 : Stabilisation par « flamme triple » d'une flamme de diffusion décrochée des lèvres du brûleur.

Fig.7-16 : Flamme de diffusion stabilisée en aval d'une zone de recirculation(L'obstacle qui génère la zone de recirculation peut séparer les deux écoulements combustible et oxydant (a) ou se trouver à la périphérie (b).

Fig.7-17 : Stabilisation d'une flamme de diffusion par flamme pilote (Cette flamme-pilote, alimentée par un dispositif annexe, est le plus souvent prémélangée).

Tableau 7-1 : Détermination de la température T et des fractions massiques de combustible Y_F , d'oxydant Y_O et de produits de combustion Y_P à partir du scalaire passif $Z_F = Y_F - Y_O/s$ pour une chimie infiniment rapide.

Tableau 7-2 : Détermination des fractions massiques de combustible Y_F , d'oxydant Y_O et de produits Y_P à partir du scalaire passif Z pour une chimie infiniment rapide.

Tableau 7-3 : Quelques valeurs du rapport d'équivalence pour la combustion d'un combustible pur ($Y_F^\infty = 1$) dans l'air ($Y_O^\infty = 0,23$) ou dans l'oxygène pur ($Y_O^\infty = 1,0$).

Symboles et notations

Seuls sont répertoriés ici les symboles ayant un caractère général sur l'ensemble de polycopié.

A'	facteur pré-exponentiel
C_p	chaleurs spécifiques à pression constant
C_v	chaleurs spécifiques à volume constant
D	coefficient de diffusion
d_i	distance d'allumage
E_a	énergie d'activation
H	enthalpie
h	enthalpie par mole du produit
G	enthalpie libre
g	enthalpie libre par unité de mole
K	Etirement total du front de flamme
K_c	constante d'équilibre associé aux concentrations
K_p	constante d'équilibre chimique
l_d	épaisseur de la zone de diffusion
L_v	chaleur latente de vaporisation
m_i	masse de l'espèce i
M_i	masse molaire de l'espèce i
n_i	nombre de mole par unité de masse
P	pression
pcs	pouvoir calorifique supérieur
Q	quantité de chaleur
R	constante des gaz parfait
Re	nombre de Reynolds
s	entropie par unité de mole
S	entropie
s	coefficient stœchiométrique massique de la réaction $F + s O \rightarrow P$
S_C	Vitesse de consommation
S_L	Vitesse de flamme laminaire
t	temps
T	température
U	énergie interne de formation



u	composante de vitesse suivant x
v	composante de vitesse suivant y
\vec{V}	vecteur vitesse
x_i	coordonnée spatiale dans la direction i
X_j	fraction molaire de l'espèce j
y_i	fraction massique de l'espèce i
Y_i^∞	fraction massique du réactif i dans l'écoulement qui le contient
w	paramètre de la réaction chimique (équation (7.63))
W	travail
Z	scalaire passif (ou fraction de mélange)
Z_{st}	valeur stœchiométrique de Z

Lettre grecques

δ_L	épaisseur de flamme laminaire
δ_p	épaisseur de la zone de préchauffage
δ_r	épaisseur de la zone de réaction
ε_s	taux d'étirement du champ de vitesse
ε_s^{all}	taux d'étirement d'allumage de la flamme de diffusion
$\varepsilon_s^{\acute{e}q}$	taux d'étirement équivalent (équation (7.83))
$\varepsilon_s^{\acute{e}q}$	taux d'étirement d'extinction de la flamme de diffusion
λ	conductivité thermique
μ	viscosité dynamique
ν_i	coefficients stœchiométrique (équation (3.31))
ν	viscosité cinématique
Φ	rapport d'équivalence de la réaction
Ω	volume
ρ	masse du mélange par unité de volume
χ	taux de dissipation scalaire
$\dot{\omega}$	vitesse de réaction massique

Indices

a, b, c, \dots	coefficients stœchiométrique
i, j, k, \dots	espèce chimique
f, b	forward : vers la droite, backward : vers la gauche
F, O, P	combustible, oxydant, produits de la réaction respectivement

Chapitre 1 : Introduction à la combustion et ses applications

1.1 Combustion phénomène à plusieurs aspects

Dans le procédé de combustion, connu par l'être humain il y a plus d'un million d'années, plusieurs phénomènes interviennent conjointement :

- L'aspect chimique : de nombreuses réactions chimiques ont lieu simultanément
- L'aspect transfert de chaleur : les réactions chimiques entraînent des températures et leurs gradients très élevés, impliquant d'importants transferts de chaleur.
- L'aspect mécanique : la combustion est aussi caractérisée par un important transfert de quantité de mouvement et de masse par convection et /ou diffusion.

Exemple 1 : flamme d'une bougie (flamme non-prémélangée)

L'aspect chimique : un ensemble de réactions chimiques se fait entre l'oxygène de l'air et les vapeurs du combustible (de la stéarine comprenant essentiellement du carbone et de l'hydrogène)

L'aspect transfert de chaleur : c'est le phénomène du rayonnement, principale utilité de la bougie.

L'aspect mécanique : c'est essentiellement la gravité qui fait monter les gaz chauds et entraîne à leur place des gaz frais. La stéarine liquide est aspirée par capillarité vers le haut. L'air et la vapeur de stéarine se mélangent par interaction moléculaire dans la flamme, ou la fraction massique des gaz frais diminue et celle des gaz brûlés augmente.

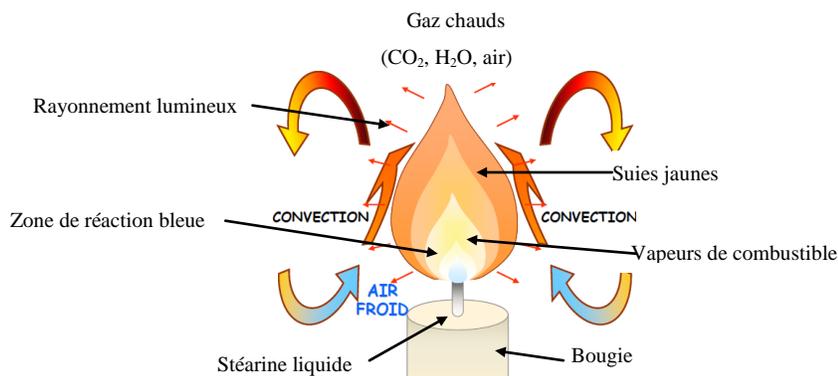


Fig. 1-1 : Les différents phénomènes physiques qui jouent leur rôle, à différents endroits, dans une flamme de bougie.

Exemple 2 : propagation d'une flamme prémélangée à l'intérieur d'une bouteille :

L'aspect chimique : Les réactions entre l'oxygène de l'air et le méthane ont lieu dans la flamme.

L'aspect transfert de chaleur : Les gaz chauds et la flamme chauffent par conduction une petite couche voisine de mélange frais qui s'enflamme à son tour ect..., d'où la propagation.

L'aspect mécanique : A noté la sortie des gaz chauds de la bouteille à la vitesse de quelques mètres par seconde.

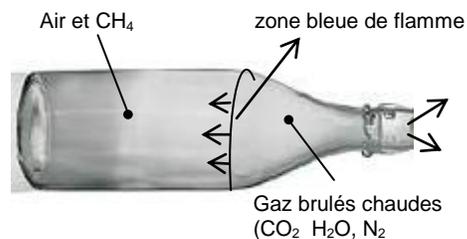


Fig. 1-2 : Propagation d'une flamme dans un prémélangée gazeux ; une expérience qu'on peut faire dans une bouteille, mais avec précaution.

1.2 Combustion dans l'industrie

1.2.1 Les moteurs : C'est une classe de dispositifs qui propulsent divers véhicules (automobiles, avions, fusées, bateaux, trains) grâce à l'énergie thermique que la combustion peut libérer.

a) Le moteur à piston, à allumage commandé :

Après fermeture de soupape d'admission, les gaz frais (air + vapeur d'essence) sont comprimés puis enflammés par une étincelle. Les gaz brûlés à 2500K à 2700K sont détendus puis relâchés dans la tubulure d'échappement.

En réalité, la combustion n'est pas infiniment rapide. L'étincelle est déclenchée à environs 20° avant PMH. Pour un moteur à 3000 tr/mn la durée de phase de combustion correspond à 40° de rotation du vilebrequin (~2m sec).

Si la flamme était laminaire elle se propagerait à ~1 m/s. En fait, l'entrée des gaz à travers la soupape et la remontée du piston provoquent une turbulence qui accroit la vitesse de propagation de la flamme.

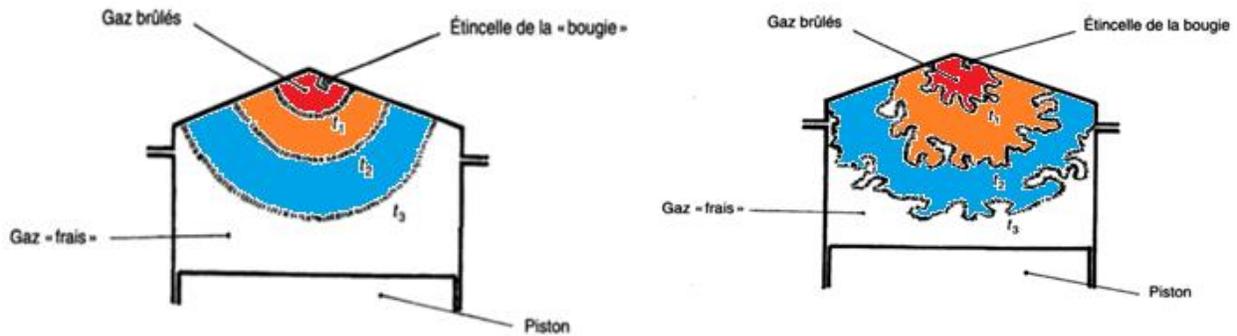


Fig. 1-3 : Propagation de la flamme dans un moteur à allumage commandé, sans turbulence (à gauche) et turbulent (à droite) à différents t_1, t_2, t_3 [1].

b) Le moteur diesel :

Il utilise une flamme non-prémélangée (flamme de diffusion). L'air seul est comprimé. À 20° avant PMH, un jet de gasoil liquide pulvérise (très fines gouttelettes) est injecté. Les gouttelette se dispersent et s'évaporent dans l'air.

La structure de la flamme non-pré-mélangée est telle que le cœur du jet est concentré en combustible et la périphérique riche en air. Le résultat est que le moteur libère plus de suie dans les gaz d'échappement par rapport au moteur à essence. En contrepartie, à cause des températures plus élevées à la fin de compression, il a un rendement thermodynamique global meilleur et peut utiliser un combustible moins raffiné.

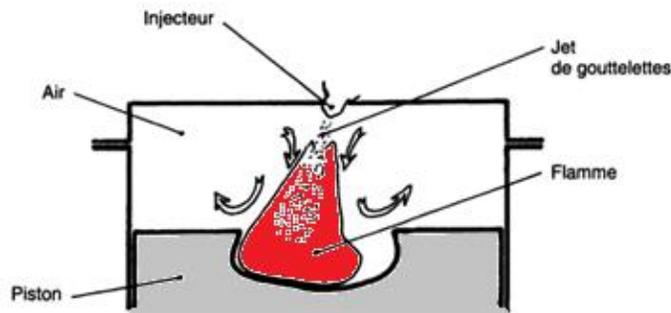


Fig. 1-4 : Flamme dans un moteur Diesels schématisé, à injection directe [1].

c) Le statoréacteur :

Il est utilisé pour des avions ayant atteint une vitesse de l'ordre de 2 fois la vitesse de son. Comme dans un moteur à piston, les gaz sont comprimés (dans la prise d'air à l'avant du moteur), brûlés et ensuite détendus (dans la tuyère à l'arrière). Cependant la combustion est continue (non-cyclique).

La prise d'air fournit un courant au Mach 0.1 à 0.2, dans lequel est injecté du Kérosène liquide pulvérisé par un conduit muni de plusieurs orifices. Un mélange air /vapeur est préparé à ~ 600k sans risque d'inflammation dans la première partie de la chambre. Une flamme est alors allumée et maintenue accrochée par une sorte de gouttière torique appelée accroche-flamme. Deux flammes prémélangées conique se développent, l'une vers l'axe et l'autre vers le périphérique. Derrière la flamme les gaz brûlés entrent dans la tuyère.

La flamme se propage obliquement par rapport à l'écoulement. La turbulence est très rentable elle accroît la vitesse de propagation et donc l'angle α du front de flamme par rapport à l'axe. Cela réduit la longueur de la chambre de combustion.

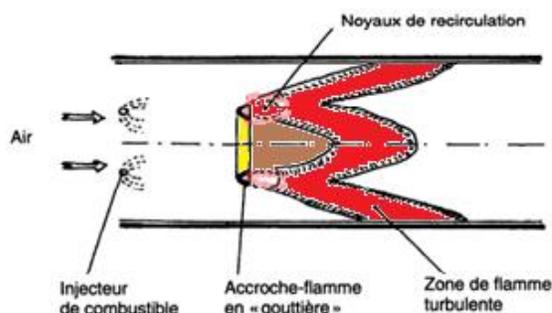


Fig. 1-5a : Croquis d'un foyer de statoréacteur cylindrique, schématisé, avec une seule accroche flamme en gouttière torique [1].

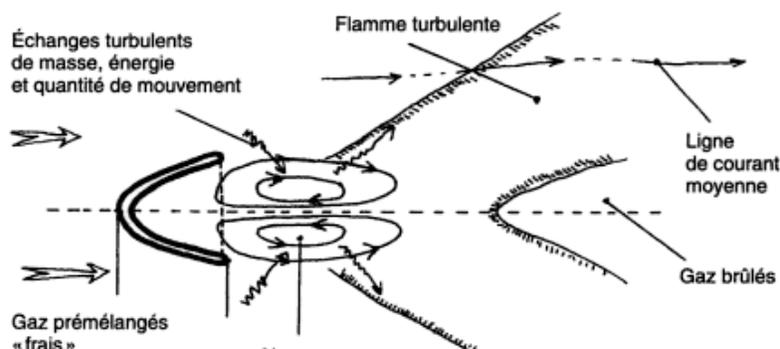


Fig. 1-5b : Détail de la stabilisation de la flamme par noyau de recirculation, derrière l'accroche [1].

d) Les turboréacteurs:

Ils sont d'un emploi très répandu pour presque tous types d'avions. Des moteurs semblables sont turbopropulseurs équipant les avions à hélices et les turbines à gaz utilisés sur des bateaux et des trains.

L'air est aspiré et comprimé (à 20 ou 30 atmosphères au décollage, 4 ou 5 fois moins en altitude), passe dans la chambre à combustion où le kérosène pulvérisé est injecté et mélangé avec l'air. Après combustion, les gaz brûlés traversent (et font tourner) la turbine (et le compresseur) puis la tuyère.

La zone primaire est alimentée en kérosène par une quinzaine d'injecteurs et aussi reçoit l'air par la 1ère rangée d'orifices latéraux du tube à flamme. La température max, est 2200K à 1800 K, La zone de dilution permet de mélanger encore environs 1/3 de l'air aux gaz brûlés pour abaisser la température à 1700K à 1800K (si non la turbine ne résisterait pas). La turbulence intense est une recirculation caractéristique de la combustion dans la zone primaire souvent grâce à un Swirl (mouvement tourbillonnaire d'axe longitudinal) provoqué par l'injecteur.

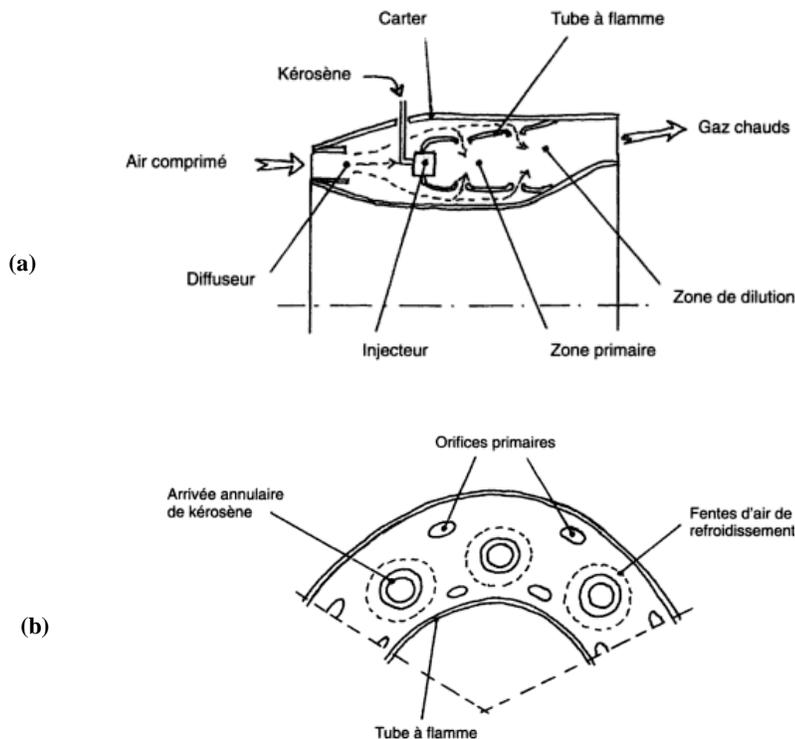


Fig. 1-6: (a) Coupe axiale de la chambre de combustion annulaire d'un turboréacteur (b) Vue des têtes d'injecteurs dans une portion de tube à flamme, par l'arrière [1].

e) Moteur fusée:

Il assure la propulsion dans l'espace car il n'utilise pas d'air. Diverses combinaisons entre produits oxydants et réducteurs sont possibles : oxygène-kérosène ($C_{10}H_{20}$), Oxygène-hydrogène, peroxyde d'azote (N_2O_4 , comburant) –UDMH (Unsymmetrical Diméthylhydrazine, Combustible), etc Des produits comportent sur la même molécules des fonctions oxydantes et réductrices (monergols, e.g., hydrazine liquide N_2H_4).

f) Moteur fusée bi-liquide:

Le fond de chambre contient un grand nombre d'injecteurs qui produit la pulvérisation des jets d'ergols liquide. Dans ce cas l'hydrogène refroidit d'abord les parois de la chambre de combustion.

Les gouttelettes liquides du combustible et du comburant sont alors dispersées, mélangées et partiellement vaporisées pour former un brouillard. Ce brouillard est le siège d'une flamme qui élève la température. Les gaz brûlés finissent de s'approcher de l'équilibre chimique en s'écoulant dans le convergent puis se détendent dans la tuyère pour fournir la poussée du moteur.

La flamme peut être considérée comme prémélangée à l'échelle macroscopique (un groupe de centaines de gouttes). A l'échelle des gouttes, on constate des zones riches en combustible et d'autres en comburant. On peut dire que de petites flammelettes de diffusion entourent les gouttes de combustible (ou de comburant).

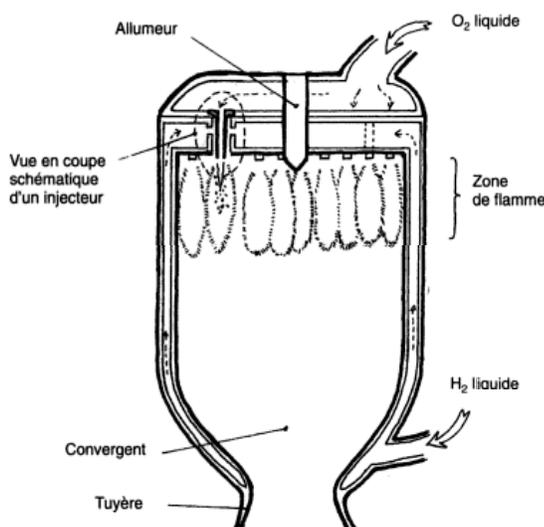


Fig. 1-7 : Schéma de principe d'un moteur-fusée bi-liquide [1]



g) Moteur à propergols solides :

Lorsqu'on allume le mélange sous forme d'un bloc solide sa surface va régresser à la vitesse de quelques *mm/sec* en libérant un débit important de gaz chauds (proportionnel à la surface qui brûle).

Le bloc de propergols est moulé à l'intérieur, bien fixé aux parois latérales et au fond, en laissant un vide qui communique avec le col de la tuyère.

Après allumage, c'est la surface intérieure correspondant au vide central qui va brûler, sa forme étant calculée de façon à contrôler sa régression, donc le débit des gaz et donc la poussée du moteur.

La flamme se réduit à une très fine zone à quelques dizaines de microns de la surface du bloc de propergols. Elle se produit en phase gazeuse après vaporisation du solide.

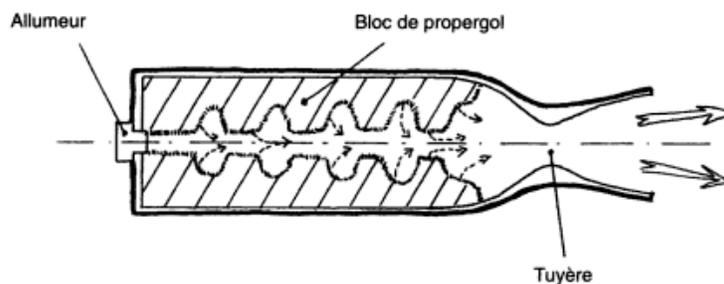


Fig. 1-8 : Vue en coupe d'un moteur-fusée à propergol solide[1]

1.2.2 Les brûleurs :

Ce sont des dispositifs domestique ou industrielle utilisés pour fournir de la chaleur.

a) Le briquet à gaz :

C'est le brûleur le plus simple. Après allumage par l'étincelle de la pierre à briquet, on obtient une flamme non-prémélangée entre le gaz naturel ($95\% \text{CH}_4$) et l'air environnant.

b) Le bec de gaz :

Il est composé d'un tube dans lequel se fait le mélange du gaz amené par un injecteur central et de l'air entraîné arrivant de l'extérieur. La fermeture de virole permet de diminuer la quantité d'air. Après allumage du mélange homogène à la sortie

du tube une flamme de pré-mélange s'y accroche et s'y maintient ; elle a l'allure conique car la vitesse des gaz qui sortent est supérieure à celle de la propagation de la flamme. Cependant la vitesse des gaz est plus faible près des parois et la flamme peut s'y accrocher et ensuite se développer en oblique à partir des lèvres du tube.

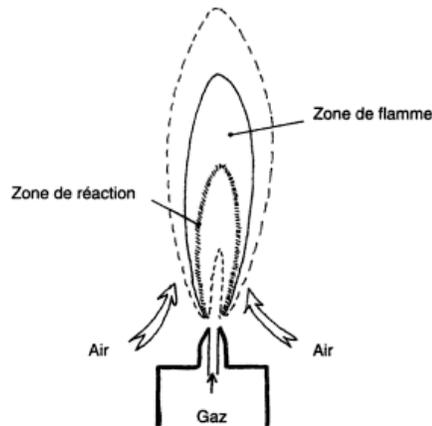


Fig. 1-9a : Flamme-jet d'un briquet à gaz [1]

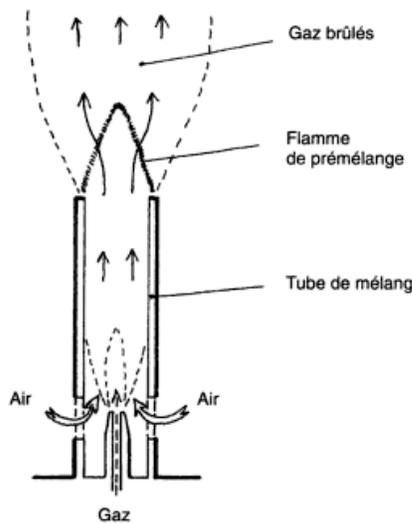


Fig. 1-9b : Flamme sur un bec de gaz classique [1]

c) Brûleur à gaz industrielle :

Le débit des gaz étant très important, l'air n'est pas seulement entraîné mis amené de façon contrôlée, un mouvement tourbillonnaire intense est organisé dans le brûleur, ce qui allonge le temps de parcours du fluide à l'intérieur et produit une turbulence

intense. Le résultat est que la combustion prend place dans le brûleur. Au fond du brûleur, on a une zone (riche en méthane plus froid. À la sortie, les gaz sont plus chauds au centre qu'à la périphérie. Ce défaut d'homogénéité est plutôt bénéfique pour la tenue des matériaux.

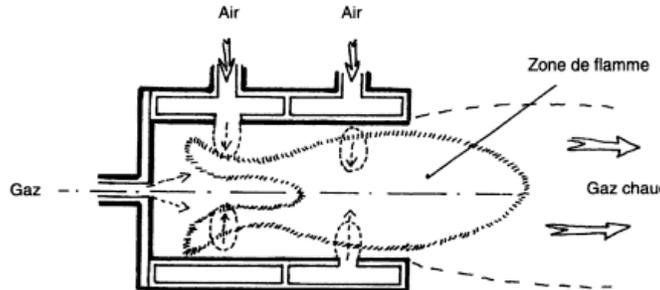


Fig. 1-10 : Brûleur à gaz à contre-rotation, l'air est par deux séries de trous, chacune le mettant en rotation dans un sens différent [1]

d) Brûleur à fuel-oil :

Le brûleur à fuel-oil étant visqueux à température ordinaire, il est préchauffé à 150°C pour qu'il soit injecté dans de bonnes conditions sous forme de gouttelettes au centre du brûleur. Le jet d'air arrive par un canal annulaire avec tourbillonnement (Swirl) de manière à accrocher la flamme sans utiliser d'obstacles. La dépression au centre produit une zone de recirculation sur l'axe. Cette dernière, alimentée à la fois par de l'air et une partie des gouttes (les plus petites) permet de stabiliser un noyau de gaz chaudes en combustion comme le font accroches-flamme. Il est possible de raccourci la flamme (plus longue par rapport à celle du brûleur à gaz précédant) en augmentant la rotation de l'air.

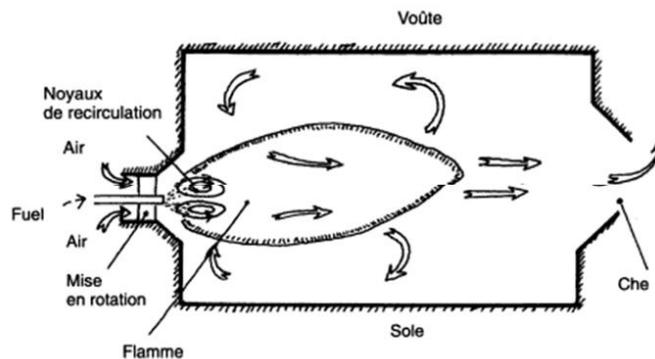


Fig. 1-11 : Schéma d'un brûleur à fuel-oil dans un four industriel [1]

e) Les brûleurs à charbon :

Dans les premiers brûleurs où foyers à charbon, le charbon cassé en morceaux (de quelques centimètres) était répandu sur grille et brûlait avec l'air qui passait au travers de cette grille et autour des morceaux. Maintenant, les brûleurs à charbon utilisent du charbon pulvérisé, ce broyé en particules de moins du millimètre de diamètre. Celles-ci peuvent alors être emportées dans un courant d'air et être injectées un peu comme un liquide.

1.3 Combustion dans la nature

C'est le cas des incendies où le rayonnement et la convection naturelle jouent un rôle important.

a) Feu de forêt :

À grande échelle c'est une flamme de prémélangée entre combustibles (arbres) et comburant (air). À petite échelle ce sont des flammelles de diffusion autour de chaque arbre ou groupe d'arbres.

b) Paroi combustible verticale :

Ça peut être un rideau ou un revêtement mural combustible. La flamme non-prémélangée se produit à environ 1 cm du mur.

c) Flamme sur une nappe de liquide combustible :

Une flamme peut se stabiliser sur une nappe de liquide combustible répandue sur un réservoir ou sur la mer par exemple.

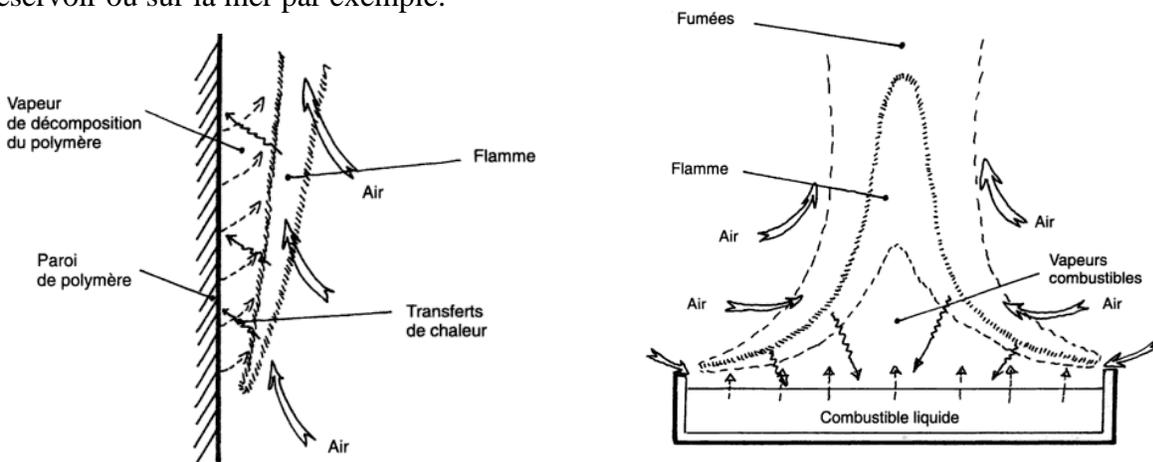
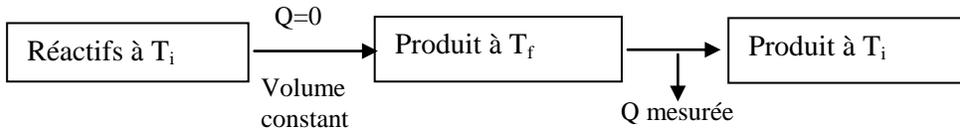


Fig. 1-12 : Flamme (à gauche) se développant près d'une paroi verticale couverte de polymère (à droite) sur un réservoir de combustible liquide [1]

Chapitre 2 : Thermodynamique de la combustion

2.1 Energie interne de réaction, enthalpie de réaction

Si la réaction chimique se fait à volume constant et les produits de la réaction sont ramenés à la température initiale des réactifs, alors l'énergie dégagée par le système est dite énergie interne de réaction ΔU_R . Elle peut être mesurée par une bombe calorimétrique.



C'est un calorimètre à volume constant, un système fermé (pas de transfert de matière) adiabatique (pas de transfert de chaleur) qui mesure des variations et non pas des valeurs absolues d'énergie.

D'après le premier principe :

$$Q = (U_{Produits})_{T_i} - (U_{Réactifs})_{T_i} = (\Delta U)_{T_i} (< 0)$$

$$= \sum_P (n_i u_i)_{T_i} - \sum_R (n_i u_i)_{T_i} \quad (2.1)$$

Où u_i est l'énergie interne par mole du produit i , et n_i le nombre de moles du produit i , (P : produits ; R : réactifs et T_i la température initiale).

Si la réaction chimique s'effectue à pression constant et les produits de la réaction sont ramenés à la température initiale des réactifs, alors l'énergie dégagée par le système est l'enthalpie de réaction ΔH

Elle peut être mesurée par le calorimètre à gaz

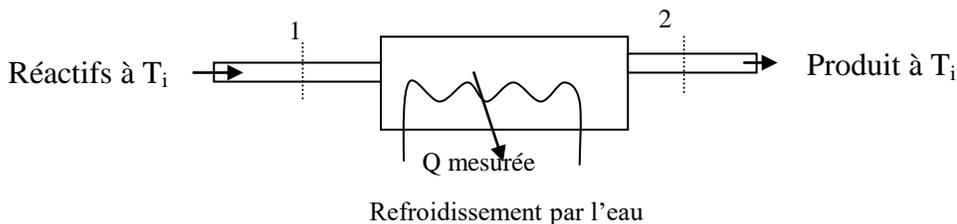


Fig. 2-1 : Calorimètre à gaz

-Pour un système ouvert :

$$H_1 + gz_1 + \frac{C_1^2}{2} + Q = H_2 + gz_2 + \frac{C_2^2}{2} + W \quad \text{kJ /kg ou kJ/kmol}$$

$$\begin{aligned} Q &= H_2 - H_1 = (H_P)_{Ti} - (H_R)_{Ti} = \Delta H_{Ti} \\ &= \sum_P (n_i h_i)_{Ti} - \sum_R (n_i h_i)_{Ti} \end{aligned} \quad (2.2)$$

h_i étant l'enthalpie par mole du produit, la relation entre ΔU et ΔH est comme suit :

$$\begin{aligned} \Delta H &= H_p - H_R = (U_P + P_P V_p) - (U_R + P_R V_R) \\ &= \Delta U + R_u T_i (n_p - n_R) \end{aligned} \quad (2.3)$$

Les espèces étant supposées être des gaz parfaits.

Dans les problèmes de combustion ΔU et ΔH sont des paramètres de base .Cependant, ce n'est pas pratique de tabuler toutes les enthalpies de réactions que peut subir un composé chimique avec d'autres substances d'où l'intérêt d'un paramètre plus fondamentale, c'est l'enthalpie de formation (et aussi l'énergie interne de formation)

2.2 Enthalpie de formation

L'enthalpie de formation d'un composé est l'augmentation d'enthalpie quand un composé est formé à partir de ses éléments constituants dans leur forme naturelle la plus stable dans l'état de référence (1 atmosphère, 298 K) des éléments des réactifs et des produits.

La forme naturelle stable de l'hydrogène, l'oxygène, l'azote et le carbone sont $H_{2(gaz)}$, $O_{2(gaz)}$, $N_{2(gaz)}$, $C_{(solide)}$ (graphite et nom pas diamant).

La chaleur spécifique à pression constant : $C_p = \left(\frac{\partial h}{\partial T}\right)_p$

$$\text{Pour un gaz parfait : } C_p = \frac{dh}{dT} \quad \therefore dh = C_p dT \quad \therefore h = \int_0^T C_p dT + h_0 \quad \text{où } h = h_0 \text{ à } T=0$$

Si l'on réécrit $h = h(T) + h_0$, alors l'enthalpie de réaction:

$$\Delta H = H_P - H_R = [\sum n_i (h(T) + h_0)_i]_P - [\sum n_i (h(T) + h_0)_i]_R \quad (2.4)$$

En générale la différence $[\sum n_i h_{0i}]_P - [\sum n_i h_{0i}]_R$ n'est pas nécessairement nulle quand il ya changement de composition dans un mélange de gaz, il est plus convenable de réécrire, voir la figure (2.2) :

$$h = h_{298} + h(T) - h(298) \quad (2.5)$$

Utilisons la notion d'enthalpie de formation pour calculer l'enthalpie de réaction à 298 K de la combustion complète de CH_4 : $CH_4 + 2O_2 \rightarrow CO_2 + 2H_2O$



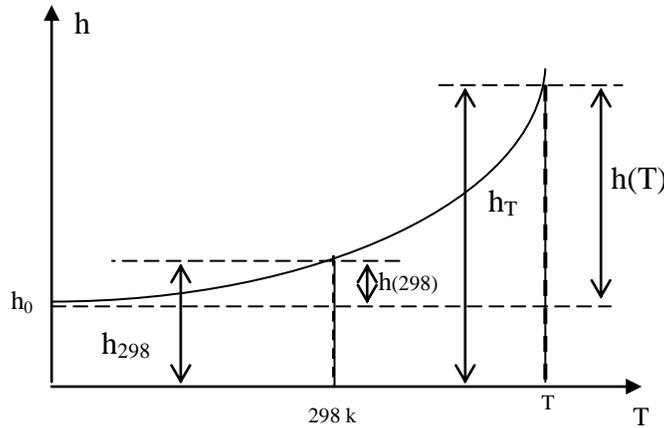


Fig. 2-2 : Calcul de l'enthalpie de la réaction.

$$\Delta H_{298} = H_{P298} - H_{R298} = (h_{CO_2} + 2h_{H_2O})_{298} + (h_{CH_4} + 2h_{O_2})_{298}$$

L'enthalpie de formation de chacun des constituants :

$$(\Delta H_{fO_2})_{298} = 0, \text{ étant dans sa forme naturelle stable}$$

$$(\Delta H_{fCO_2})_{298} = (h_{CO_2})_{298} - (h_C + h_{O_2})_{298}, \quad \text{car } C + O_2 \rightarrow CO_2$$

$$(\Delta H_{fH_2O})_{298} = (h_{H_2O})_{298} - (h_{H_2} + 1/2h_{O_2})_{298}, \quad \text{car } H_2 + 1/2O_2 \rightarrow H_2O$$

$$(\Delta H_{fCH_4})_{298} = (h_{CH_4})_{298} - (h_C + 2h_{H_2})_{298}, \quad \text{car } C + 2H_2 \rightarrow CH_4$$

En substituant pour h_{CO_2} , h_{H_2O} et h_{CH_4} à 298K dans l'enthalpie de réaction :

$$\Delta H_{298} = [(\Delta H_{fCO_2} + h_C + h_{O_2}) + 2(\Delta H_{fH_2O} + h_{H_2} + 1/2h_{O_2})]_{298} - [(\Delta H_{fCH_4} + h_C + 2h_{H_2}) + 2(h_{O_2})]_{298} \quad (2.6)$$

A noter que les enthalpies de tous les éléments de base s'annulent (C, H_2 et O_2), on peut donc les mettre égales à zéro arbitrairement. On obtient :

$$\Delta H_{298} = [(\Delta H_{fCO_2}) + 2(\Delta H_{fH_2O})]_{298} - [(\Delta H_{fCH_4})]_{298} \quad (2.7)$$

On écrira donc l'enthalpie d'un composé comme la somme de l'enthalpie de sa formation à l'état standard + l'augmentation de l'enthalpie de la température 298 K à la température T. Par exemple :

$$\begin{aligned} (h_{CH_4})_T &= (h_{CH_4})_{298} + h(T) - h(298) = (\Delta H_{fCH_4})_{298} + \overset{0}{h_C} + 2\overset{0}{h_{H_2}} + h(T) - h(298) \\ &= (\Delta H_{fCH_4})_{298} + h(T) - (h_{CH_4})_{298} \end{aligned}$$

En générale à T=298 K :

$$\Delta H = H_P - H_R = \left[\sum n_i \Delta H_{f298} \right]_P - \left[\sum n_i \Delta H_{f298} \right]_R$$

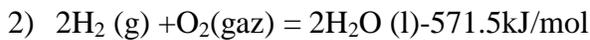
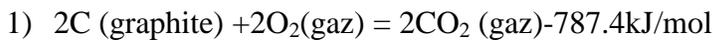
A une température T :

$$\Delta H = H_P - H_R = \left[\sum n_i h_{iT} \right]_P - \left[\sum n_i h_{iT} \right]_R$$

$$\Delta H = \sum_{prod} n_i \left[\Delta H_{f298} + h(T) - h(298) \right]_i - \sum_{Réac} n_i \left[\Delta H_{f298} + h(T) - h(298) \right]_i \quad (2.8)$$

En conclusion. Au lieu d'exiger la mesure de milliers de ΔH des réactions chimiques utiles, il suffit de connaître les ΔH_f des composés utiles pour déduire les ΔH .

Remarque : C'est possible de déduire ΔH_{f298} d'un composé indirectement par exemple l'éthylène C_2H_4 n'est pas produit facilement à partir de C et H_2 . Par contre, on obtient facilement les résultats suivants.



On déduit donc que l'enthalpie de formation de l'éthylène est :

$$\left(\Delta H_{fC_2H_4} \right)_{298} = +52.11 \text{ kJ/mol}$$

2.3 Généralisation du 1^{er} principe aux systèmes réactifs

-Pour un système fermé : $Q = \Delta U + W$

En présence d'une réaction chimique, la variation de l'énergie interne, des réactifs à la température T_i aux produits à la température T_f est :

$$\Delta U = (U_P)_{T_f} - (U_R)_{T_i} = \left[(U_P)_{T_f} - (U_P)_{298} \right] + \left[(U_P)_{298} - (U_R)_{298} \right] + \left[(U_R)_{298} - (U_R)_{T_i} \right] \quad (2.9)$$

Où $(U_P)_{298} - (U_R)_{298} = \Delta U_{298}$ est l'énergie interne de réaction

-Pour un système ouvert : les réactifs à T_i et les produit à T_f

$$h_1 + gz_1 + \frac{C_1^2}{2} + Q = h_2 + gz_2 + \frac{C_2^2}{2} + W. \quad (2.10)$$

- Si les enthalpies de formation sont données:

$$h_2 - h_1 = \sum_{prod} n_i \left[\Delta H_{f298} + h(T_f) - h(298) \right]_i - \sum_{Réac} n_i \left[\Delta H_{f298} + h(T_i) - h(298) \right]_i \quad (2.11)$$

Où

$$\Delta H_{R298} = \sum_{prod} n_i [\Delta H_{f,298}]_i - \sum_{Réac} n_i [\Delta H_{f,298}]_i \quad (2.12)$$

Example:

a) Pour déterminer le pouvoir calorifique d'octane (C₈H₁₈) à l'aide d'une bombe calorimétrique contenant un mélange stœchiométrique de (C₈H₁₈) et d'O₂, la masse d'octane est 0.543g. Celle de l'eau (+l'équivalent en eau du calorimètre) est 2.679kg. l'augmentation de température de l'eau est 2.33k. calculer la valeur inférieure de l'énergie interne de réaction. prendre l'énergie interne de condensation de la vapeur d'eau égale à 44 MJ/kmol.

b) Si la pression et la température initiales étaient 25 atm et 300 K respectivement et s'il y avait 300 % d'excès d'oxygène estimer la pression et la température maximales juste après allumage (adiabatique) durant ce temps .

$$(U_{300})_{O_2}=6.4 \text{ MJ/kg-mol}, \quad (U_{300})_{H_2O}=7.5 \text{ MJ/kg-mol}, \quad (U_{300})_{CO_2}=5.5 \text{ MJ/kg-mol}$$

Supposant que $U_{H_2O}=1.3U_{O_2}$ et $U_{CO_2}=1.6U_{O_2}$ (pour résoudre l'équation de température T)

Solution

a) La chaleur dégagée par la combustion et par l'eau est

$$\Delta Q = -(mc \Delta T) = -2.679kg \times \frac{4.18kJ}{kg.k} \times 2.33k = 26.09kJ$$

Le pouvoir calorifique supérieur de l'octane

$$PCS = \frac{26.09kJ}{0.543 \times 10^{-3}kg} = 48051.6kJ/kg$$

A noter que l'eau est condensée, 1kmol de C₈H₁₈ pèse 8.12+1.18=114kg

Donc l'énergie interne de réaction (valeur supérieur) par kmol de C₈H₁₈

$$\Delta H_{sup} = -48051.6 \times 114 = -5477.9MJ/kmol.$$

L'équation de la réaction est : C₈H₁₈ + 12.5O₂ → 8CO₂ + 9H₂O

Donc 1 kmol d'octane produit 9 kmol d'eau qui en condensant dégagent 9x44 MJ=396MJ de chaleur

D'onc la valeur inférieure : $\Delta U_{R inf} = -(5477.9 - 396) = -5081.9kJ/kmol$

b) Calcule de la température à partir du 1^{er} principe :

$$\Delta Q = \Delta U + \Delta W \quad \therefore U_{P300} - U_{R300} = 0$$

$$(U_{PT} - U_{P300}) + \underbrace{(U_{P300} - U_{R300})}_{\text{Valeur inférieure de l'énergie interne de réaction}} = 0$$

Valeur inférieure de l'énergie interne de réaction



Avec excès d'oxygène de 300 %, l'équation de la réaction s'écrit :



$$\therefore 8. [U_T - U_{300}]_{CO_2} + 9. [U_T - U_{300}]_{H_2O} + 37.5. [U_T - U_{300}]_{O_2} + (-5081.9) = 0$$

Tirant $[U_{300}]_{CO_2, H_2O}$ et O_2 à partir des tables thermodynamique

$$8. [U_T]_{CO_2} + 9. [U_T]_{H_2O} + 37.5. [U_T]_{O_2} - 350.1 - 5081.9 = 0$$

Supposant que $U_{CO_2} \approx 1.6U_{O_2}$ et $U_{H_2O} \approx 1.3U_{O_2}$ (nombre de moles de O_2 étant dominant)

Donc :

$$(8 \times 1.6 + 9 \times 1.3 + 37.5)U_{O_2} = 5432 MJ/kmol \rightarrow U_{O_2} = 86 MJ/kmol$$

Dans les tables thermodynamique cette valeur correspond à $T_2=3150K$ (Fig.2-3).

Pour cette valeur :

$$U_{O_2} = 86.6, U_{H_2O} = 146, U_{CO_2} = 133.1 MJ/kmol$$

$$8. [U]_{CO_2} + 9. [U]_{H_2O} + 37.5. [U]_{O_2} = 5613 MJ/kmol \text{ (Valeur trop grande)}$$

$$\text{Essayer } T_2=3100 K, U_{O_2} = 85, U_{H_2O} = 143.6, U_{CO_2} = 122.11 MJ/kmol$$

$\rightarrow U_{P 3100} \approx U_{R 300}$: donc valeur satisfaisante

$$P_1 V_1 = n_1 R T_1 \text{ et } P_2 V_2 = n_2 R T_2 \rightarrow P_2 = P_1 \times T_2 / T_1 \times n_2 / n_1$$

Or $n_1=50$ et $n_2=54.5$ (pour obtenir le nombre de moles ne pas considérer la phase liquide de l'octane, H_2O supposé gaz parfait)

$$\therefore P_2 = 281.6 \text{ atm.}$$

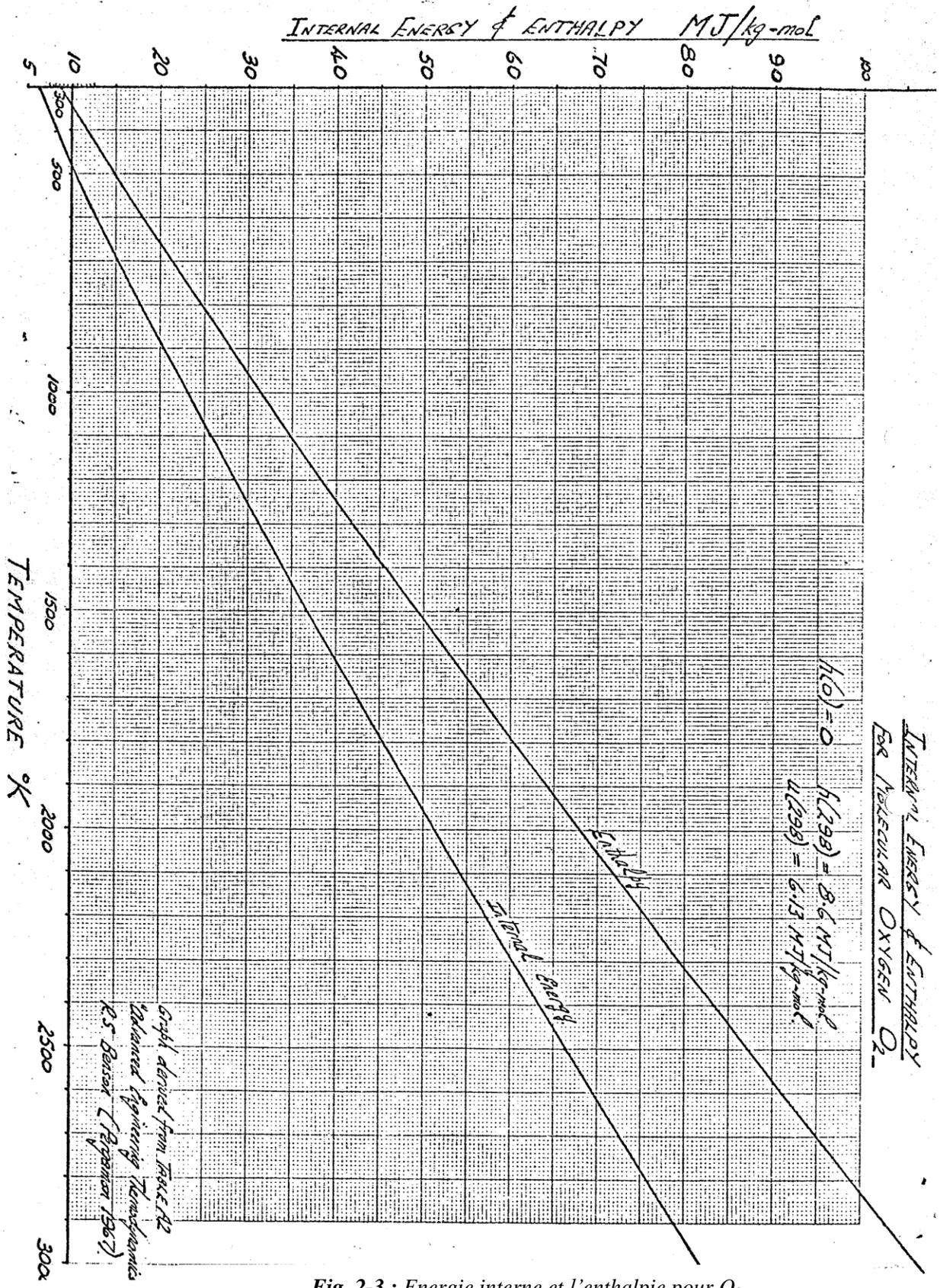


Fig. 2-3 : Energie interne et l'enthalpie pour O₂



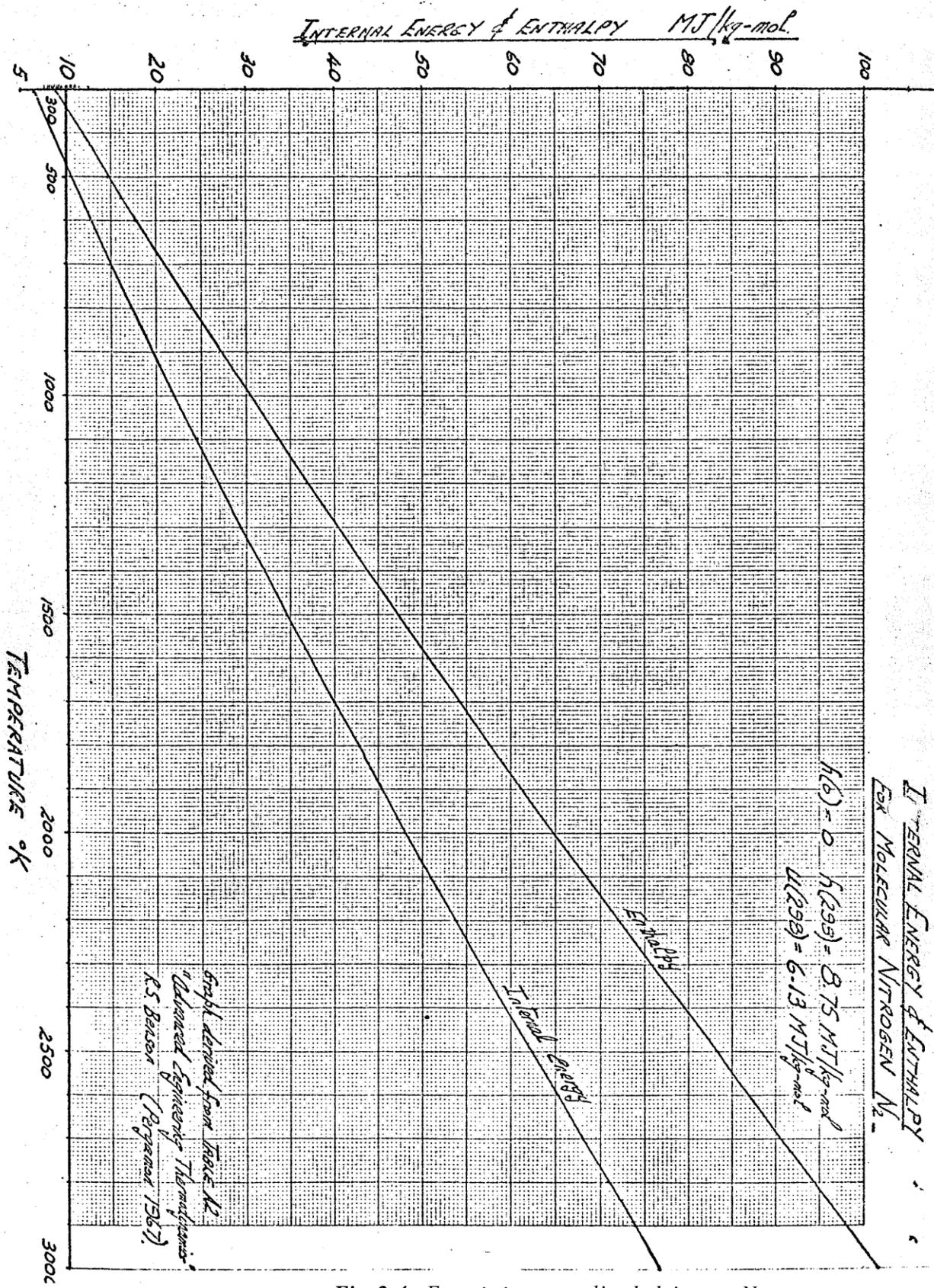


Fig. 2-4 : Energie interne et l'enthalpie pour N_2



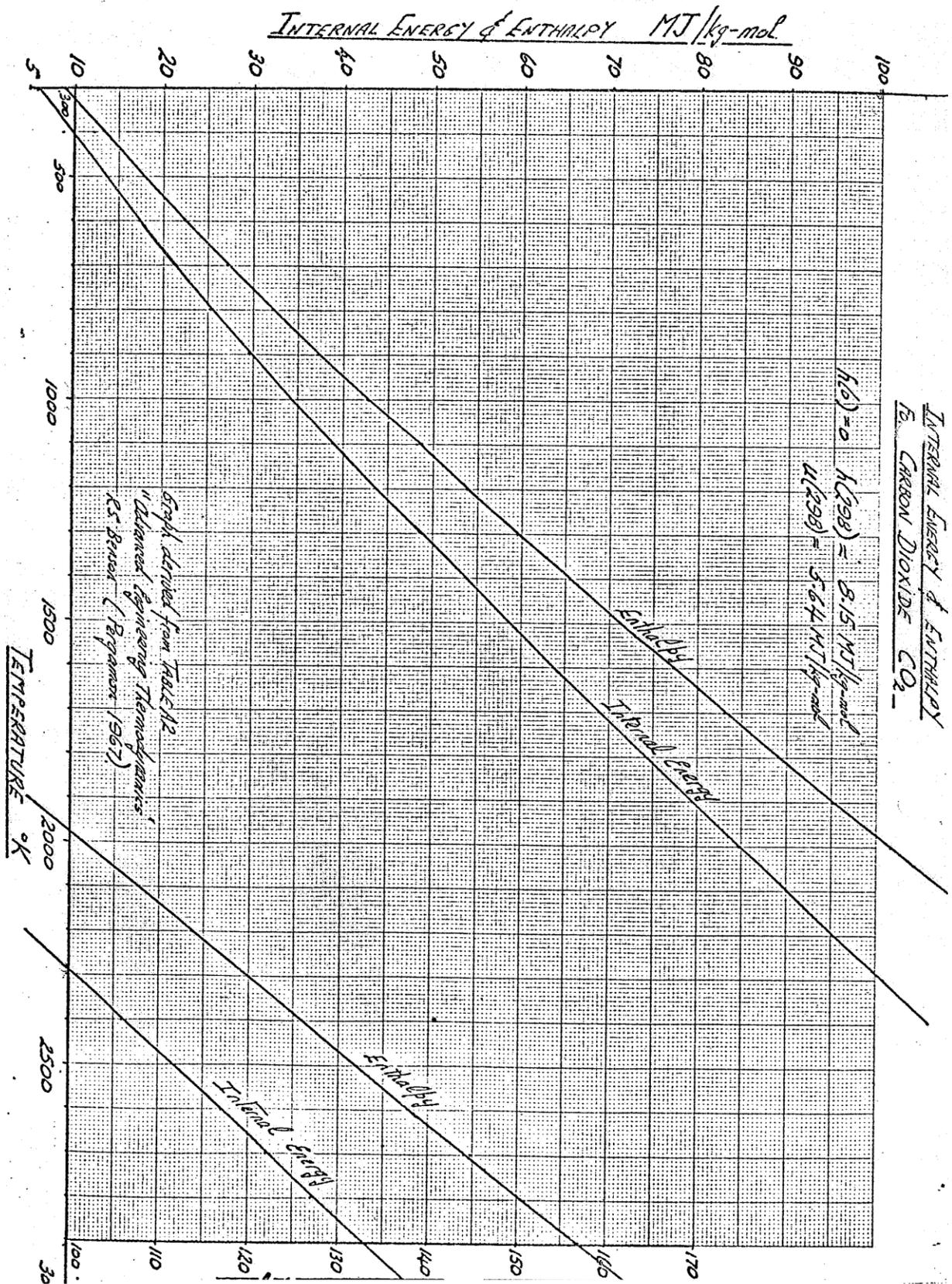


Fig. 2-5 : Energie interne et l'enthalpie pour CO₂



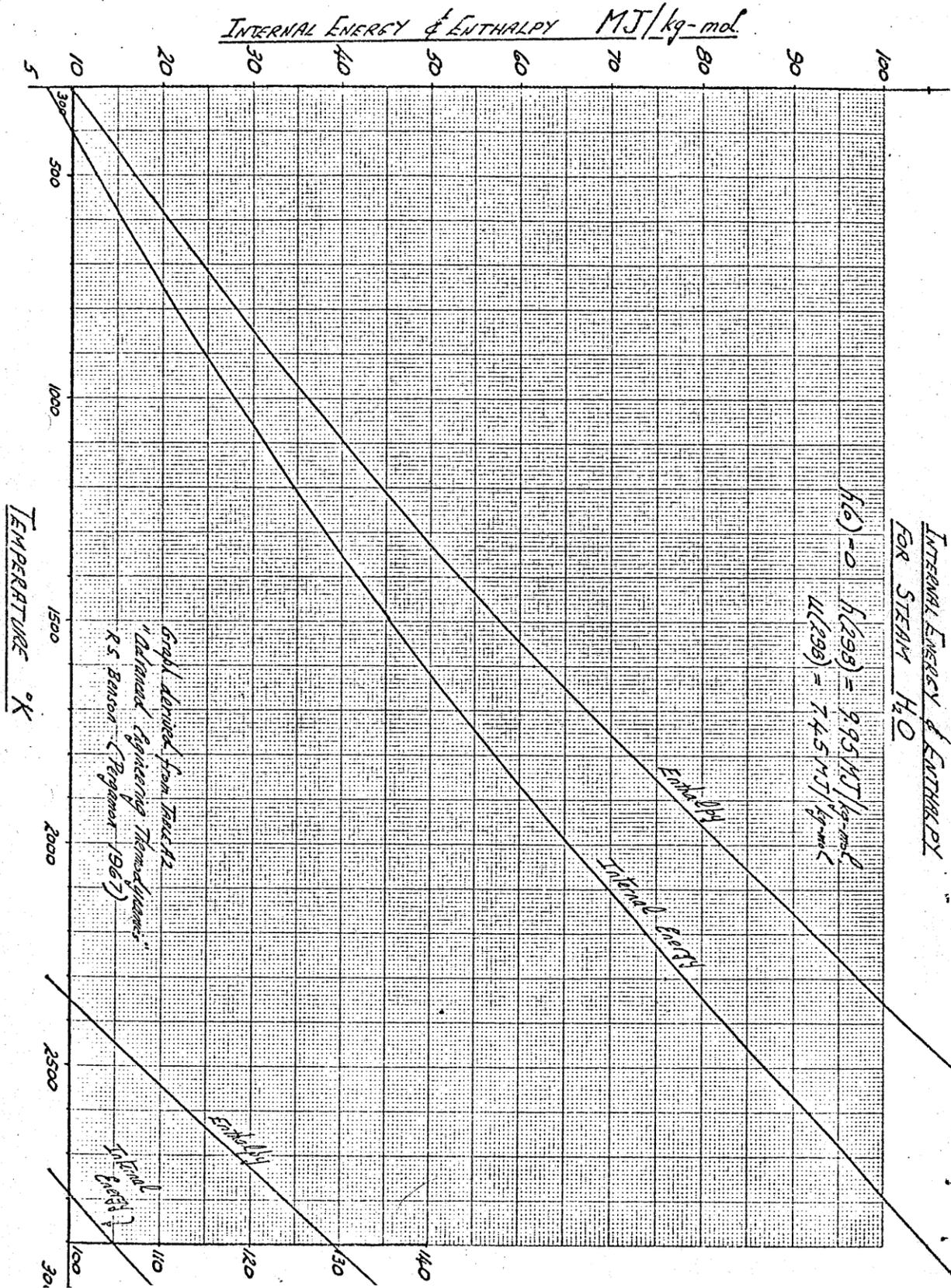


Fig. 2-6 : Energie interne et l'enthalpie pour H₂O



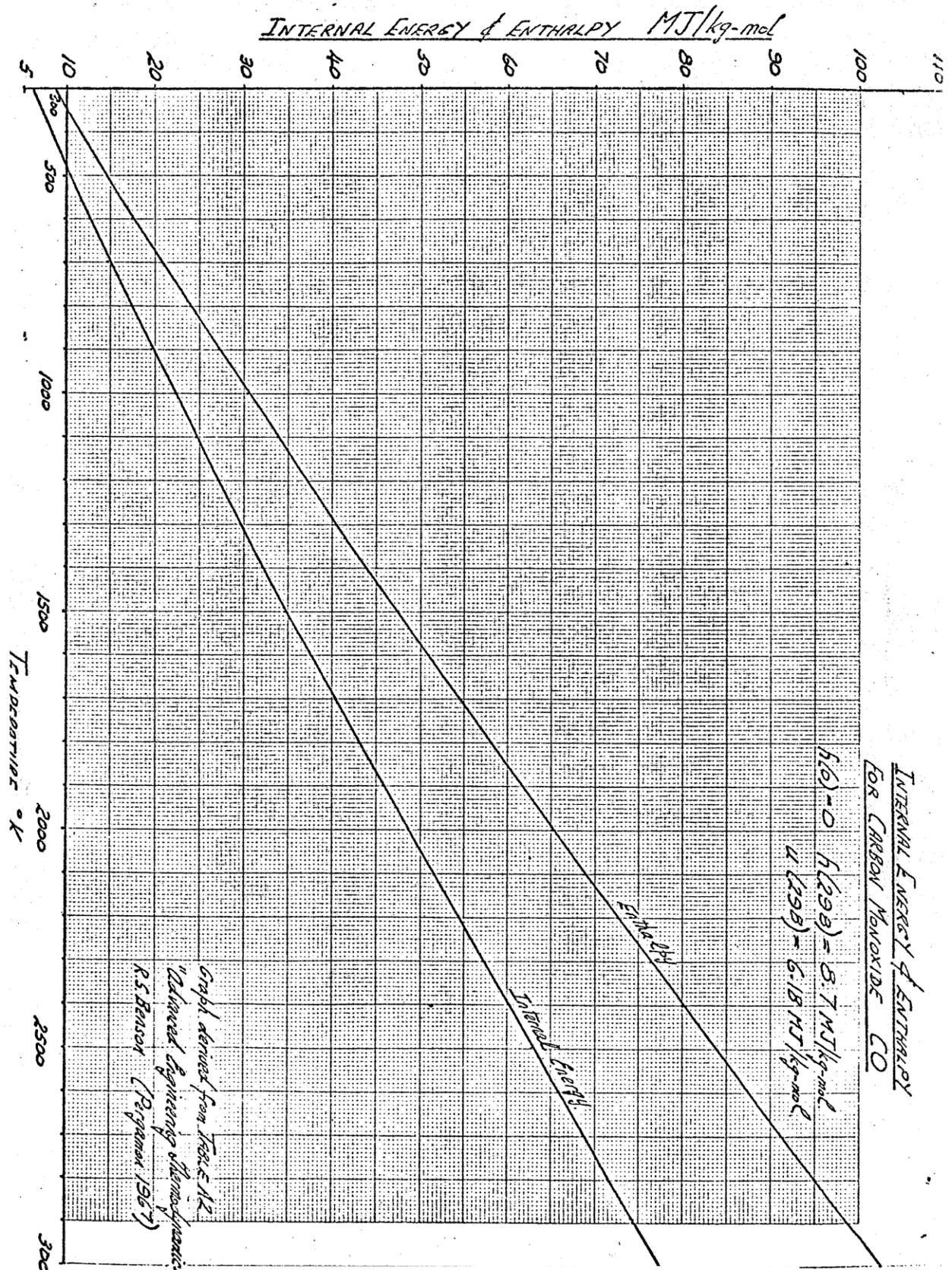


Fig. 2-7 : Energie interne et l'enthalpie pour CO



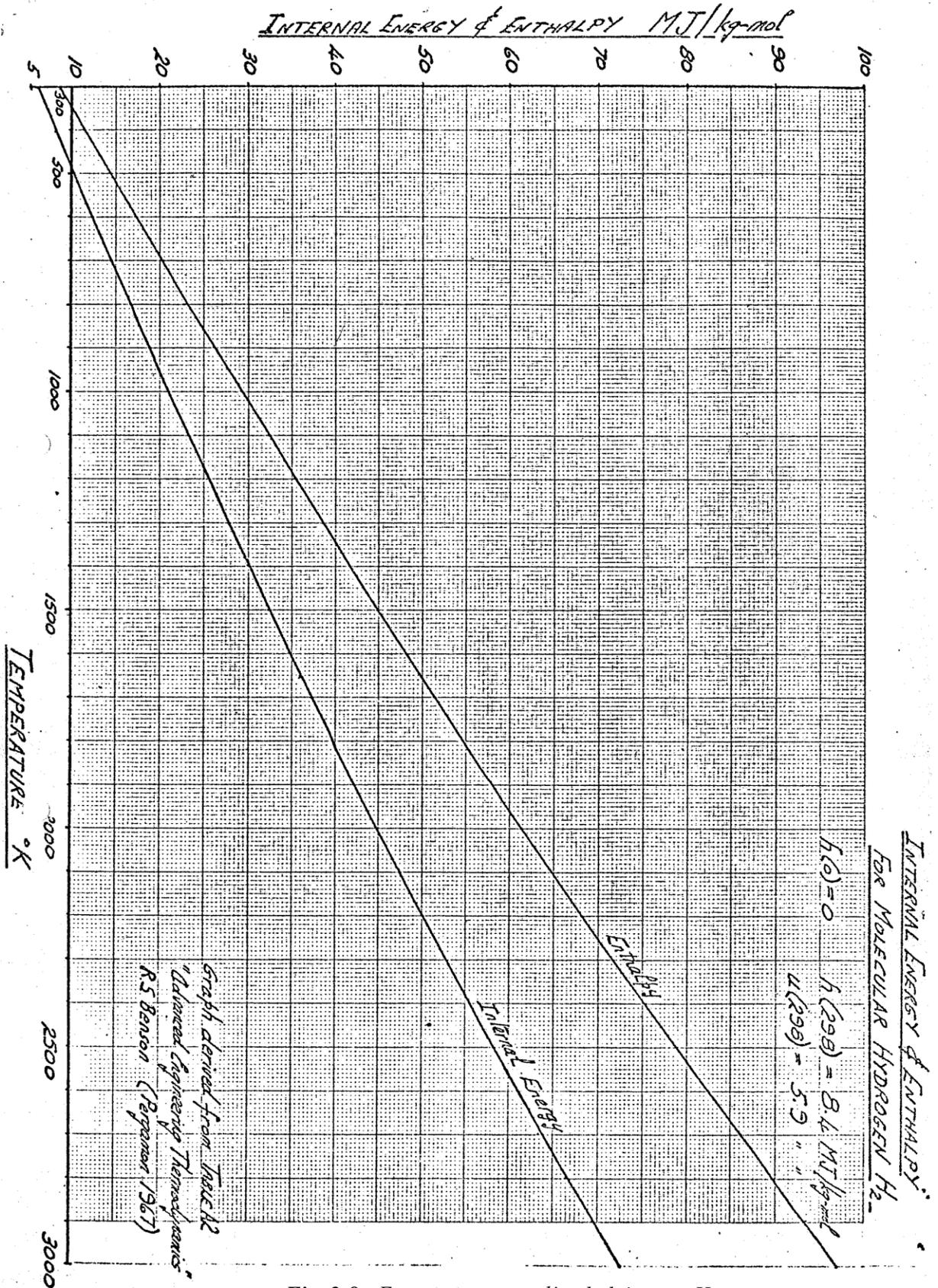


Fig. 2-8 : Energie interne et l'enthalpie pour H₂

2.4 Variation de l'entropie dans un milieu réactif

L'augmentation de l'enthalpie dans un système isolé (2^{ème} principe de la thermodynamique) a pour effet d'empêcher une combustion complète. Cela nous mène au phénomène de dissociation et donc une réduction de la température théorique de combustion, ex : $CO + \frac{1}{2} O_2 \rightarrow (1 - \alpha) CO_2 + \alpha CO + \alpha/2 O_2$

Où α est le degré de dissociation.

2.4.1 Entropie d'un gaz parfait :

Une variation infinitésimale d'entropie s'exprime :

$$ds = \frac{dQ}{T} = \frac{du + Pdv}{T} = \frac{dh - v dP}{T} = \frac{dh}{T} - R_u \frac{dP}{P} \quad (2.13)$$

h étant une fonction de la température, l'intégration donne

$$s = \int_0^T \frac{dh}{T} - R_u \ln\left(\frac{P}{P_0}\right) + s_0 \quad (2.14)$$

Les quantités Q, u, h, v et s sont par mole gaz.

$$\text{En écrivant } s(T) = \int_0^T \frac{dh}{T}$$

Alors :

$$s = s(T) - R_u \ln\left(\frac{P}{P_0}\right) + s_0 \quad (2.15)$$

Il n'est pas nécessaire de définir dans ce cas « une entropie de formation » pour contourner le problème de la détermination de S_0 . En effet, d'après le 3^{ème} principe de la thermodynamique, l'entropie tend vers zéro quand la température absolue tend vers zéro.

Donc :

$$s = s(T) - R_u \ln\left(\frac{P}{P_0}\right) \quad (2.16)$$

Si on prend $P_0=1$ atm par convention, alors :

$$s = s(T) - R_u \ln(P)$$

P : pression en atmosphère, R_u constante universelle des gaz et s : entropie en kJ/mol.K

2.4.2 Variation de l'entropie lors d'une réaction chimique

La variation de l'entropie s'exprime comme suit :

$$\Delta S = \sum_{prod} n_i s_i - \sum_{Réac} n_i s_i \quad (2.17)$$

n_i étant le nombre de moles de l'espèce i dans le mélange et s_i est l'entropie absolue de l'espèce i à la température et la pression partielle données.

On se propose de déterminer la variation d'entropie en considérant comme exemple, la combustion à pression constante du mélange CO (gaz) / H₂O (vapeur) de ratio molaire 1 :1 pénétrant en régime stationnaire une chambre de combustion adiabatique à 400 K et 1 atm pression totale. Négliger les variations en énergie potentielle et cinétique.

-Pour ce système ouvert :

$$0 = H_{produits} - H_{réactifs}$$

Donc:

$$0 = \sum_{Pi} n_i [\Delta H_f + h(T) - h(298)]_i - \sum_{Ri} n_i [\Delta H_f + h(400) - h(298)]_i$$

$$0 = n_{CO_2} [\Delta H_f + h(T) - h(298)]_{CO_2} + n_{H_2} [\Delta H_f + h(T) - h(298)]_{H_2} - n_{CO} [\Delta H_f + h(400) - h(298)]_{CO} - n_{H_2O} [\Delta H_f + h(400) - h(298)]_{H_2O}$$

En fait, cette équation est satisfaite pour T≈900k . Maintenant :

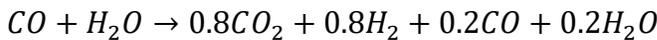
$$\Delta s = n_{CO_2} [s_{CO_2}(T) - R_u \ln(P_{CO_2})] + n_{H_2} [s_{H_2}(T) - R \ln(P_{H_2})] - n_{CO} [s_{CO}(400) - R_u \ln(P_{CO})] - n_{H_2O} [s_{H_2O}(400) - R_u \ln(P_{H_2O})]$$

Les pressions partielles sont déduites des fractions molaires

$$P_{CO} = \frac{\text{Pression totale des réactifs} \times \text{nombre de moles de CO}}{\text{nombre de moles total des réactifs}} = \frac{1 \text{ atm} \times 1}{2} = 0.5 \text{ atm}$$

De même $P_{H_2O} = 0.5 \text{ atm}$; $P_{CO_2} = 0.5 \text{ atm}$; $P_{H_2} = 0.5 \text{ atm}$

ΔS est calculé après avoir tiré les valeurs de S(T) des espèces à partir des abaques. Cette augmentation de l'entropie correspond à une réaction complète qui n'est pas nécessairement réelle. Supposant maintenant une réaction incomplète avec un degré d'avancement de 80%



On obtient $\Delta s_{80\%} > \Delta s_{100\%}$

Si en fait des calculs similaires pour différents degrés d'avancement, l'augmentation maximale d'entropie est pour 70% de CO et H₂O réagissant. C'est l'état d'équilibre, voir figure (2.9).

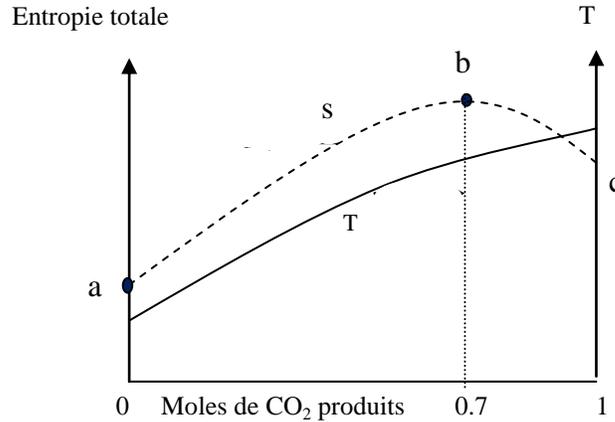


Fig. 2-9 : L'état d'équilibre

2.5 Autres critères d'équilibre plus convenables

En combinant les 1er et 2ème principes on a :

$$dU + PdV - TdS \leq 0 \quad (2.18)$$

Doc nous avons deux cas (=0 réversible ; < irréversible).

Soit un système contenant un mélange d'espèces en équilibre chimique : l'entropie est maximale. Toute déviation infinitésimale de cet état d'équilibre est telle que $dS = 0$. Donc réversible, si le système est à volume constant ($dV = 0$) alors $(dU)_{V,S} = 0$.

Cette condition d'équilibre n'est pas convenable dans la pratique puisque la condition $S = \text{constante}$ est difficile à obtenir car S ne peut pas être mesurée directement.

Des critères d'équilibre plus convenables peuvent être formulés grâce à de nouvelles fonctions d'état :

-L'énergie libre où fonction de Helmotz : $A = U - TS$

-L'enthalpie libre où fonction de Gibbs : $G = H - TS$

-L'équation (2.18) est réécrite : $d(U - TS) + PdV + SdT \leq 0$

Pour un système à volume et à température constantes

$$d(U - TS)_{V,T} \leq 0 \quad \text{où} \quad (dA)_{V,T} \leq 0$$

Donc la fonction de Helmotz minimale correspond à une condition d'équilibre pour un système à volume et température constants.

L'équation (2.18) peut être réécrite

$$d(U - TS + PV) - VdP + SdT \leq 0 \quad (2.19)$$

Pour un système à pression et température constantes

$$d(U - TS + PV)_{P,T} \leq 0 \text{ , ou } d(H - TS)_{P,T} \leq 0 \text{ ou } dG_{P,T} \leq 0$$

Donc la fonction de Gibbs minimale correspond à une condition d'équilibre pour un système à pression et température constantes.

-Interprétation physique de A et G

Considérons un système effectuant un travail dW , à température constants alors $TdS \geq dW + dU \quad \therefore -d(U - TS) \geq dW \quad \therefore -d(A) \geq dW \quad (2.20)$

Lors d'une transformation isotherme d'un système, la diminution de la fonction de Helmotz est le travail maximal que peut effectuer ce système. Le terme TS est une mesure de l'énergie non-disponible.

- Si maintenant le système effectue un travail dW à pression et température constantes, alors une partie de ce travail sera fournie pour maintenir une pression constante $PdV = d(PV)$ donc le travail utile disponible est $dW' = dW - d(PV)$, on a donc $-d(U - TS) \geq dW' + d(PV)$

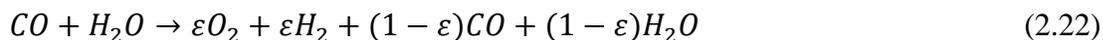
$$\therefore -d(U + PV - TS) \geq dW' \quad \therefore -d(G) \geq dW' \quad (2.21)$$

Lors d'un procédé isotherme et isobare (par exemple réaction chimique à température et pression constantes) la diminution de la fonction de Gibbs est le travail maximal utile que l'on peut tirer du système.

Exemple :

On peut utiliser la fonction de Gibbs pour établir l'état d'équilibre, à une température et une pression données, du mélange dont les réactifs sont initialement CO et H₂O, le problème est de trouver donc les concentrations de CO, H₂O, CO₂ et H₂ constituant la composition d'équilibre .

Pour un degré d'avancement ϵ de la réaction on a :



pour cette valeur de ϵ , à une température et une pression données la fonction de Gibbs totale des produits est obtenue en faisant la somme des fonctions G_i des espèces i (par exemple de $G_i = H_i - TS_i$).

Si l'on trace la variation de la fonction de Gibbs totale G_T en fonction du degré d'avancement de la réaction de $\epsilon=0$ (0 réaction) à $\epsilon=1$ (réaction complète) on obtient la allure illustrée ci-dessous, la valeur minimale de G_T correspond à l'équilibre.



A noter que si on a initialement un mélange de CO₂ et H₂ à ces mêmes pression et température (point c) une transformation spontanée s'effectuera jusqu'au point d'équilibre b.

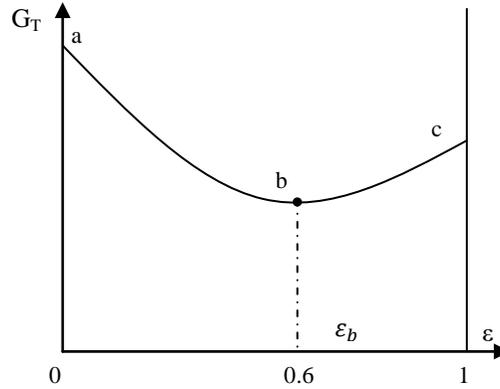


Fig. 2-10: Transformation spontanée s'effectuera jusqu'au point d'équilibre b.

2.6 Equilibre chimique dans le cas d'un mélange de gaz parfait

2.6.1 La fonction de Gibbs ou enthalpie libre d'un gaz parfait

Par définition $g = h - Ts$ (lettres minuscules pour quantités spécifiques : par unité de mole du gaz)

$$\text{où } h = h(T) + h_0 \text{ et } s = s(T) - R_u \ln\left(\frac{P}{P_0}\right) + s_0 \quad (2.23)$$

$$\therefore g = (h_0 - Ts_0) + [h(T) - Ts(T)] + R_u T \ln\left(\frac{P}{P_0}\right) \quad (2.24)$$

En posant $g_0 = (h_0 - Ts_0)$ et $g(T) = h(T) - Ts(T)$.

$$\text{Alors } g = g_0 + g(T) + R_u T \ln\left(\frac{P}{P_0}\right) \quad (2.25)$$

Si on définit $g^0 = g_0 + g(T)$.

$$\text{Alors } g = g^0 + R_u T \ln\left(\frac{P}{P_0}\right) \quad (2.26)$$

g^0 est l'enthalpie libre à la température T et à la pression atmosphérique. Elle dépend de la température seulement. Pour un constituant i ayant une pression partielle p_i dans un mélange de gaz, alors $g_i = g_i^0 + R_u T \ln(P_i)$ avec $P_0 = 1 \text{ atm}$

2.6.2 Mélange de gaz parfait à l'équilibre chimique

L'enthalpie libre d'un mélange de gaz parfait est :

$$G_T = \sum_i n_i g_i = \sum_i n_i \left(g_i^0 + R_u T \ln(P_i) \right) \quad (2.27)$$

Au cours d'une réaction chimique cette fonction va varier puisque des espèces parmi les réactifs vont disparaître et d'autres parmi les produits vont apparaître considérons l'équation de la réaction chimique :



A, B, A', B' : sont les espèces chimiques

$\gamma_A, \gamma_B, \gamma'_{A'}, \gamma'_{B'}$: sont les coefficients stœchiométriques

Si une quantité infinitésimale de réactifs, à la température T et aux pressions partielles P_i des espèces i respectives, est combinée pour former des produits selon l'équation (2.28), alors l'enthalpie libre de chaque espèce des réactifs diminue de $(g_i^0 + RT \ln(P_i)) dn_i$ et celle des produits augmente.

Donc la variation infinitésimale de la fonction de Gibbs totale G_T du système à pression et température constantes est :

$$dG_T = -\left(g_A^0 + R_u T \ln(P_A)\right) dn_A - \left(g_B^0 + R_u T \ln(P_B)\right) dn_B - \dots + \left(g_{A'}^0 + R_u T \ln(P_{A'})\right) dn_{A'} + \left(g_{B'}^0 + R_u T \ln(P_{B'})\right) dn_{B'} + \dots \quad (2.29)$$

Si le paramètre ε représente l'avancement de la réaction (au début de la réaction $\varepsilon=0$, à la fin de la réaction $\varepsilon=1$).

On a alors :

$$dn_A = \gamma_A d\varepsilon, \quad dn_B = \gamma_B d\varepsilon, \quad dn_{A'} = \gamma_{A'} d\varepsilon, \quad dn_{B'} = \gamma_{B'} d\varepsilon \quad \text{etc ...}$$

Quand la composition finale des produits est à l'équilibre (pour une valeur de ε entre 0 et 1) la valeur de G_T est minimale.

Donc :

$$dG_T = 0, \quad \text{en posant } \Delta G_T^0 = \gamma_{A'} g_{A'}^0 + \gamma_{B'} g_{B'}^0 + \dots - \gamma_A g_A^0 - \gamma_B g_B^0 - \dots$$

On obtient :

$$\Delta G_T^0 = -RT [\gamma_{A'} \ln P_{A'} + \gamma_{B'} \ln P_{B'} + \dots - \gamma_A \ln P_A - \gamma_B \ln P_B - \dots] \\ \therefore \frac{\Delta G_T^0}{R_u T} = \ln \left[\frac{(P_{A'})^{\gamma_{A'}} \cdot (P_{B'})^{\gamma_{B'}} \dots}{(P_A)^{\gamma_A} \cdot (P_B)^{\gamma_B} \dots} \right] \quad (2.30)$$

Le premier membre de l'équation dépend de la température seulement, donc le second l'est aussi.

$$\text{En d'autres termes, } K_p = \frac{(P_{A'})^{\gamma_{A'}} \cdot (P_{B'})^{\gamma_{B'}} \dots}{(P_A)^{\gamma_A} \cdot (P_B)^{\gamma_B} \dots} \quad (2.31)$$

K_p est une constante pour une température donnée, appelée constante d'équilibre. Elle est généralement tabulée en fonction de la température pour chaque réaction d'équilibre.

Remarque : attention

Pour la réaction a) $CO + \frac{1}{2}O_2 \rightarrow CO_2$ on a K_{p_a}

Pour la réaction b) $CO_2 \rightarrow CO + \frac{1}{2}O_2$ on a $K_{p_b} = \frac{1}{K_{p_a}}$

Pour la réaction c) $2CO + O_2 \rightarrow 2CO_2$ on a $K_{p_c} = (K_{p_a})^2$

Ideal Gas Reaction Equilibrium Constants

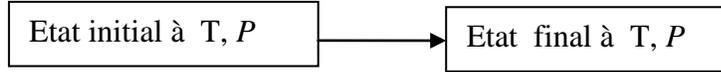
T°K	Kp	$\frac{1}{K_{p_a}}$		K_{p_a}		K_{p_c}	
		$\frac{P_{CO_2}}{P_{CO} (P_{O_2})^{1/2}}$	$(Atm)^{1/2}$	$\frac{P_{H_2O}}{P_{H_2} (P_{O_2})^{1/2}}$	$(Atm)^{1/2}$	$\frac{P_{CO_2}^2}{P_{CO}^2 P_{O_2}}$	(Atm)
500		1.071 69	25	7.921 24	22	1.352 93	2
600		1.228 56	20	4.393 88	18	2.796 97	1
700		3.628 03	16	3.912 77	15	9.272 28	
800		6.184 80	13	1.983 10	13	4.127 28	
900		7.177 97	11	3.212 46	11	2.234 42	
1000		1.630 15	10	1.175 92	10	1.386 28	
1100		7.400	8	7.798 02	8	9.489 76	-1
1200		5.648 79	7	8.082 99	7	6.968 50	-1
1300		6.431 72	6	1.182 23	7	5.440 32	-1
1400		1.002 60	6	2.267 65	6	4.421 23	-1
1500		2.009 22	5	5.405 86	5	3.716 74	-1
1600		4.937 54	4	1.538 16	5	3.210 03	-1
1700		1.435 08	4	5.064 74	4	2.833 47	-1
1800		4.796 30	3	1.883 92	4	2.545 91	-1
1900		1.802 82	3	7.766 72	3	2.321 21	-1
2000		7.486 31	2	3.495 00	3	2.142 15	-1
2100		3.386 04	2	1.695 54	3	1.997 03	-1
2200		1.648 29	2	8.778 34	2	1.877 68	-1
2300		8.552 76	1	4.809 57	2	1.778 28	-1
2400		4.692 50	1	2.769 12	2	1.694 58	-1
2500		2.703 88	1	1.665 52	2	1.623 44	-1
2600		1.626 96	1	1.041 26	2	1.562 49	-1
2700		1.017 34	1	6.737 63	1	1.509 93	-1
2800		6.583 44		4.495 72	1	1.464 38	-1
2900		4.393 37		3.083 58	1	1.424 76	-1
3000		3.014 16		2.168 09	1	1.390 24	-1
3100		2.121 14		1.559 44	1	1.360 19	-1
3200		1.526 23		1.144 20	1	1.333 89	-1
3300		1.120 97		8.551 31		1.310 87	-1
3400		8.388 79	-1	6.499 26		1.290 73	-1
3500		6.386 16	-1	5.016 20		1.273 11	-1
3600		4.938 47	-1	3.926 57		1.257 70	-1
3700		3.874 38	-1	3.113 78		1.244 27	-1
3800		3.080 16	-1	2.498 93		1.232 59	-1
3900		2.478 90	-1	2.027 77		1.222 48	-1
4000		2.017 72	-1	1.662 36		1.213 77	-1

Tableau 2.1 : Constante d'équilibre



2.6.3 Equation de Van't Hoff (effet de la température sur Kp)

Considérons la transformation d'un système d'un état initial à la température T et à la pression P à un état final à la même température et la même pression.



La transformation qui nous intéresse ici est une réaction chimique. Le raisonnement est aussi valable pour un changement de phase où la diffusion d'un gaz dans un autre à la même température et la même pression.

On a déjà vu que :

$$dG = VdP - SdT \quad \therefore \left(\frac{\partial G}{\partial T}\right)_P = -S$$

Appliquant ce résultat aux états initial et final :

$$\left(\frac{\partial G_{initial}}{\partial T}\right)_P = -S_{initial} \quad \text{et} \quad \left(\frac{\partial G_{final}}{\partial T}\right)_P = -S_{final} \quad (2.32)$$

Soustrayant membre à membre:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial(G_{final}-G_{initial})}{\partial T}\right)_P &= -(S_{final} - S_{initial}) \\ \therefore \left(\frac{\partial \Delta G}{\partial T}\right)_P &= -\Delta S = \frac{\Delta G - \Delta H}{T} \end{aligned} \quad (2.33)$$

C'est l'équation de Gibbs-Helmoltz que l'on peut réécrire :

$$\left(\frac{\partial(\Delta G/T)}{\partial T}\right)_P = \frac{-\Delta H}{T^2} \quad (2.34)$$

Puisque on a l'identité :

$$\left(\frac{\partial(\Delta G/T)}{\partial T}\right)_P = \frac{1}{T} \left(\frac{\partial \Delta G}{\partial T}\right)_P - \frac{\Delta G}{T^2} \quad (2.35)$$

Dans le cas particulier d'une réaction chimique, à l'équilibre final nous avons obtenu de l'Eq (2.30) que :

$$\ln Kp = -\frac{\Delta G^0}{R_u T} \quad (2.36)$$

Dérivant partiellement par rapport à la température

$$\begin{aligned} \left[\frac{\partial(\ln Kp)}{\partial T}\right]_P &= -\left[\frac{\partial(\Delta G^0/RT)}{\partial T}\right]_P \\ \therefore \left[\frac{\partial(\ln Kp)}{\partial T}\right]_P &= -\frac{\Delta H^0}{RT^2} \end{aligned} \quad (2.37)$$

C'est l'équation de Van't Hoff [2], ΔH^0 est l'enthalpie de réaction à la température T et à la pression de la référence 1 atmosphère. Dans beaucoup d'applications, ΔH^0 est presque indépendante de la température et donc supposée constante, alors intégrant :

$$\ln(Kp_2 / Kp_1) = -\frac{\Delta H^0}{R_u} \left(\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1} \right) \quad (2.38)$$

Ce résultat mène à la conclusion suivante pour une réaction exothermique $\Delta H^0 < 0$ par convention. Donc quand $T_2 > T_1$, le second membre < 0 d'où $Kp_2 < Kp_1$.

Les faibles valeurs de la constante d'équilibre correspondent aux températures élevées, donc à des situations où le phénomène de dissociation est plus important et où la réaction libère moins d'énergie.

2.7 Algorithme de calcul

Soit l'exemple d'algorithme de calcul de composition final et de température d'une combustion à plusieurs degrés de dissociation de la combustion de l'éthylène C_2H_4 et de l'oxygène O_2 . Les étapes essentielles de l'algorithme sont les suivantes :

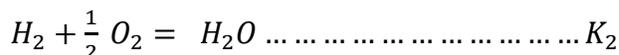
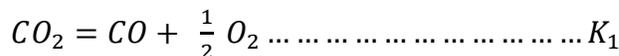
- Identifier le nombre s d'espèce constituant le mélange stœchiométrique (C_2H_4 et O_2) donne une composition de gaz brûlés contenant : $CO_2, H_2O, CO, H_2, O_2, OH, O, H$ ($s=8$).

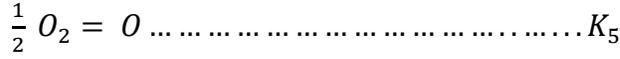
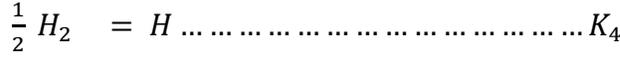
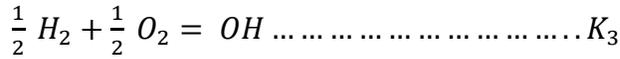
Il ya des traces de C_2H_4 négligeables.

Si le mélange est riche en combustible (des réactifs) alors tenir compte des espèces CH_4 (méthane) et C_2H_2 (acétylène).

Si le comburant est l'air, alors tenir compte des polluants (NO, HCN).

- Identifier les éléments de base : le mélange est constitué de k éléments chimiques de base qui seront conservé durant la réaction. Dans le mélange $C_2H_4 - O_2$, il ya $k=3$ différents éléments : C, H, O .
- Etablir les différentes réactions d'équilibre indépendante .Il est nécessaire de spécifier $R=s-k$ conditions d'équilibre chimique pour aboutir à un système fermé d'équations qui permet d'obtenir la composition final des produits. Dans notre exemple $R=s-k=8-3=5$. Il nous faut donc cinq réactions d'équilibre indépendantes :





- Ecrire le système d'équation

Rappelons l'équation de la réaction globale de combustion :



Dans cet exemple 9 inconnues sont à déterminer :

8 coefficients stœchiométrique a, b, c..., h et la température.

- Deviner une température de combustion, la combustion dans ce cas, se faisant à pression constante donnée. Pour cette valeur de température, les constantes d'équilibre K_1 à K_5 sont obtenues des tables thermodynamiques.

La conservation des $k(=3)$ éléments de base dans le mélange donne 3 équations :

$$a + c = 2 \quad (\text{élément C})$$

$$2b + 2d + f + h = 4 \quad (\text{élément H})$$

$$2a + b + c + 2e + f + g = 6 \quad (\text{élément O})$$

Les $R=s-k=5$ conditions d'équilibre donnent les 5 équations supplémentaires pour les coefficients stœchiométriques :

$$K_1 = \frac{P_{CO} \cdot (P_{O_2})^{1/2}}{P_{CO_2}}, \quad K_2 = \frac{P_{H_2O}}{P_{H_2} (P_{O_2})^{1/2}}, \quad K_3 = \frac{P_{OH}}{(P_{H_2})^{1/2} (P_{O_2})^{1/2}}, \quad K_4 = \frac{P_H}{(P_{H_2})^{1/2}},$$

$$, K_5 = \frac{P_O}{(P_{O_2})^{1/2}}$$

Les pressions partielles s'écrivent, selon la loi de Dalton :

$$\frac{P_{CO_2}}{P} = \frac{a}{n}, \quad \frac{P_{H_2O}}{P} = \frac{b}{n}, \quad \frac{P_{CO}}{P} = \frac{c}{n}, \quad \dots \text{ etc}$$

$$\text{Et où } a + b + c + d + e + f + g + h = n$$

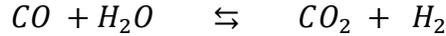
Pour la température supposée, ce système non-linéaire de 8 équations donne (par la méthode de Newton-Raphson par exemple) les coefficients a, b,.....h.

La composition final ainsi obtenu n'est qu'approchée puisque la température a été devinée. C'est l'équation de l'énergie (la 9ème équation), qui nous dicte s'il faut un incrément positif ou négatif à rajouter à la température pour refaire d'autres itérations jusqu'à convergence.



Exercice 1

On considère la réaction du gaz à l'eau suivante



On supposera qu'une mole de CO réagit avec une mole de vapeur d'eau à 1800 K sous la pression atmosphérique

-Déterminer la composition de mélange à l'équilibre

(a CO + b CO₂ + c H₂O + d H₂)

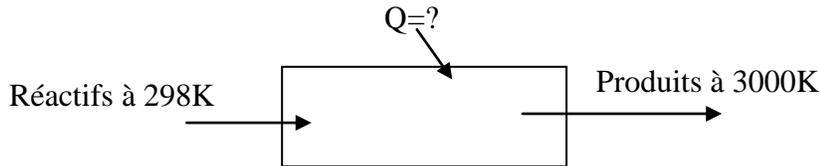
-Quelle serait l'influence d'un abaissement de température sur la proportion d'hydrogène formée ? Essayer T=1500k

On donne les valeurs suivantes de la constante d'équilibre pour la réaction : $CO_2 + H_2 \rightleftharpoons CO + H_2O$

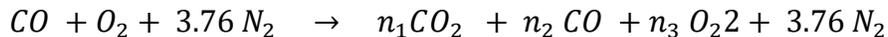
T(K)	Log ₁₀ K
298	-5.018
1500	0.409
1800	0.577
2000	0.656

Exercice 2

Soit la combustion dans un système ouvert, (Fig1) à la pression constante P=5 atm du CO et de l'air avec 100 %d'excès de ce dernier



L'équation de la réaction est :



Si les produits de combustion sont maintenus à la température de 3000K, la réaction.

$CO + 0.5 O_2 = CO_2$ a pour constant d'équilibre une valeur telle que $\log_{10} K_p=0,485$.

a) montrer que le degré de dissociation n_2 est tel que $3.055 = \frac{1-n_2}{n_2} \left[\frac{10.52+n_2}{5(1+n_2)} \right]^{1/2}$

b) la résolution de l'équation ci-dessus donne $n_2=0.297$ quelle est la composition finale des produits de combustion.

c) quelle doit être la quantité de chaleur transférée vers le système par k-mol de CO pour satisfaire le bilan thermique quand la température des réactifs est 298 K

d) vérifie que le degré de dissociation de la combustion augmente à $n_2=0.472$ si la pression diminue à 1 atm

	CO2	CO	O2	N2
$\Delta h_{f,298}$ (MJ/k.mol)	-393.78	-110.62	0	0
$h(3000)$ (MJ/k.mol)	162.76	102.23	106.70	101.44
$h(298)$ (MJ/k.mol)	9.37	8.67	8.66	8.67

Exercice 3

De l'heptane liquide (C_7H_{16}) à $15^\circ C$ et de l'air à 2000 K alimentent une chambre de combustion en proportions stœchiométrique. La combustion est adiabatique et se fait à pression constante, $5.2 \cdot 10^{-3}$ atmosphère. En tenant compte de la dissociation du CO_2 seulement. Déterminer la température finale et la composition finale des produits.

On donne :

- Enthalpies de formation à $25^\circ C$ en MJ/kmol
 CO_2 :-394; CO :-111; H_2O :-242 (vapeur); C_7H_{16} :-188 (gaz)
- Chaleur spécifique de l'heptane liquide 100 kJ/kmol .K
- Enthalpie de vaporisation du (C_7H_{16}) 30 MJ/kmol
- La constante d'équilibre pour la réaction



T(K)	Kp
2700	10.17
2800	6.58
2900	4.58
3000	3.01
3100	2.12

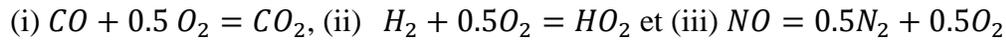
Exercice 4

De méthane gaz (CH_4) et de l'air à $25^\circ C$ alimentent une chambre de combustion en proportions stœchiométrique. La combustion est adiabatique et se fait à pression atmosphérique.

a) En absence de la dissociation déterminer la température finale (essaies la valeur plus proche entre 1400 K et 1500 K). On donne les valeurs suivantes d'enthalpie en kJ/mol

	$\Delta h_{f,298}$	$h(298)$	$h(1400)$	$h(1500)$
CH4	-74.92			
H2O	-241.91	9.91	53.36	90.5
CO2	-393.65	9.37	65.28	71.1
O2	0	8.68	45.66	49.3
N2	0	8.67	43.62	85.3

b) si on tient compte maintenant du phénomène de dissociation de CO_2 , HO_2 , et N_2 , selon les réactions d'équilibre respectives suivantes :



Proposer, sans faire d'application numérique, les étapes à suivre pour déterminer la température finale et la composition finale des produits contenant CO_2 , HO_2 , N_2 , O_2 , H_2 , CO , NO .

Exercice 5

Considérons une réaction de combustion avec mélange stœchiométrique, qui serait totale dans le sens de la combustion ($z=1$) : $H_2(g) + 1/2 O_2 \rightarrow H_2O$

Se produisant dans une enceinte de volume constant, à parois adiabatiques. La chaleur dégagée lorsque la réaction se fait à T_0 ne fait qu'élever la température final T . Cette chaleur égale à $(-\Delta u)$, donc on a dans ci condition : $C_V(T - T_0) + \Delta u = 0$.

Soit c_1 , c_2 , c_3 , c_4 désignant les capacités calorifiques molaires à volume constant de H_2O , H_2 , O_2 , N_2 .

- 1) Pour un degré d'avancement z réécrire la réaction de la combustion
- 2) Que devient la relation $c_V(T - T_0) + \Delta u = 0$
- 3) Montrer qu'on appliquant la loi de masse, le constante d'équilibre K_p est :

$$K_p(T) = z \left[\frac{(7-z)^{1/2}}{(1-z)^{3/2}} \right] P^{-\frac{1}{2}}$$



Chapitre 3: Cinétique chimique appliquée à la combustion

3.1 Introduction

La thermodynamique de combustion permet la détermination de fonction d'état lors de la transformation (par réaction chimique) d'un système, d'un état d'équilibre initial (mélange de réactifs) à un autre état d'équilibre (produits).

Elle est suffisante pour décrire un système si l'échelle du temps de la chimie est très petite devant celle d'autres procédés tels les phénomènes de diffusions ou de convection de quantités transportables dans un système. Cependant dans la plupart des cas le temps de la réaction est du même ordre de grandeur que celui d'autres phénomènes (turbulence, conduction, diffusion) d'où la nécessité d'étudier les mécanismes des réactions chimiques et leur évolution par rapport au temps. C'est la cinétique chimique).

3.2 Réactions élémentaires, réactions de bilan

Une réaction élémentaire est une réaction qui se passe à l'échelle moléculaire exactement de la manière décrite par l'équation de la réaction. Elle ne peut être décomposée en processus plus simple. Une réaction de bilan est constituée d'un ensemble de réactions élémentaires.

Considérons par exemple l'équation suivante



C'est une réaction de bilan composée de quelques centaines de réactions élémentaires. En effet, les réactions de départ sont des coupures de liaisons d'O₂ et CH₄

3.3 Molécularité d'une réaction élémentaire

Par définition la molécularité est le nombre d'espèce chimique (molécules, atomes, radicaux) figurant dans le 1^{er} membre d'une réaction élémentaire

* **Les réactions mono-moléculaire** : (moléularité=1) décrivent le réarrangement ou la dissociation d'une molécule $A \rightarrow \text{produits}$

Ex : $O_2 \rightarrow O + O$ (dissociation)

***Les réactions bi-moléculaires** : (moléularité=2) sont le type de réactions le plus souvent rencontré $A + B \rightarrow \text{produits}$ ou $A + A \rightarrow \text{Produits}$

***Les réactions tri-moléculaires** : (moléularité=3) sont beaucoup plus rares ; $A + B + C \rightarrow \text{Produits}$, $A + A + B \rightarrow \text{Produits}$ ou $A + A + A \rightarrow \text{Produits}$

La probabilité de rencontré de 4 particules en même temps (moléularité=4) et quasi-nulle

3.4 Vitesse de réaction ou taux de réaction

Considérant l'équation de réaction suivante.



On définit $[A], [B], [A']$ et $[B']$ comme étant les concentration en nombre de mole par unité de volume des espèces chimiques A , B, A' et B' respectivement.

La vitesse de réaction d'une espèce dans les produits comme A' ou B' est son taux de formation (positif) $w_{A'} = \frac{d[A']}{dt}$ ou $w_{B'} = \frac{d[B']}{dt}$ par rapport au temps. La vitesse de réaction d'une espèce dans les réactifs comme A ou B est son taux de consommation (négatif) $w_A = \frac{d[A]}{dt}$ ou $w_B = \frac{d[B]}{dt}$ par rapport au temps.

Si l'on introduit la variable ξ qui représente le degré d'avancement de la réaction ($\xi = 0$ au début de la réaction et $\xi = 1$ à la fin), on peut définir une vitesse caractéristique de la réaction :

$$w = -\frac{1}{a} \frac{d[A]}{dt} = -\frac{1}{b} \frac{d[B]}{dt} = \frac{1}{a'} \frac{d[A']}{dt} = \frac{1}{b'} \frac{d[B']}{dt} = \frac{\partial \xi}{\partial t} \quad (3.3)$$

$$\text{Etant donné que } d\xi = -\frac{d[A]}{a} = -\frac{d[B]}{b} = \frac{d[A']}{a'} = \frac{d[B']}{b'} \quad (3.4)$$



L'allure des courbes représentant la variation des concentrations de $[A]$ et $[A']$ est illustré

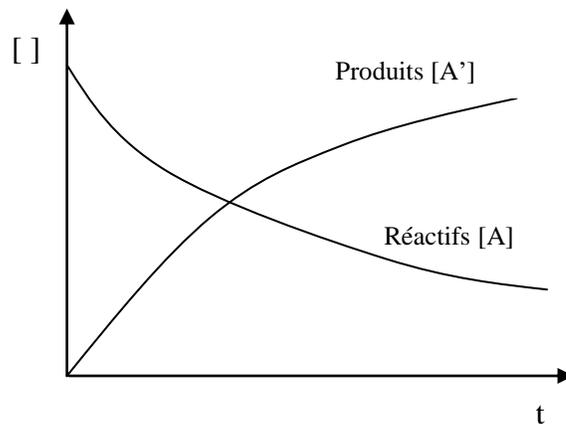


Fig.3-1 : La variation des concentrations

Si on a un nombre N_r de réactions simultanées dans lesquelles l'espèce A_i est produite dans quelques une de ces réactions et consommée dans d'autres, alors le taux de production net de la concentration $[A_i]$ est :

$$w_{A_i} = \sum_{j=1}^{N_r} w_{A_{ij}} = \sum_j \left(\frac{d[A_i]}{dt} \right)_j \quad (3.5)$$

Où $w_{A_{ij}} = \left(\frac{d[A_i]}{dt} \right)_j$ est le taux de production ou de consommation de l'espèce A_i par la réaction j (j allant de 1 à N_r qui est le nombre total de réactions).

3.5 Lois expérimentales des vitesses de réaction et ordre réaction

Considérons l'équation de réaction suivante :



Une loi de vitesse est une formulation empirique décrivant la vitesse ou le taux de réaction. D'après la loi d'action de masse confirmée par les observations expérimentales le taux de consommation d'une espèce dans les produits est proportionnel au produit des concentrations des espèces des réactifs.

Chaque concentration étant élevée à une puissance égale au coefficient stœchiométrique correspondant par exemple le taux de consommation de l'espèce A s'exprime :

$$-\frac{1}{a} \frac{d[A]}{dt} = -k[A]^a[B]^b[C]^c \dots \dots = \frac{1}{b} \frac{d[B]}{dt} = \frac{1}{c} \frac{d[C]}{dt} \quad (3.7)$$

Le taux de production de A' est tel que :

$$\frac{1}{a'} \frac{d[A']}{dt} = +k[A]^a[B]^b[C]^c \dots \dots = \frac{1}{b'} \frac{d[B']}{dt} = \frac{1}{c'} \frac{d[C']}{dt} \quad (3.8)$$

Dans ces expressions, a, b, c, sont les ordres de la réaction par rapport aux espèces A, B, C,.... Des réactifs respectivement. La somme des exposants a+b+c.....est l'ordre global de la réaction.

Pour une réaction élémentaire, l'ordre global de réaction est toujours égal à sa molécularité. Ce n'est pas le cas pour une réaction de bilan ou les exposants dans la formule du taux de réaction ne correspondent pas nécessairement aux coefficients stœchiométriques. En fait, ils peuvent avoir des valeurs négatives et /ou non entières. k est appelée constante de vitesse .Elle dépend de la température seulement. Elle est obtenue à partir de l'expression d'Arrhenius

3.6 Loi d'Arrhenius

D'après Arrhenius [3], la constante de vitesse k dépend fortement et de façon non-linéaire de la température selon la relation :

$$k = A' \exp (-E_a/RT) \quad (3.9)$$

Ou A' est le facteur pré-exponentiel, E_a l'énergie d'activation. C'est l'énergie minimale nécessaire qu'une collision doit apporter aux réactifs pour que la réaction puisse se produire effectivement. La figure (3-2) montre la variation de l'énergie potentielle en fonction de la coordonnée de la réaction. Pour passer des réactifs aux produits plusieurs chemins sont possibles présentant différentes barrières de potentiel. Le chemin caractérisé pour une barrière minimal est la coordonnée de réaction.



Le comportement de la constante de vitesse k en fonction de la température est illustré ci-dessous par les graphes de $k(T)$ et $\ln(k)$ vs $(1/T)$

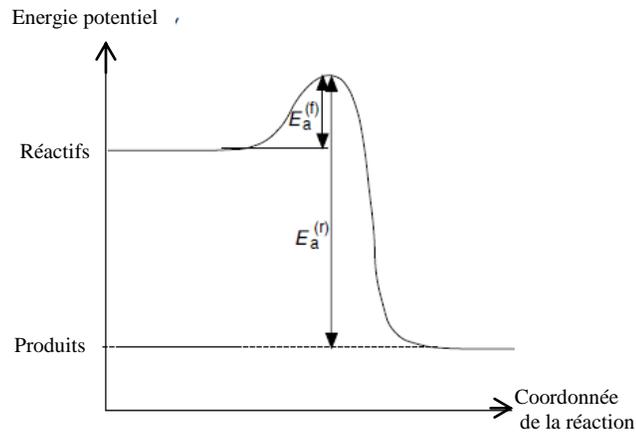


Fig.3-2 : diagramme de l'énergie pour la réaction chimique

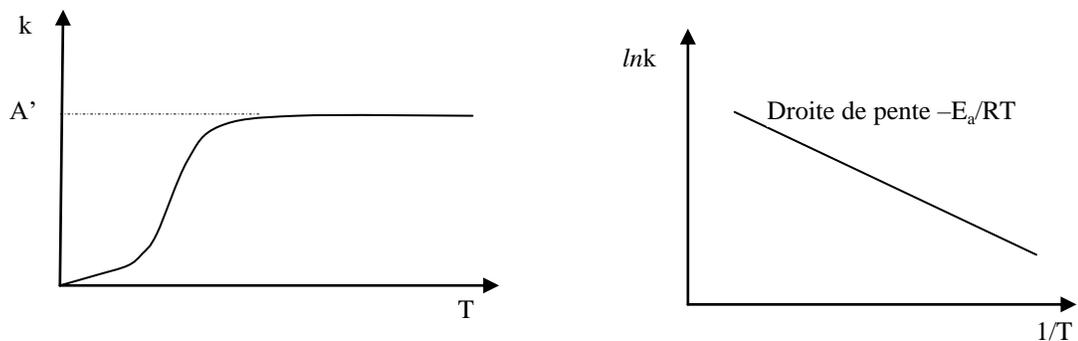


Fig.3-3 : Le comportement de la constante de vitesse k en fonction de la température

Plus récemment des mesures expérimentales ont montré que le facteur A' lui aussi dépend de la température de sorte que :

$$k = AT^b \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) \quad (3.10)$$

3.7 Loi théorique de la vitesse d'une réaction élémentaire

Considérant la réaction élémentaire bi-moléculaire :



La vitesse de réaction est égale au plus, au nombre de rencontres entre 2 molécules de (A) par unité de temps, c'est-à-dire la fréquence de collisions.



Le raisonnement qui suit est basé sur la supposition que les molécules A sont rigides et sphérique, de rayon r_A . Une collision entre 2 molécules de A ne peut se produire que si la distance entre leur centre est $2r_A$. Si une molécule de A parcourt une distance d_A en une seconde elle va heurter toutes les particules A dans le volume $V = d_A \cdot \pi \cdot (2r_A)^2$. Le nombre de molécules A dans le volume est : $[A] \cdot V \cdot \mathcal{N}$ (le nombre de mole par unité de volume \times volume \times nombre de molécules par mol (Avogadro)). Donc, en une seconde, une molécule A va heurter $d_A \cdot \pi \cdot (2r_A)^2 \cdot [A] \cdot \mathcal{N}$ autres molécules A. D'après la théorie cinétique des gaz, la vitesse d'une molécule s'exprime $\mathcal{V}_A = \left[\frac{8kT}{\pi m} \right]^{1/2}$, ou k : constante de Boltzmann ($= \frac{R}{\mathcal{N}}$), T : température, m : masse de la particule A.

Donc le nombre de collisions d'une molécule A avec d'autres molécules A en une seconde est : $\pi \cdot (2r_A)^2 \cdot [A] \cdot \mathcal{N} \cdot \left[\frac{8kT}{\pi m} \right]^{1/2}$

Donc le nombre de collisions de toutes les molécules A dans un volume unité avec d'autres molécules de A en une seconde :

$$Z = \frac{1}{2} [A] \cdot \mathcal{N} \cdot \left[\pi \cdot (2r_A)^2 \cdot [A] \cdot \mathcal{N} \cdot \left[\frac{8kT}{\pi m} \right]^{1/2} \right] = \text{coefficient} \times [A]^2 \quad (3.12)$$

Il faut 2 molécules de A pour avoir une collision, d'où le facteur (1/2) dans l'expression ci-dessus.

La fréquence totale de collisions entre les molécules A et B différentes, par unité de volume s'exprime:

$$Z = \left[\mathcal{N}^2 \cdot (\sigma_{AB})^2 \left[\frac{8\pi kT}{m_{AB}} \right]^{1/2} \right] [A][B] = \text{coefficient} \times [A][B] \quad (3.13)$$

$$\text{Où } \sigma_{AB} = r_A + r_B, m_{AB} = \frac{m_A m_B}{m_A + m_B} \quad (3.14)$$

On conclut que la vitesse d'une réaction élémentaire est proportionnelle aux concentrations des réactifs.

En réalité le nombre de collisions efficaces est plusieurs ordres de grandeurs inférieur à celui du nombre total de collisions. Deux raisons principales sont les suivantes :

-Du nombre totale Z de collisions entre les molécules (deux à deux), seulement $z \cdot e^{-E_a/RT}$ sont efficaces.



$e^{-E_a/RT}$: est le facteur de Boltzmann. La théorie cinétique des gaz montre que le facteur de Boltzmann représente la fraction des collisions possédant une énergie supérieure à E_a . Sur la figure (3.4), montrant la distribution des énergies moléculaires, cette fraction est la portion de surface hachurée.

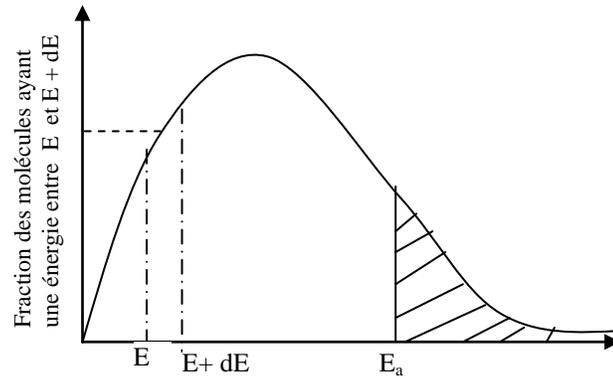


Fig.3-4 : La distribution des énergies moléculaires

-Les molécules ne sont pas sphériques. Ce sont des structures compliquées. Une collision sera beaucoup plus efficace si les molécules se rencontrent suivant des orientations privilégiées. D’ou l’introduction du facteur stérique P. Donc la fréquence des collisions effectives entre A et B

$$Z_{eff} = P \cdot Z \cdot e^{-\frac{E_a}{RT}} \quad (3.15)$$

$$Z_{eff} = P \left[N^2 \cdot (\sigma_{AB})^2 \left[\frac{8\pi k T}{m_{AB}} \right]^{1/2} \right] [A][B] \cdot e^{-\frac{E_a}{RT}} \quad (3.16)$$

$$Z_{eff} = \text{coefficient} \times T^{1/2} [A][B] \cdot e^{-\frac{E_a}{RT}} \quad (3.17)$$

Cette expression est à comparer avec la loi expérimentale de la vitesse de réaction basée sur la loi d’Arrhenius

$$\frac{d[A]}{dt} = \frac{d[B]}{dt} = -AT^b [A][B] \cdot e^{-\frac{E_a}{RT}} \quad (3.18)$$

A noter que $\frac{d[A]}{dt}$ donne le taux de consommation des moles de A par unité de volume et par seconde. Multiplie par le nombre d’Avogadro, on obtient le taux de consommation des molécules par unité de volume et de temps

3.8 Deux réactions élémentaires consécutives

Considérons les 2 réactions consécutives suivantes



Le taux de production de AB de la 1ere réaction est :

$$\left(\frac{d[AB]}{dt}\right)_1 = k_1[A][B] = -\frac{d[A]}{dt} = -\frac{d[B]}{dt} \quad (3.20)$$

Le taux de consommation de AB par la 2eme réaction est

$$\left(\frac{d[AB]}{dt}\right)_2 = -k_2[AB] = -\frac{d[C]}{dt} = -\frac{d[D]}{dt} \quad (3.21)$$

Donc le taux de variation net de concentration de [AB]

$$\frac{d[AB]}{dt} = \left(\frac{d[AB]}{dt}\right)_1 - \left(\frac{d[AB]}{dt}\right)_2 = k_1[A][B] - k_2[AB] \quad (3.22)$$

Dans beaucoup de réactions de combustion, la concentration de radicaux libres (espèces intermédiaires) reste constante sur une grande partie du temps de la réaction.

Dans ce cas le taux de production d'une espèce par une première réaction = le taux de consommation de cette même espèce par une réaction suivante.

$$\frac{d[AB]}{dt} = 0 \quad (3.23)$$

Dans beaucoup d'études, cette approximation est pour les espèces transitoires dont la concentration reste constante sur une grande partie du temps de combustion. On l'appelle approximation de l'état quasi-stationnaire.

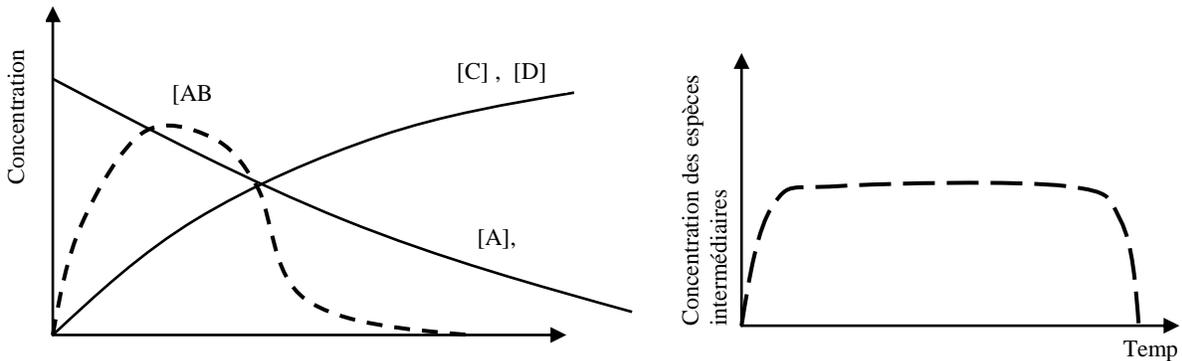


Fig.3-5 : L'état quasi-stationnaire.

3.9 Plusieurs réactions en chaîne .Mécanisme :

Le processus de combustion s'effectue en réalité par un mécanisme très complexe de réactions élémentaire en chaîne : des dizaines pour l'hydrogène, des centaines pour le méthane et des milliers pour le cétane $C_{16}H_{34}$ (composant typique du fioul Diesel). En générale on distingue 3 étapes essentielles dans la chaîne. Elles seront décrites ci-dessous par référence à l'exemple de combustion de l'hydrogène dont l'équation de la réaction de bilan est :



1^{er} étape : L'initiation

Ce type de réaction produit des radicaux libres à partir de molécule stables. Ces radicaux étant actifs sont appeler centres actifs ou propagateurs. Par exemple une molécule se dissocie par l'énergie provenant d'une collision avec une autre molécule, par l'énergie ($h\nu$) d'un photon de fréquence appropriée ν ou d'une paroi solide chaude en contact avec le gaz. Dans la combustion de l'hydrogène on peut avoir comme réactions d'initiation :

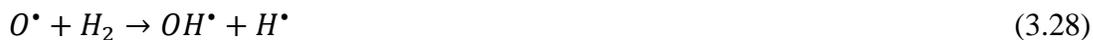


Le point représente un électron non apparié donc l'espèce en question est un radical libre.

2^{eme} étape : Propagation

Ce sont les réactions intermédiaires caractérisés par la présence des radicaux dans les réactifs et dans les produits. On distingue deux types de propagation :

- La propagation en chaîne droite où un radical libre à gauche (au premier membre de l'équation de la réaction) en donne un à droite (au 2nd membre).
- Comme exemple, une réaction élémentaire typique dans la combustion de l'hydrogène est $OH^* + H_2 \rightarrow H_2O + H^*$ en donne 2 à droite, par exemple :



3^{eme} étape : Rupture ou terminaison

Ce sont les réactions de recombinaison des radicaux libres donnant des molécules stables, les centres propagateurs disparaissent, c'est la rupture de la chaîne. Par



Exemple :



Ou.



3.10 Expression générale de la vitesse de réaction

- **Cas d'une réaction :**

Soit un nombre de N_s espèces A_i pouvant exister dans les réactif et /ou les produits d'une réaction, i allant de 1 à, N_s . Si l'équation générale de la réaction s'écrit :



Alors le taux de production ou de consommation de l'espèce A_i est donné par :

$$\frac{d[A_i]}{dt} = k \left[\nu_i^{(b)} - \nu_i^{(f)} \right] \prod_{i=1}^{N_s} [A_i]^{\nu_i^{(f)}} \quad (3.32)$$

Avec (f) gaz frais, (b) gaz brûlé, ν_i Coefficients stœchiométrique et $\prod_{i=1}^{N_s}$ produit de toutes les concentrations

- **Cas de 2 réactions opposées :**

Si l'équation d'une réaction vers la droite (f : forward) et l'équations de sa réaction inverse vers la gauche (b : backward) , s'écrivent :



Alors la vitesse de réaction nette de l'espèce A_i est donnée par :

$$\frac{d[A_i]}{dt} = \left(\frac{d[A_i]}{dt} \right)_f + \left(\frac{d[A_i]}{dt} \right)_b \quad (3.34)$$

$$\frac{d[A_i]}{dt} = k_f \left[\nu_i^{(b)} - \nu_i^{(f)} \right] \prod_{i=1}^{N_s} [A_i]^{\nu_i^{(f)}} + k_b \left[\nu_i^{(f)} - \nu_i^{(b)} \right] \prod_{i=1}^{N_s} [A_i]^{\nu_i^{(b)}} \quad (3.35)$$

$$\frac{d[A_i]}{dt} = k_f \left[\nu_i^{(b)} - \nu_i^{(f)} \right] \prod_{i=1}^{N_s} [A_i]^{\nu_i^{(f)}} \left\{ 1 - \frac{k_b}{k_f} \prod_{i=1}^{N_s} [A_i]^{\nu_i^{(b)} - \nu_i^{(f)}} \right\} \quad (3.36)$$

A noter qu'à l'équilibre thermodynamique :

$$\frac{d[A_i]}{dt} = 0 \quad \therefore \frac{k_f}{k_b} = \prod_{i=1}^{N_s} [A_i]^{\nu_i^{(b)} - \nu_i^{(f)}} = K_c \quad (3.37)$$

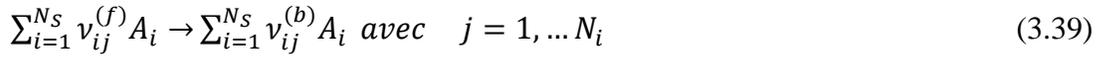
K_c étant la constante d'équilibre associée aux concentrations. Sa relation avec la constante K_p associée aux pressions partielles est la suivante :

$$K_p = \prod_{i=1}^{N_s} \frac{P_i^{v_i^{(b)}}}{P_i^{v_i^{(f)}}} = \prod_{i=1}^{N_s} ([A_i]RT)^{v_i^{(b)} - v_i^{(f)}} \quad (3.37)$$

$$K_p = \prod_{i=1}^{N_s} [A_i]^{v_i^{(b)} - v_i^{(f)}} \times [RT]^{\sum_{i=1}^{N_s} (v_i^{(b)} - v_i^{(f)})} = K_c [RT]^{\sum_{i=1}^{N_s} (v_i^{(b)} - v_i^{(f)})} \quad (3.38)$$

- **Cas de plusieurs réactions simultanées :**

Si on a un nombre total de N_s espèce dans les réactions élémentaires simultanées qui s'écrivent :



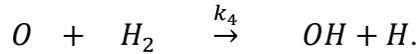
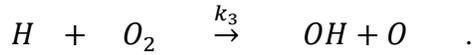
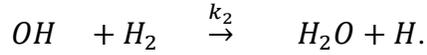
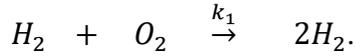
Alors la vitesse de réaction nette de la concentration de A_i est la somme algébrique des taux de production et/ou de consommation de A_i de toutes les réactions élémentaires.

$$\frac{d[A_i]}{dt} = \sum_{j=1}^{N_s} k_j [v_{ij}^{(b)} - v_{ij}^{(f)}] \prod_{m=1}^{N_s} [A_m]^{v_{mj}^{(f)}} \text{ avec } m = 1, \dots, N_s \quad (3.40)$$

m : Nombre d'espèce pour balayer toutes les réactifs

Exercice 3.1

Considérons le mécanisme réactionnel suivant pour la combustion de H_2 et O_2 :

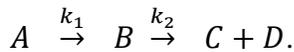


En supposant l'approximation de l'état quasi-stationnaire des concentrations des espèces intermédiaires OH, H et O, Montrer que :

$$\frac{d[H_2O]}{dt} = 2k_2[O_2][H_2] \left\{ \frac{k_1}{k_2} + \frac{k_3}{k_5[M]} \right\}$$

Exercice 3.2

On s'intéresse à l'équation.



1) déterminer les expressions en fonction du temps des concentrations des espèces A, B, C, D ; sachant que les réactions successives son d'ordre 1 et au temps initial $[A]=[A]_0$; $[B]=[C]=[D]=0$.

Exercice 3.4

Le dioxyde d'azote se décompose, en l'absence de gaz inerte, selon la réaction cinétique : $2NO_2 \rightarrow 2NO + O_2$

a) obtenir l'unité de la constante de vitesse k de cette réaction?

b) quelle est la valeur du temps de consommation de NO_2 si à la température 592K la concentration molaire $[NO_2]=0.003$ mole/litre et $k=498\text{cm}^3/\text{mole}\cdot\text{sec}$?

c) si à une autre température 627k, $k=1810$ cm/mole.sec, quelle est la valeur de l'énergie d'évacuation de cette réaction. On appelle que $k = Ae^{-E/RT}$ ou $R=8.31\text{j}/\text{mole}\cdot\text{K}$

Exercice 3.3

Vérifier les expressions des constantes de vitesse suivante pour les différentes réactions d'ordre 0, 1, n

Ordre de réaction	Equation différentielle	Constante de vitesse k
0	$-\frac{d[A]}{dt} = k$	$\frac{[A_0] - [A]}{t}$
1	$-\frac{d[A]}{dt} = k[A]$	$\frac{1}{t} \ln\left(\frac{[A_0]}{[A]}\right)$
n	$-\frac{d[A]}{dt} = k[A]^n$	$\frac{1}{(n-1)t} \left(\frac{1}{[A]^{n-1}} - \frac{1}{[A_0]^{n-1}} \right)$

Chapitre 4 : Les équations de bilan de l'aérothermochimie

4.1 Introduction

L'étude du phénomène de combustion dans un milieu tridimensionnel à plusieurs espèces chimiques en mouvement instationnaire (à pression, température et masse volumique variables) nécessite la résolution d'un système d'équations de bilan de masse, de quantité de mouvement et d'énergie.

4.2 Structure générale d'équation de bilan

Une variable extensive $F(t)$, dans un volume Ω fixe donné, peut être calculée de la valeur spécifique correspondante $f(\vec{r}, t) = \frac{dF}{dV}$ par intégration sur tout le volume Ω

$$F(t) = \int_{\Omega} f(\vec{r}, t) dV \quad (4.1)$$

Où t est le temps, \vec{r} est le vecteur position, dV est un volume infiniment petit.

Une variation de la quantité de F dans le volume Ω peut être due à

- Des flux $\int_S \vec{\phi}_f \cdot \vec{n} \cdot ds$ traversant l'enveloppe S où $\vec{\phi}_f$ est la densité de flux (quantité de F par unités de temps et de la surface)
- Des mécanismes de production ou de destruction q_i (quantité de F par unité de volume et de temps)
- Le bilan global se traduit donc par :

$$\int_{\Omega} \frac{\partial f}{\partial t} dV + \int_S \vec{\phi}_f \cdot \vec{n} \cdot ds = \int_{\Omega} q dV$$

On arrive à $\frac{\partial f}{\partial t} + \text{div} \vec{\phi}_f = q$ (4.2)

$\frac{\partial f}{\partial t}$: taux de variation temporelle, $\text{div} \vec{\phi}_f$: transports convectif et diffusif et q : taux de production.

4.3 Bilan de masse du mélange dans sa globalité

Dans ce cas on a :

$$f = \rho \text{ (masse du mélange par unité de volume)}$$

$$\vec{\phi}_f = \rho \vec{V} \text{ (débit massique par unité de surface)}$$

$$q = 0 \text{ (taux de production de masse nul)}$$



$$\text{On obtient : } \frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div}(\rho \vec{V}) = 0 \quad (4.3)$$

Cette équation ponctuelle n'est pas affectée par les réactions chimiques étant donné qu'en chaque point du domaine, les réactions simultanées existantes réduisent la masse des réactifs, augmentent la masse des produits mais maintiennent la masse totale constante.

4.4 Bilan de masse d'une espèce dans un mélange

Dans ce cas on a :

- $f = \rho_i$ (masse de l'espèce i par unité de volume)
 $= \rho y_i$ (y_i : fraction massique de l'espèce i dans le mélange)
- $\vec{\phi}_f = \rho_i \vec{V} + \vec{J}_i$ ($\rho_i \vec{V}$ densité de flux convectif = $\rho y_i \vec{V}$), (\vec{J}_i densité de flux diffusif)
- $q = M_i \omega_i$ (M_i est la masse molaire de l'espèce i , unité : kg/mol), (ω_i est la vitesse de réaction de l'espèce i , unité : $mol/m^3.s$).
- On aboutit à :

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} + \text{div}(\rho_i \vec{V}) + \text{div} \vec{J}_i = M_i \omega_i \quad (kg/m^3.s) \quad (4.4)$$

$$\text{Ou } \frac{\partial \rho y_i}{\partial t} + \text{div}(\rho y_i \vec{V}) + \text{div} \vec{J}_i = M_i \omega_i$$

De cinétique chimique la vitesse égale :

$$\omega_i = \sum_{j=1}^{N_r} [v_{ij}^{(b)} - v_{ij}^{(f)}] A_j T^{b_j} \left(\exp\left(-\frac{E_{aj}}{R_u T}\right) \right) \prod_{m=1}^{N_s} \left[\frac{X_m P}{R_u T} \right]^{v_{mj}^{(f)}} \quad (4.5)$$

$$\text{Ou } \vec{J}_i = \underbrace{\rho D_i^M \text{grad} y_i}_{\text{Diffusion ordinaire}} - \underbrace{\frac{D_i^T}{T} \text{grad} T}_{\text{Diffusion thermique}} \\ \text{ou effet Soret (souvent négligeable)}$$

T : est la température

P est la pression totale ($X_m P = P_m$ est la pression partielle de l'espèce m)

D_i^M : est le coefficient moyen de diffusion de l'espèce i , dans le reste du mélange.

D'après la formulation de Stefan [4], $D_i^M = \frac{1-y_i}{\sum_{j \neq i} X_j / D_{ij}}$ (loi empirique. Erreur d'environ 10 %).

X_j : est la fraction molaire de l'espèce j

y_i : est la fraction massique de l'espèce i

D_i^j : est le coefficient de diffusion binaire entre 2 espèces i et j .

D_i^T : est le coefficient de diffusion thermique

N_r et N_s : sont les nombres totaux des réactions et des espèces chimique

4.5 Bilan de quantité de mouvement

Pour la quantité de mouvement qui est un vecteur, on à 3 composantes à considérer

- $[f_x, f_y, f_z]^T = [\rho V_x, \rho V_y, \rho V_z]^T = \rho \vec{V}$ (c'est la quantité de mouvement par unité de volume)
- $\vec{\phi}_f = \rho \vec{V} \otimes \vec{V} - \vec{\sigma}$ ($\rho \vec{V} \otimes \vec{V}$: densité de flux convectif, $\vec{\sigma} = P + \sigma$: densité de flux par la pression et les contraintes visqueuses)

Rappelons que le tenseur $\vec{V} \otimes \vec{V}' = \begin{bmatrix} V_x V_x' & V_x V_y' & V_x V_z' \\ V_y V_x' & V_y V_y' & V_y V_z' \\ V_z V_x' & V_z V_y' & V_z V_z' \end{bmatrix}$

Et que $\vec{\sigma} = -P\vec{I} + \mu[(grad\vec{V}) + (grad\vec{V})^T] - 2/3\mu div\vec{V}\vec{I}$ (4.6)

P est la pression, \vec{I} est le tenseur identité $\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$

- $q = \rho \vec{g}$ (densité de poids)

Pour un mélange d'espèce, la viscosité peut être obtenue de l'expression empirique suivante selon Warnatz [5] (environ 10 % d'erreur).

$$\mu = \frac{1}{2} \left[\sum_i X_i \mu_i + \left(\sum_i \frac{X_i}{\mu_i} \right)^{-1} \right] \quad (4.7)$$

μ_i étant la viscosité de l'espèce i pure, où de la formulation de Wilke [6] (environ 5% d'erreur).

$$\mu = \sum_i \frac{\mu_i}{1 + \sum_{k \neq i} \phi_{ik} \frac{X_k}{X_i}} \quad (4.8)$$

Où $\phi_{ik} = \frac{1}{2\sqrt{2}} \left(1 + \frac{M_i}{M_k} \right)^{1/2} \left[1 + \left(\frac{\mu_i}{\mu_k} \right)^{1/2} \left(\frac{M_i}{M_k} \right)^{1/4} \right]^2$ (4.9)

Où M_i et M_k sont les masses molaires des espèces i et k respectivement.

4.6 Bilan d'énergie

Dans ce cas on a :

$$\bullet \quad f = \rho e = \rho u + \frac{1}{2} \rho \|\vec{V}\|^2 + \rho g z \quad (4.10)$$

Où f est énergie totale par unité de volume (J/m³)

ρu :est l'énergie interne

$\frac{1}{2} \rho \|\vec{V}\|^2$ est l'énergie cinétique

$\rho g z$ est l'énergie potentiel

u est l'énergie interne par unité de masse du mélange

z est l'altitude par rapport à une ligne de référence

$$\bullet \quad \vec{\Phi} = \rho e \vec{V} + \vec{J}_q$$

Où $\rho e \vec{V}$ est la densité de flux convectif et \vec{J}_q est la densité de flux diffusif

$$\vec{J}_q = -\lambda \text{grad } T + \sum_i h_i \vec{J}_i \quad (4.11)$$

Où $-\lambda \text{grad } T$ est le flux par conduction ordinaire, $\sum_i h_i \vec{J}_i$ est le flux par la diffusion des espèces et h_i est l'enthalpie spécifique de l'espèce i .

Pour un mélange de gaz, la conductivité thermique peut être obtenue de la loi empirique $\lambda = \frac{1}{2} \left[\sum_i X_i \lambda_i + \left(\sum_i \frac{X_i}{\lambda_i} \right)^{-1} \right]$ (environ 10% à 20% d'erreur).

Ou encore de la formule $\lambda = \sum_i \left(\frac{\lambda_i}{1 + \sum_{k \neq i} X_k \times 1.065 \phi_{ik}} \right)$

Où ϕ_{ik} a été défini par l'équation (4.9).

- $q = \text{div}(\vec{\Phi})$: taux de variation de l'énergie par unité de volume, dû au travail de pression et à la dissipation visqueuse).

Après réarrangement l'équation de l'énergie peut s'écrire [1]

$$\frac{\partial \rho h_t}{\partial t} + \frac{\partial (\rho U_j h_t)}{\partial x_j} = \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\lambda \frac{\partial T}{\partial x_j} - \sum_i h_i (j_i)_j + U_k \tau_{jk} \right] + U_j F_j \quad (4.12)$$

$h_t = h + \frac{U_j^2}{2}$ est l'enthalpie totale

$\frac{\partial (U_k \tau_{jk})}{\partial x_i}$ est le taux de dissipation de l'énergie par les contraintes visqueuses τ_{jk}

$U_j F_j$ est le travail des forces de volume par unité de temps et de volume.

L'équation de l'énergie peut être réécrite autrement en faisant apparaître explicitement la vitesse de réaction des espèces [1].

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\rho \left(\bar{C}_v T + \frac{U_j^2}{2} \right) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\rho U_j \left(\bar{C}_p T + \frac{U_j^2}{2} \right) \right] \right] = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\lambda \frac{\partial T}{\partial x_j} - \sum_i (h_i - h_{i,0}) (j_i)_j + U_k \tau_{jk} \right] - \rho \sum_i h_{i,0} \omega_i + U_j F_j \quad (4.13)$$

\bar{C}_v et \bar{C}_p étant les chaleurs spécifiques moyennes à volume et à pression constant respectivement, ω_i : la vitesse de réaction de l'espèce i , $h_{i,0}$: l'enthalpie spécifique de l'espèce i à la température de référence.

Pour un mélange de gaz parfait, l'énergie interne :

$$u = \sum_i^{N_s} y_i u_i = \sum_i^{N_s} y_i \int_0^T C_{v_i}(T) dT + \sum_i^{N_s} y_i u_{i,0} \quad (4.14)$$

L'enthalpie :

$$h = \sum_i^{N_s} y_i h_i = \sum_i^{N_s} y_i \int_0^T C_{p_i}(T) dT + \sum_i^{N_s} y_i h_{i,0} \quad (4.15)$$

A noter que pour des gaz supposés proches de gaz parfait $u_{i,0} = h_{i,0}$ ($T = 0 \rightarrow RT = 0$)

Si l'on définit des chaleurs spécifique moyennes telles que : $\bar{C}_v T = \sum_i^{N_s} Y_i \int_0^T C_{v_i}(T) dT$ et de même pour \bar{C}_p , alors le 1^{er} membre de l'équation d'énergie devient :

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\rho \left(\bar{C}_p T + \sum_i^{N_s} y_i h_{i,0} \right) + \rho \frac{U_j^2}{2} \right] + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\rho U_j \left(\bar{C}_p T + \sum_i^{N_s} y_i h_{i,0} \right) + \rho \frac{U_j U_k^2}{2} \right] = \frac{\partial P}{\partial t} + \dots \quad (4.16)$$

Isolant les termes en $h_{i,0}$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\rho \bar{C}_p T + \rho \frac{U_j^2}{2} \right] + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\rho U_j \left(\bar{C}_p T \right) + \rho \frac{U_j U_k^2}{2} \right] = \frac{\partial P}{\partial t} + \dots - \sum_i \left[h_{i,0} \left[\frac{\partial(\rho y_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho U_j y_i)}{\partial x_j} \right] \right] \quad (4.17)$$

$$\text{Où } \frac{\partial(\rho y_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho U_j y_i)}{\partial x_j} = \frac{\partial(-j_i)_j}{\partial x_j} + \rho \omega_i$$

Donc le second membre devient :

$$\dots \dots \dots = \frac{\partial P}{\partial t} + \dots - \sum_i h_{i,0} \frac{\partial(-j_i)_j}{\partial x_j} - \sum_i h_{i,0} \rho \omega_i \quad (4.18)$$

$$\dots \dots \dots = \frac{\partial P}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\lambda \frac{\partial T}{\partial x_j} - \sum_i (h_i - h_{i,0}) (j_i)_j + U_k \tau_{jk} \right] - \rho \sum_i h_{i,0} \omega_i + U_j F_j \quad (4.19)$$

Chapitre 5 : Les types de flammes

5.1 Introduction

Les flammes nous fascinent par leur côté mystérieux et magique. Colorées, lumineuses et variantes, elles sont à la fois puissantes et fragiles, capables de détruire des villes entières et de s'éteindre par simple manque d'oxygène. Les caractéristiques des flammes sont nombreuses et complexes, c'est pourquoi ce chapitre traitera seulement d'une de leurs principales caractéristiques ; leur forme. Il existe plusieurs modèles de classification des flammes, qui sont étudiées dans des domaines tels que la thermodynamique et la mécanique des fluides. Nous nous limiterons ici à une classification en fonction de la forme et du mélange réactionnel des flammes. Les flammes qui brûlent à l'air libre et dont le mélange oxydant- combustible se fait pendant la combustion sont appelées flammes de diffusion et celles dont le mélange oxydant-combustible est réalisé avant la combustion sont appelées flammes de prémélange (ou prémixées). Dans ces deux types de flammes, l'écoulement peut être turbulent ou laminaire.

Une flamme est une manifestation visible de la combustion vive, qui contrairement à la combustion lente (sans flamme), dégage suffisamment d'énergie thermique (chaleur) pour brûler (ioniser) les produits de combustion gazeux émis au-dessus de la zone de réaction. Puisque ces produits de combustion sont portés à haute température, ils peuvent émettre par luminescence et émission spectrale du rayonnement visible de différentes couleurs avant d'être finalement consommés par la réaction. Cette zone lumineuse produite en hauteur est appelée flamme. Une flamme peut prendre l'apparence d'un « cône » régulier lorsque le déplacement ou plutôt l'écoulement des produits gazeux est ordonné : lors d'un écoulement laminaire. Lorsque les produits de combustion gazeux sont diffusés vers des régions moins concentrées (comme l'air frais) et se déplacent de façon désordonnée, l'écoulement est turbulent et donne une forme variable à la flamme. L'apparence d'une flamme dépend surtout de la nature du combustible et de la vitesse de combustion. En général, plus la combustion est rapide et que le combustible est inflammable, plus la flamme est chaude et laminaire. Sinon, la flamme est plutôt turbulente. *ex : la fumée d'une cigarette s'écoule de façon laminaire et après une hauteur critique, elle devient turbulente.*

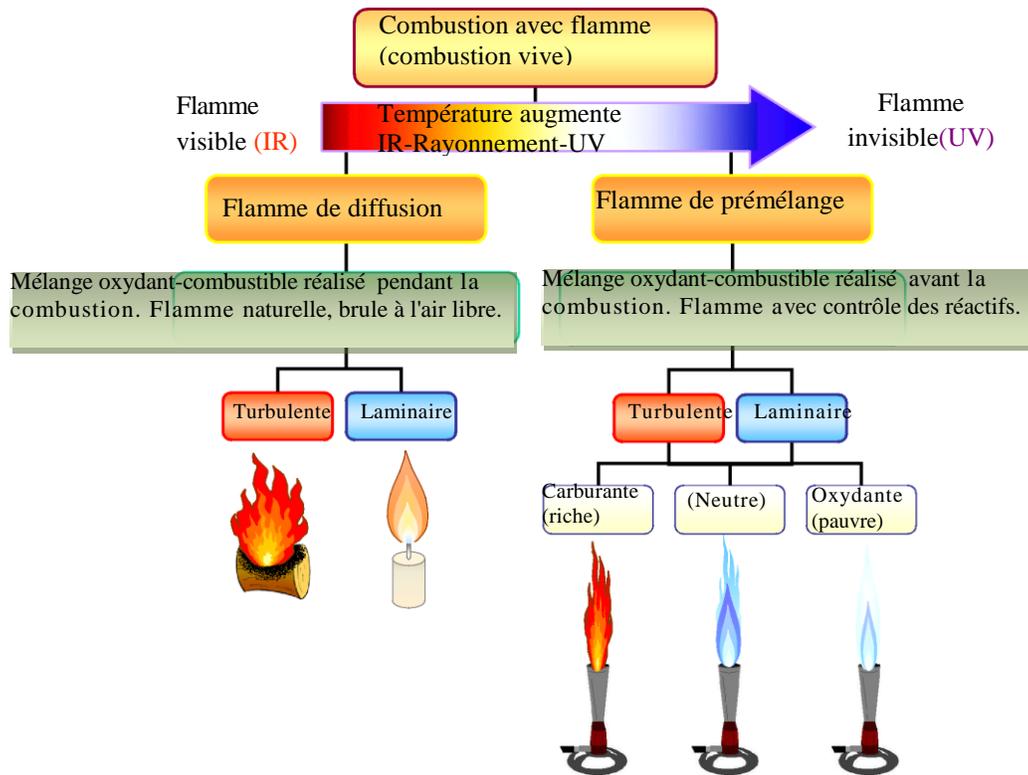


Fig. 5-1: Une classification des types de flammes en fonction de leur forme et de leur mélange réactionnel.

Les flammes et la fumée sont des fluides qui s'écoulent sous l'action de forces extérieures telles que la pression atmosphérique, la gravité, le vent, etc.. Généralement, les flammes de diffusion qui brûlent à l'air libre sont laminaires jusqu'à une hauteur critique d'environ 1 pied (ou 30,5 cm) (ex : flamme de chandelle ou de briquet). Au-delà de cette hauteur, elles deviennent turbulentes (ex : flamme d'un incendie). Malgré les différentes formes occasionnées par l'écoulement turbulent ou laminaire des flammes de diffusion, il y a une constante qui demeure dans tous les cas : la flamme qui brûle à l'air libre (flamme de diffusion) se dirige toujours vers le haut et elle présente toujours une forme pointue, un peu comme un cône... Cette observation qui peut sembler banale s'explique pourtant par un phénomène très complexe (la gravité).

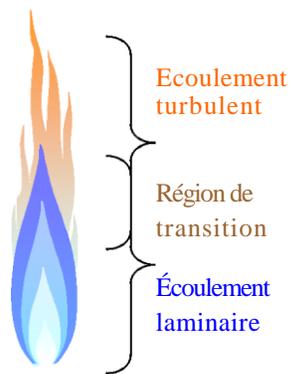


Fig. 5-2: *Flammes de diffusion.*

5.2 Phénomènes impliqués dans une flamme

Lorsqu'on échappe un objet, celui-ci tombe sur le sol sous l'effet de la gravité terrestre. La gravité est une force d'attraction créée par la masse de la terre et qui attire les objets vers elle, un peu comme un aimant. C'est pourquoi tous les objets qui sont plus lourds que l'air tendent à rester au sol, comme si un poids s'exerçait sur eux. La présence de ce « champ de gravité terrestre » cause l'apparition d'un autre phénomène important : la poussée d'Archimède (buoyancy en anglais). Cette poussée est en fait une force opposée de la gravité qui tend à « pousser » les objets vers le ciel plutôt que de les faire descendre vers la Terre. C'est grâce à cette force que les montgolfières peuvent s'élever dans le ciel et que les bateaux peuvent flotter sur l'eau, même si ces objets semblent plus lourds que le fluide dans lequel ils sont plongés (l'air et l'eau). Par exemple, pour savoir si un objet va monter au lieu de descendre, il faut que son poids soit plus léger que celui de l'air qu'il déplace. C'est un peu comme une compétition entre la force de gravité et la poussée d'Archimède. La montgolfière qui s'élève dans le ciel réussit à le faire car dans son cas, la poussée d'Archimède est plus forte que la gravité : la montgolfière devient globalement plus légère que l'air qu'elle déplace. Elle occupe en effet un très grand volume grâce à son gros ballon rempli d'un gaz plus léger que l'air, comme de l'hélium ou de l'air chaud. Lorsqu'on calcule son poids global par unité de volume, on constate qu'elle est plus légère que le volume d'air qu'elle occupe dans le ciel. C'est ce qui la fait monter ! C'est la même chose pour les flammes, elles ont tendance à monter vers le ciel car elles sont plus légères que l'air.

La poussée d'Archimède c'est une force dirigée vers le haut, exercée sur tout corps plongé dans un liquide ou un gaz et égale au poids du fluide déplacé

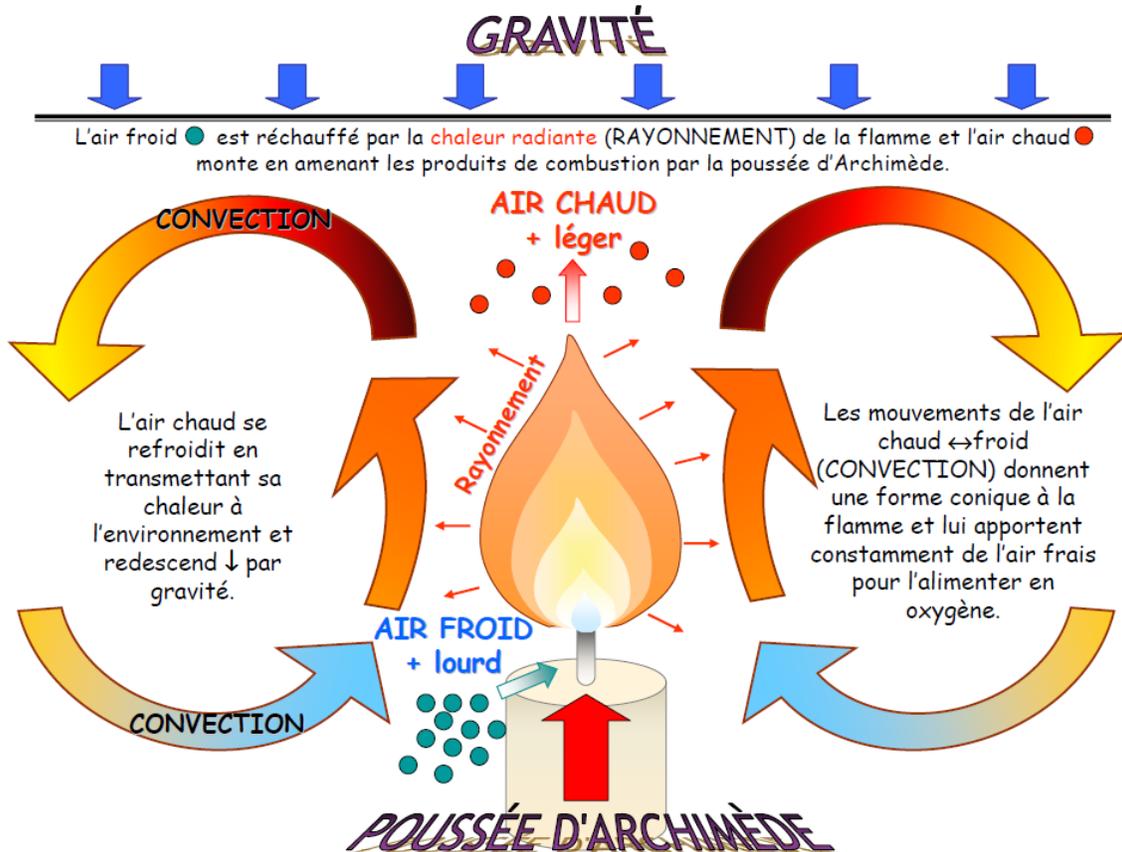


Fig. 5-3 : Gravité, poussée d'Archimède et mouvements de convection impliqués dans une flamme de diffusion

Autrement dit, cela signifie que tout objet déplacé dans l'air subit une force vers le haut qui est égale au poids d'air qu'il déplace. Dans les flammes, l'air chaud composé de produits de combustion mélangés aux autres molécules de l'air comme l'azote, l'oxygène et des gaz rares) monte car il est plus léger et plus dilaté que l'air frais, en raison de l'agitation thermique de ses molécules. L'air frais est plus dense, car ses molécules sont moins agitées et donc plus rapprochées. En montant, l'air chaud d'une flamme déplace un volume d'air, provoquant une poussée d'Archimède de force égale à l'air déplacé et permettant d'élever tous les produits de combustion, même s'ils sont plus lourds que l'air. Ces mouvements d'air causés par les différences de densité (masse/volume) entre l'air

chaud et l'air froid décrivent un phénomène appelé « convection thermique ». Les mouvements de convection expliquent la forme conique d'une flamme, car ils effectuent des mouvements de rotation verticale autour de la flamme en l'effleurant sur les côtés. L'air chaud libéré au-dessus d'une flamme se refroidit à l'air ambiant et redescend, créant un courant d'air frais qui alimente la base de la flamme en oxygène, l'oxydant essentiel à sa survie. Des expériences réalisées dans l'espace et en microgravité ont démontré que l'absence de gravité donne des flammes de forme sphérique qui s'éteignent rapidement, puisqu'elles ne subissent pas ces mouvements de convection et la poussée d'Archimède causés par la gravité

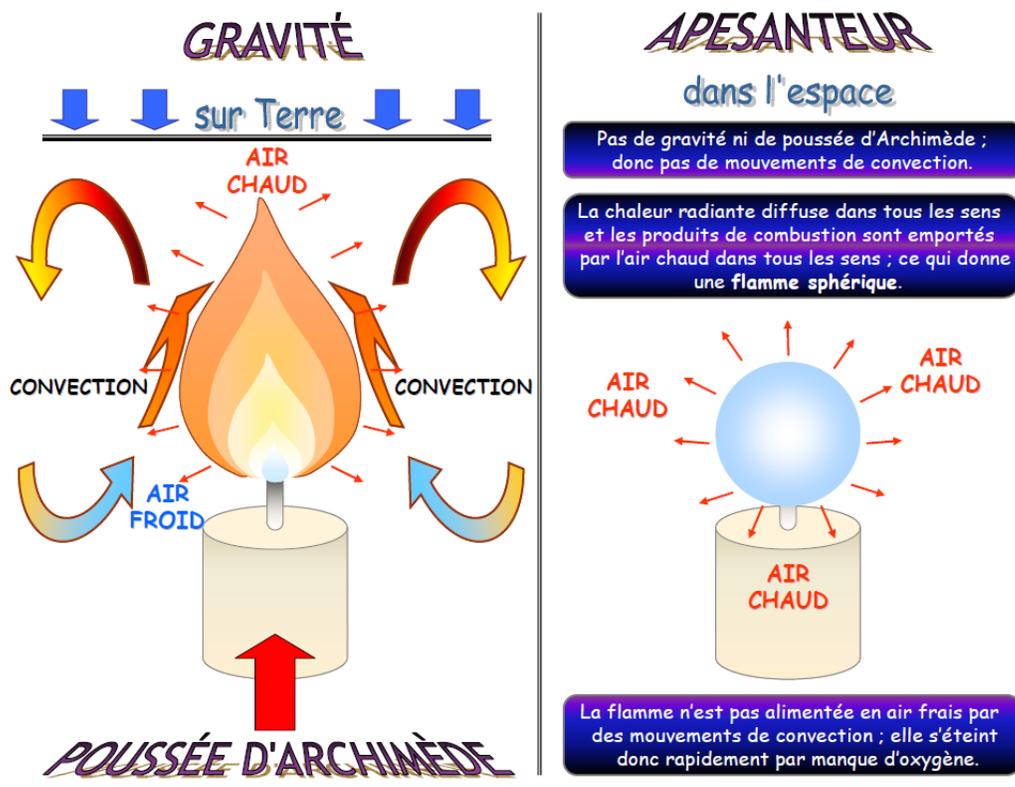


Fig. 5-3: Influence de la gravité sur la forme d'une flamme de diffusion.

La forme irrégulière d'une flamme de diffusion suit tout de même certaines « tendances » et dépend du combustible qui brûle : un gaz, un liquide ou un solide ne donnera pas lieu à la même forme de flamme de diffusion.



Flammes de diffusion turbulentes

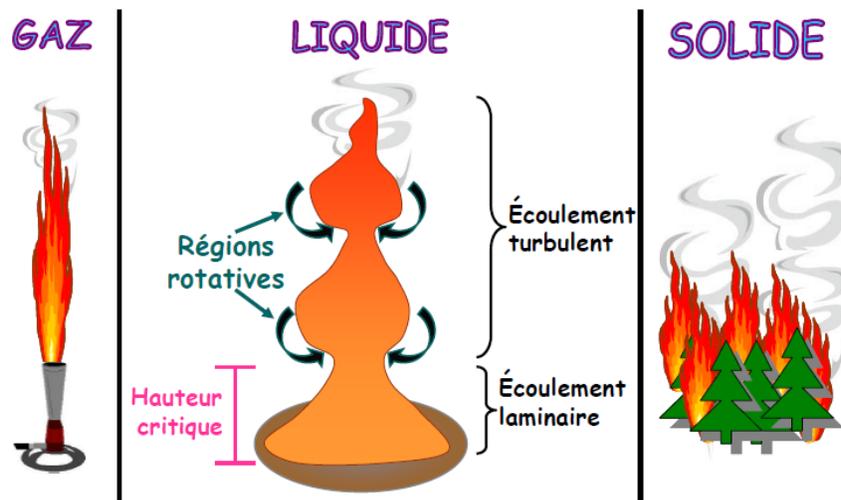


Fig. 5-4 : Formes approximatives de flammes de diffusion turbulentes en fonction de l'état physique du combustible.

5.3 Flamme de diffusion turbulente

Une flamme de diffusion turbulente pourrait être séparée en général en trois principales zones :

5.3.1 La flamme continue : qui est la zone de réaction principale de combustion et la plus chaude.

5.3.2 La région de transition : qui comprend la fin de la flamme visible (front de flamme) et le début du panache.

5. 3.3 Le panache : constitué des gaz et produits de combustion (fumée) émis par le combustible. Ce dernier prend l'allure globale d'un ∇ lorsqu'il est dominé par les mouvements de convection causés par la gravité (panache gravitaire). *Ex: lorsqu'il n'y a pas de vent.*

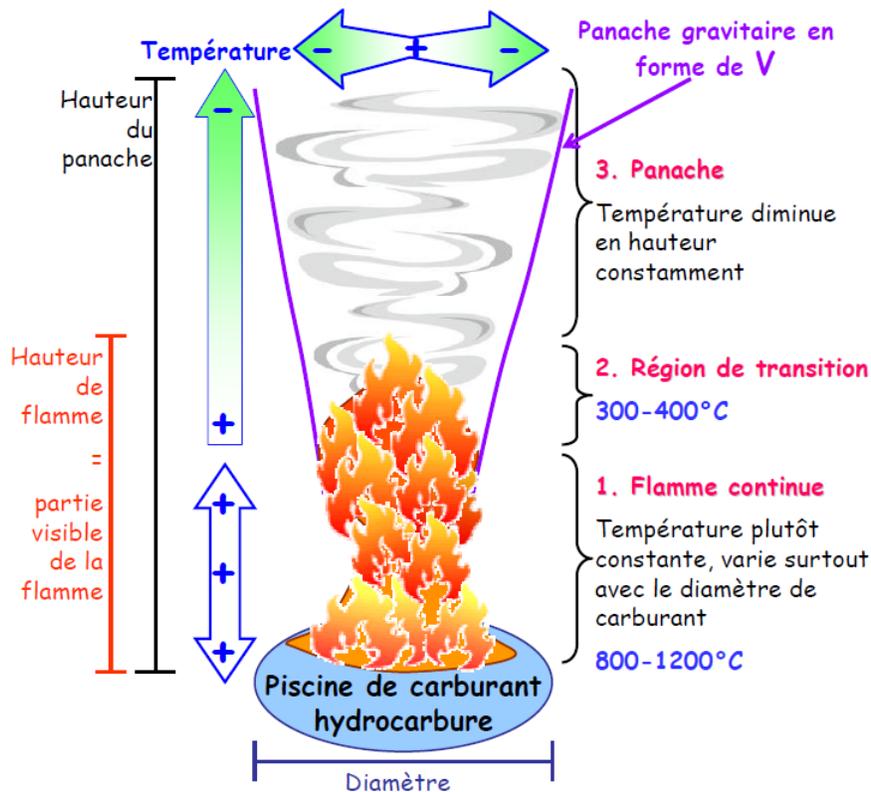


Fig.5-5: Zones d'une flamme de diffusion turbulente impliquant un carburant hydrocarbure.

5.4 Flammes de diffusion laminaires

Contrairement aux flammes de diffusion turbulentes, les **flammes de diffusion laminaires** présentent une forme de « cône » régulier et un panache beaucoup moins haut. Étant plus courtes et souvent plus chaudes, la combustion est plus complète, ce qui diminue l'émission de suie (carbone) au-dessus de ces types de flammes. Étant plus régulières, la répartition des zones à l'intérieur des flammes laminaires sont différentes et plus faciles à identifier. Les zones peuvent être déterminées visuellement par leurs couleurs, qui correspondent à des températures variées.

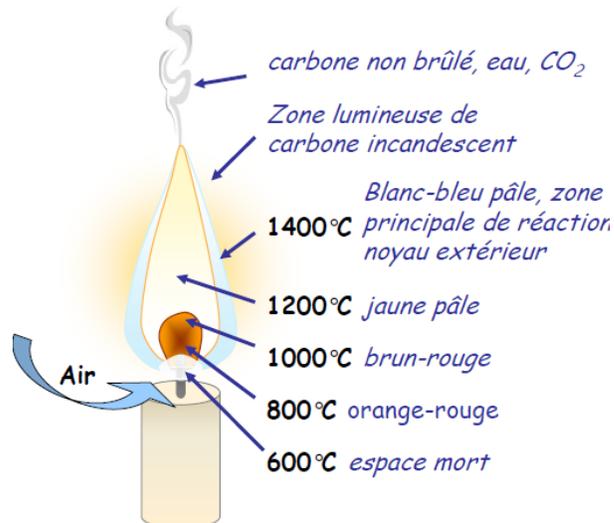


Fig.5-6 : Couleurs et températures des zones d'une flamme de chandelle (flamme de diffusion laminaire).

5.6 La forme des flammes :

Le front de flamme influence la forme : c'est la séparation entre les gaz frais et brûlés ; La hauteur d'une flamme augmente généralement avec l'inflammabilité du combustible; Au-delà de la hauteur critique de la flamme, la turbulence apparaît naturellement avec la perturbation de l'air: il y a création de vortex (spirales) ascendants composés de régions rotatives «*eddies fluctuations*» à des fréquences régulières ;

La hauteur critique qui détermine la transition entre l'écoulement laminaire et turbulent dépend du volume et de la nature du combustible qui alimente la flamme, de la vitesse de combustion, des mouvements de convection de l'air, de la quantité d'oxydant, etc..

Comme on peut le constater, les flammes impliquent plusieurs phénomènes complexes qui continueront encore longtemps de nous intriguer. L'étude approfondie de leurs caractéristiques telles que la couleur, la propagation, la vitesse de combustion, l'émission de bruit, l'étirement, la richesse, le rayonnement, la stabilisation et leur influence sur la pression permettront sûrement un jour de mieux comprendre leur comportement et idéalement, de mieux les contrôler dans notre environnement.

Chapitre 6 : Flamme laminaire de prémélange

Dans ce chapitre, les notions théoriques nécessaires à la compréhension des mécanismes gouvernant la propagation d'une flamme laminaire de prémélange sont présentées.

6.1 Structure d'une flamme laminaire de prémélange

Le processus de combustion correspond à une succession complexe de réactions chimiques élémentaires. En pratique, le schéma réactionnel complexe est remplacé par une réaction globale de la forme.



Où A et B sont le combustible et le comburant (gaz frais), P sont les produits de combustion (gaz brûlés) et Q est le dégagement de chaleur. a et b correspondent aux coefficients stœchiométriques de la réaction. Cette réaction globale de combustion ne donne en fait qu'un bilan de matière mais ne reflète pas le mécanisme réel de la combustion. La présence, en un même endroit, d'un combustible et d'un comburant n'est pas une condition suffisante à la formation d'une flamme. En effet, la proportion de combustible doit être comprise entre deux valeurs limites L_i (limite inférieure au-dessous de laquelle le mélange est trop pauvre pour être inflammable) et L_s (limite supérieure au-dessus de laquelle le mélange est trop riche). Ces grandeurs dépendent du mélange réactif considéré et de la pression. Par ailleurs, il est également nécessaire que la température des gaz frais (température obtenue par chauffage du mélange réactif ou par une étincelle) soit supérieure à la température d'inflammation du mélange. Celle-ci dépend également de la nature des réactifs et de la pression.

La chaleur et les espèces réactives produites localement par la réaction diffusent vers les gaz frais. Ainsi, la flamme se propage de proche en proche, en amenant progressivement les gaz frais adjacents dans les conditions d'inflammation. D'après la théorie de Mallard et Le Châtelier [7], la zone intermédiaire entre les gaz frais et les gaz brûlés peut être séparée en deux zones : la zone de préchauffage et la zone de réaction (Fig.6-1). Les gaz frais et les gaz brûlés sont séparés par une mince zone de réaction, le front de flamme.

Le flux de chaleur provenant des gaz brûlés élève la température des gaz frais en amont, sur une épaisseur δ_p . Dans cette zone de préchauffage, les réactions chimiques peuvent être considérées comme négligeables devant les effets de diffusion thermique. Dans la zone de réaction d'épaisseur δ_r , le pic de dégagement de chaleur est dû aux réactions chimiques.



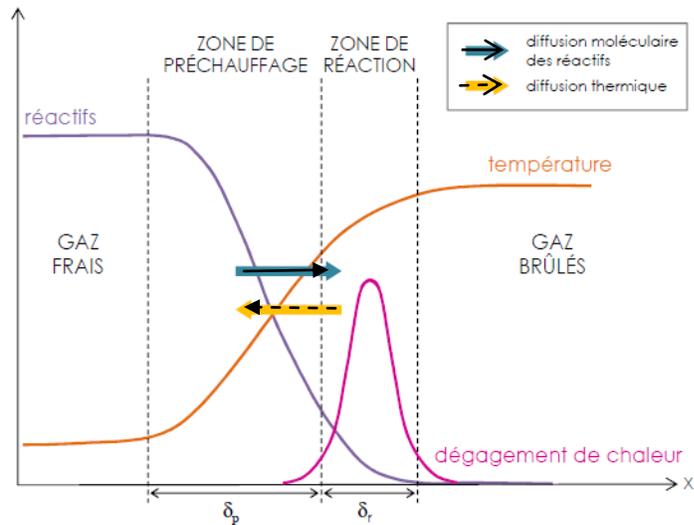


Fig.6-1 : Structure d'une flamme laminaire de prémélange [7].

6.2 Vitesse de propagation et vitesse de combustion laminaire

La flamme se propage des gaz brûlés vers les gaz frais. La « vitesse de flamme » est une notion importante dans la théorie de la combustion. Il existe cependant différentes définitions de la vitesse de flamme et différentes façons de la mesurer expérimentalement. On utilise ici les deux définitions suivantes, proposées par Poinot et Veynante [8]:

- La vitesse de combustion laminaire S_L est une grandeur globale et est associée, dans le cas d'une flamme plane, à la vitesse de consommation S_C des gaz frais. Elle mesure la vitesse à laquelle sont brûlés les réactifs.
- La vitesse absolue V_L (appelée par la suite vitesse de propagation) est définie localement et correspond à la vitesse normale à laquelle se déplace le front de flamme dans le référentiel fixe du laboratoire.

Considérons un point situé sur une iso-surface de température d'un front de flamme (Fig.6-2). On définit en ce point la normale \vec{n} au front de flamme, dirigée vers les gaz frais. La vitesse \vec{w} est la vitesse de déplacement du front de flamme par rapport au référentiel du laboratoire. En ce point, les gaz frais devant le front de flamme se déplacent à la vitesse \vec{u}_g . Par définition, la vitesse de combustion laminaire S_L est normale au front de flamme. On peut écrire la relation vectorielle suivante :

$$\vec{w} = S_L \vec{n} + \vec{u}_g \quad (6.2)$$

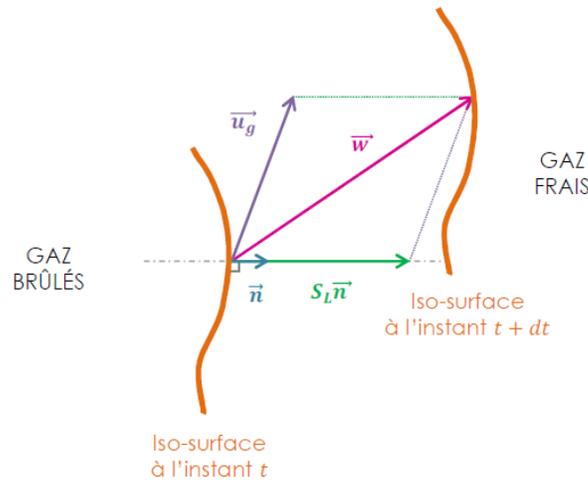


Fig.6-2 : Notations utilisé pour les définitions des vitesses de flamme.

Dans le cas d'une flamme plane ou sphérique, les vitesses \vec{w} et \vec{u}_g sont colinéaires au vecteur normal \vec{n} . La vitesse de propagation $\vec{V} = \vec{w}\vec{n}$ est alors directement reliée à la somme de la vitesse S_L à laquelle le mélange réactif est consommé et de la vitesse des gaz frais u_g devant le front de flamme :

$$V_L = S_L + u_g \quad (6.3)$$

Les vitesses V_L et S_L dépendent des déformations du front de flamme telles que l'étirement. On utilisera par la suite les notations V_L^0 et S_L^0 pour désigner respectivement la vitesse de propagation laminaire et la vitesse de combustion laminaire d'une flamme plane, adiabatique et non-étirée. Dans le cas général, la vitesse de consommation S_C correspond à la vitesse à laquelle sont consommés les réactifs, c'est-à-dire la vitesse à laquelle sont formés les produits. Elle peut donc se définir à partir du taux de réaction $\dot{\omega}_f$ ou du taux de formation $\dot{\omega}_p$ d'un produit de la réaction, dans l'hypothèse d'un front de flamme infiniment mince :

$$S_C = \frac{1}{\rho_u Y_f^u} \int_{-\infty}^{+\infty} \dot{\omega}_f dn = \frac{1}{\rho_u Y_p^b} \int_{-\infty}^{+\infty} \dot{\omega}_f dn \quad (6.4)$$

où ρ_u est la masse volumique des gaz frais et Y_f^u et Y_p^b sont respectivement les fractions massiques d'un réactif dans les gaz frais et d'un produit dans les gaz brûlés. La relation (6.4) peut également s'écrire, quelle que soit l'espèce k (k réactif ou produit de la réaction) sous la forme :

$$S_C = \frac{1}{\rho_u (Y_f^b - Y_f^u)} \int_{-\infty}^{+\infty} \dot{\omega}_k dn \quad (6.5)$$

Pour une pression donnée, l'augmentation de la température entraîne une augmentation de la vitesse de combustion laminaire. En effet, à haute température, les réactions de dissociations sont favorisées. Celles-ci introduisent alors de nombreux radicaux libres, initiateurs de la réaction de combustion, et permettent donc d'augmenter la vitesse de propagation de la flamme. Glassman [78] a montré que la vitesse de combustion laminaire et la température sont reliées par la relation suivante :

$$S_L^0 \sim \left(\exp\left(-\frac{E}{RT_i}\right) \right)^{1/2} \quad (6.6)$$

où E est l'énergie d'activation de la réaction et R la constante des gaz parfaits.

A l'inverse, l'augmentation de la pression à une température donnée entraîne une diminution de la vitesse de combustion laminaire. Ce phénomène a également été démontré d'un point de vue théorique par Glassman [78] qui a établi la relation suivante :

$$S_L^0 \sim (P_i^{n-2})^{1/2} \quad (6.7)$$

où n est l'ordre global de la réaction. De manière générale, dans le cas d'une combustion hydrocarbure/air, la vitesse de combustion diminue avec l'augmentation de pression. En effet, à haute pression, la réaction de recombinaison suivante $H + O_2 + M \rightarrow HO_2 + M$ entre en compétition avec la réaction d'initiation fournissant les radicaux libres O et OH : $H + O_2 \rightarrow O + OH$ [9]. A pression élevée, cette réaction de recombinaison inhibe donc la réaction globale de combustion et la vitesse de combustion laminaire est alors plus faible qu'à pression atmosphérique.

6.3 Epaisseur de flamme laminaire

On recense dans la littérature plus de sept définitions de l'épaisseur de flamme laminaire δ_L . Néanmoins, la définition la plus largement utilisée reste celle établie par Zeldovich [10] :

$$\delta_L = \frac{\lambda}{\rho C_p S_L^0} \quad (6.8)$$

Où λ , ρ_u et C_p sont respectivement la conductivité thermique, la masse volumique et la capacité calorifique massique à pression constante du mélange réactif, S_L^0 est la vitesse de combustion laminaire d'une flamme plane, adiabatique et non-étirée. Cette définition est déduite de l'équilibre entre la diffusion thermique et la diffusion des espèces, c'est-à-dire que la quantité de chaleur dégagée par la combustion sert à élever la température des gaz frais dans l'épaisseur δ_L à la température adiabatique de flamme [11]. Le front de flamme laminaire ne correspondant pas à



une discontinuité brusque (Fig. 6-1), l'épaisseur de flamme laminaire peut être considérée comme la somme de l'épaisseur de préchauffage δ_p et de l'épaisseur de la zone de réaction δ_r .

On peut alors définir un temps caractéristique de la combustion τ_c comme le rapport $\frac{\delta_L}{\delta_L^0}$. Celui-ci intègre le temps de préchauffage et le temps de réaction.

6.4 Étirement du front de flamme

La vitesse de combustion laminaire S_L^0 est une grandeur caractéristique d'un mélange combustible. Cette grandeur se définit dans une situation de flamme plane se propageant librement dans un mélange combustible homogène. En pratique, la flamme plane ne peut pas être reproduite expérimentalement car les zones réactives sont toujours soumises à des contraintes extérieures locales (pertes de chaleur, profil de vitesse dans les gaz frais non plat, ...). La vitesse de combustion est alors modifiée localement et l'amplitude de cette variation est extrêmement riche en information pour de nombreux domaines en combustion. Le concept d'étirement de flamme a été largement étudié par de nombreux auteurs, notamment Clavin [12] et Markstein [13], et regroupe en un seul paramètre la contribution de deux mécanismes physiques influençant localement la structure de la flamme : les gradients de vitesse devant la flamme et la courbure des zones réactives. L'étirement des zones réactives peut entraîner, suivant la composition des mélanges, une augmentation ou une diminution de la vitesse de combustion laminaire, voire, pour les plus fortes valeurs d'étirement, des extinctions locales de la flamme. Williams [14] propose la formulation générale d'un facteur d'étirement, exprimé comme la variation dans le temps d'un élément de surface A :

$$K = \frac{1}{A} \frac{dA}{dt} \quad (6.9)$$

Il existe dans la littérature différentes formulations du facteur d'étirement K . Candel and Poinso [39] établissent une expression générale de l'étirement K à partir de l'équation de transport appliquée au vecteur normal \vec{n} d'un élément de surface A se déplaçant à la vitesse \vec{w} :

$$K = -\vec{n} \cdot \vec{\nabla} \vec{w} + \vec{\nabla} \cdot \vec{w} \quad (6.10)$$

$$\text{Où } \vec{n} \cdot \vec{\nabla} \vec{w} = n_i n_j \partial w / \partial x_j$$

La vitesse \vec{w} peut s'écrire comme la somme de la vitesse locale des gaz frais \vec{u}_g et de la vitesse de la flamme dans la direction normale (équation (6-2)). Le facteur d'étirement s'écrit alors [15]:

$$K = -\vec{n} \cdot \vec{\nabla} \vec{u}_g + \vec{\nabla} \cdot \vec{u}_g + S_L \vec{\nabla} \cdot \vec{n} \quad (6.11)$$

Dans l'expression (6-9), les deux premiers termes sont associés au gradient de vitesse tangentielle. Le terme $S_L \vec{\nabla} \cdot \vec{n}$ décrit les effets de la courbure de la flamme.

On peut alors définir les étirements K_S et K_C respectivement liés aux étirements tangentiels et à la courbure du front de flamme par :

$$K = K_S + K_C \quad (6.12)$$

avec

$$K_S = -\vec{n}\vec{n} : \vec{\nabla} \vec{u}_g + \vec{\nabla} \cdot \vec{u}_g \quad (6.12a)$$

et

$$K_C = S_L \vec{\nabla} \cdot \vec{n} \quad (6.12b)$$

6.5 Principales configurations expérimentales des flammes laminaires de prémélange

Plusieurs configurations expérimentales utilisées dans la littérature permettent d'étudier les flammes laminaires dans des conditions simplifiées et d'en déterminer les caractéristiques fondamentales. Ces techniques impliquent des flammes qui sont soit stabilisées (flammes coniques, flammes plates ou flammes à jets opposés), soit en propagation dans un milieu homogène au repos (flammes sphériques en expansion). Ces quatre principales configurations ainsi que leurs caractéristiques en termes d'étirement sont présentée ci-dessous (Fig.6-3).

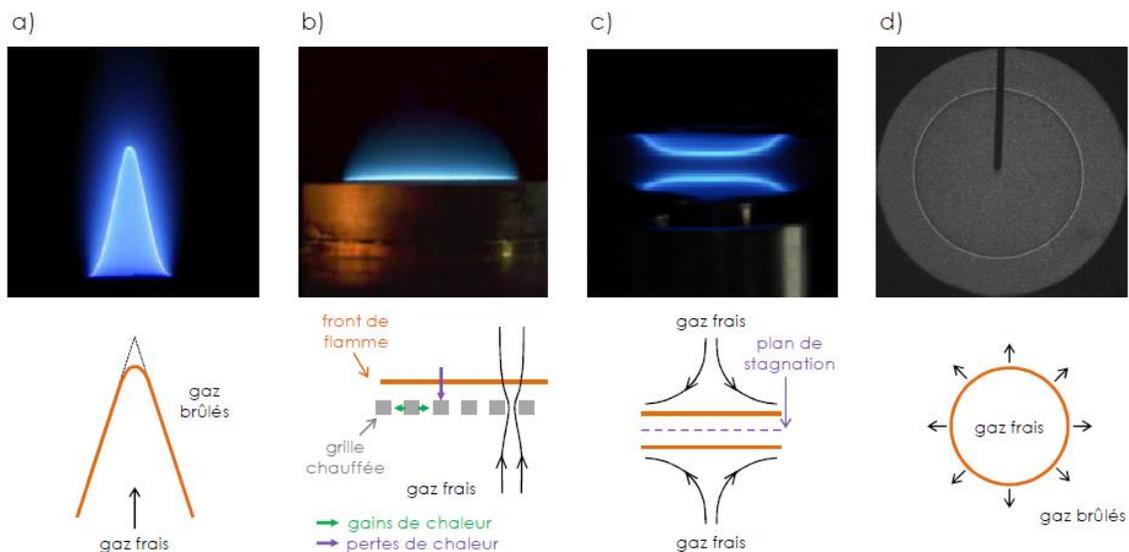


Fig.6-3 : Configuration de flammes laminaires : a) flamme conique, b) flamme plate flamme, c) à jets opposés, d) flamme sphérique[15].

6.6. Vitesse de combustion d'une flamme sphérique en expansion

6.6.1. Vitesse de combustion laminaire étirée

Les techniques de diagnostics optiques telles que l'ombroscopie ou la tomographie laser par diffusion de Mie permettent de déterminer le rayon du front de flamme R_f correspondant respectivement au gradient maximal de température dans le front de flamme ou à l'isotherme associée à la température d'évaporation des particules d'ensemencement utilisées en tomographie. La position du rayon du front de flamme considéré est essentielle dans la détermination théorique de la vitesse de flamme laminaire. En pratique, la position du rayon R_f dans le front de flamme est à l'origine de l'hypothèse de flamme infiniment mince.

La mesure expérimentale de l'évolution temporelle du rayon du front de flamme R_f permet de définir la vitesse de propagation étirée V_L , c'est-à-dire la vitesse de déplacement du front de flamme dans le référentiel du laboratoire :

$$V_L = \frac{dR_f}{dt} \quad (6.13)$$

Dans le cas d'une flamme sphérique en expansion, la seule vitesse pouvant être déterminée expérimentalement sans ambiguïté est la vitesse de propagation laminaire étirée V_L . En effet, la relation entre la vitesse de propagation laminaire V_L et la vitesse de combustion laminaire S_L n'est pas évidente et s'appuie sur de nombreuses hypothèses. On trouve couramment dans la littérature la relation suivante :

$$S_L(K) = \frac{\rho_b}{\rho_u} V_L(K) \quad (6.14)$$

où ρ_u et ρ_b sont respectivement les masses volumiques des gaz frais et des gaz brûlés. Cette relation approximée ne prend cependant pas en considération les phénomènes suivants :

- Pendant les premiers instants de la propagation de la flamme, l'énergie déposée à l'allumage modifie la température des gaz brûlés ainsi que la vitesse de combustion.

- Les effets de courbure et de diffusion influencent également l'évolution de la propagation de la flamme et la température des gaz brûlés. Dans l'équation (6-14), les effets de l'étirement sur la masse volumique ρ_b ne sont pas pris en compte.

- Pour les grands rayons, le confinement de la flamme dans une enceinte fermée influence ρ_b et ρ_u et donc modifie la vitesse de flamme S_L .

Ainsi, on préférera utiliser ici la démonstration décrite dans [16], permettant de relier la vitesse de consommation S_C à la vitesse de propagation V_L .

La vitesse de consommation des gaz frais S_L peut s'exprimer à partir du taux de réaction $\dot{\omega}_k$ de l'espèce k (équation (6-5)). Dans le cas d'une flamme sphérique en expansion, elle s'écrit sous la forme :

$$S_C = \frac{1}{\rho_u(Y_k^b - Y_k^u)r^2} \int_0^{R_0} \dot{\omega}_k r^2 dr \quad (6.15)$$

où Y_k^u est la fraction massique de l'espèce k les gaz frais, et R_0 est la limite du domaine d'intégration (en pratique, R_0 correspond au rayon de l'enceinte de combustion).

D'après l'équation de conservation de l'espèce k , on peut également écrire:

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \vec{\nabla}(\rho(u_i + V_{k,i})Y_k) = \dot{\omega}_k \quad (6.16)$$

où u_i et $V_{k,i}$ sont respectivement les i -èmes composantes de la vitesse du fluide et de la vitesse de diffusion de l'espèce k . L'intégration de l'équation (1-14) dans le domaine de contrôle ($0 \leq r \leq R_0$) donne :

$$\frac{\partial M_k}{\partial t} + 4\pi R_0^2 \rho_u Y_k(r = R_0)[u_r(r = R_0) + V_{k,r}(r = R_0)] = \int_0^{R_0} \dot{\omega}_k 4\pi r^2 dr \quad (6.17)$$

où M_k est la masse totale de l'espèce k dans le domaine: $M_k = \int_V \rho Y_k dV$. Le second terme à gauche de l'égalité (1-15) représente le flux de l'espèce k sortant du domaine au rayon $r = R_0$. En utilisant la définition (1-13) de la vitesse de combustion laminaire, l'équation (1-15) devient :

$$\frac{\partial M_k}{\partial t} + 4\pi R_0^2 \rho_u Y_k(r = R_0)[u_r(r = R_0) + V_{k,r}(r = R_0)] = S_C 4\pi r^2 \rho_u [Y_k^b - Y_k^u] \quad (6.18)$$

Dans une configuration où la flamme se propage dans un espace fini (dans une enceinte de combustion par exemple), la vitesse de diffusion de l'espèce k , $V_{k,r}$, et la vitesse des gaz u_r sont nulles lorsque $r = R_0$. La relation (1-11) est valable avec k étant un réactif ou un produit de la combustion. On considère le cas où k est un produit. On définit alors un rayon moyen r_p correspondant à une sphère contenant la masse M_p de produits formés :

$$r_p^3 = \frac{M_p}{\left(\frac{4\pi}{3}\right) Y_p^b (\bar{\rho}_b)} \quad (6.19)$$

où Y_p^b est la fraction massique d'un produit de la réaction dans l'ensemble des gaz brûlés et $\bar{\rho}_b$ est la masse volumique des gaz brûlés moyenné spatialement entre $r = 0$ et $r = r_p$.

Les équations (1-14) et (1-15) donnent alors :

$$S_C = \frac{\bar{\rho}_b dr_p}{\rho_u dt} + \frac{r_p d\bar{\rho}_b}{3\rho_u dt} \quad (6.20)$$

Il est important de remarquer que la définition (6-20) de la vitesse de consommation ne suppose pas que la flamme est infiniment mince. En pratique, la détermination de la vitesse de consommation S_C à partir de la relation (6-20) nécessite néanmoins d'émettre quelques hypothèses sur $\bar{\rho}_b$ et ρ_u . En effet, on suppose que les masses volumiques sont homogènes dans l'espace et ne varient pas au cours du temps. Ainsi, il est généralement admis que la masse volumique des gaz frais ρ_u reste égale à sa valeur initiale, en négligeant les effets de confinement, c'est-à-dire en supposant que l'enceinte est suffisamment grande. La masse volumique moyenne $\bar{\rho}_b$ est obtenue en admettant que sa valeur ne varie pas entre $r = 0$ et $r = r_p$, et est assimilée à la masse volumique des gaz brûlés à l'équilibre $\rho_b^{éq}$. Il est important de noter que cette approximation est moins bien vérifiée à basse pression par exemple, c'est-à-dire lorsque l'épaisseur de flamme est relativement grande. La masse volumique moyenne ρ_b peut aussi être considérée comme constante au cours du temps sous l'hypothèse d'une combustion isobare. Dans ces conditions, l'équation (6-20) devient alors :

$$S_C = \frac{\rho_b^{éq}}{\rho_u(t=0)} \frac{dr_p}{dt} \quad (6.21)$$

Il est impossible de distinguer les rayons r_p et R_f . Ainsi, dans la suite, on fera l'hypothèse d'une flamme infiniment mince et on admettra que $r_p \approx R_f$.

6.6.2. Vitesse de combustion laminaire non-étirée et longueur de Markstein

Afin d'obtenir une vitesse de flamme non-étirée (c'est-à-dire indépendante de la configuration expérimentale) et ainsi, caractéristique d'un mélange réactif, il est nécessaire de corriger la vitesse de propagation étirée obtenue expérimentalement.

Dans le cas d'une flamme sphérique en expansion, l'étirement total K que subit la flamme à chaque instant s'écrit, d'après l'équation (6-7) :

$$K = \frac{2}{R_f} \frac{dR_f}{dt} \quad (6.22)$$

Bradley et al. [17] expriment les étirements K_S et K_C à partir des relations (6-12a) et (6-12b) proposées par Candel and Poinot [18], dans le cas d'une flamme laminaire sphérique :

$$K_S = \frac{2}{R_f} u_g \quad \text{et} \quad K_C = \frac{2}{R_f} S_L \quad (6.23)$$

On retrouve, en utilisant la relation (6-3) entre les vitesses S_L , u_g et V_L , l'expression (6-20) écrite sous la forme :

$$K = \frac{2}{R_f} V_L \quad (6.24)$$

L'existence d'une relation entre la vitesse de propagation laminaire locale et la courbure locale du front de flamme a été suggérée la première fois par Markstein [13]. par la formulation linéaire suivante :

$$V_L = V_L^0 - L_b K \quad (6.25)$$

où V_L^0 est la vitesse de propagation non-étirée définie pour une flamme plane, L_b est la longueur de Markstein côté gaz brûlés, paramètre qui dépend des propriétés physicochimiques du mélange réactif.

Dans le cas d'une flamme non-étirée, la vitesse de combustion laminaire S_L^0 est égale à la vitesse de consommation des gaz frais [19]. D'après l'équation (1-21), à pression constante et dans l'hypothèse d'un front infiniment mince, on peut alors écrire :

$$S_{L_C}^0 = \frac{\rho_b^{éq}}{\rho_u} V_L^0 \quad (6.26)$$

où $\rho_b^{éq}$ est la masse volumique des gaz brûlés supposée uniforme et à l'équilibre. Le rapport $\frac{\rho_b^{éq}}{\rho_u}$ correspond au facteur d'expansion thermique.

6.7. Instabilités du front de flamme

Les instabilités de combustion sont nombreuses et proviennent de l'interaction de deux ou plusieurs phénomènes physiques. Certaines font intervenir les propriétés du système (instabilités dues aux forces de gravité par exemple), d'autres sont intrinsèques aux mécanismes de propagation du front de flamme (instabilités hydrodynamiques et thermodiffusives). L'ensemble de ces instabilités modifie à la fois l'équilibre local des paramètres thermodynamiques et les concentrations locales des espèces, et provoque la déformation du front de flamme.

Les instabilités thermo-diffusives sont dues à la compétition entre la diffusion moléculaire (flux de masse) et la diffusion thermique (flux de chaleur), et peuvent stabiliser la flamme ou, au contraire, favoriser le développement de structures en forme de cellules. Ces deux effets se traduisent par des valeurs caractéristiques du nombre de

Lewis Le , c'est-à-dire du rapport entre la diffusivité thermique D_{th} et la diffusivité moléculaire D_m du réactif limitant.

$$D_{th} = \frac{\lambda}{\rho_u c_p} \quad (6.27)$$

La diffusivité thermique est évaluée dans les gaz frais à la température initiale T_i .

où λ , conductivité thermique du mélange, est calculée à partir de l'expression suivante [20] :

$$\lambda = \frac{1}{2} \left[\left(\sum_{j=1}^n X_j \lambda_j \right) + \frac{1}{\sum_{j=1}^n X_j / \lambda_j} \right] \quad (6.28)$$

X_j étant la fraction molaire de l'espèce j du mélange. Les conductivités thermiques des espèces pures, λ_j , sont déduites de relations empiriques logarithmiques fonctions de la température [20].

La diffusivité moléculaire D_m correspond à la diffusivité moléculaire du réactif limitant k dans le mélange réactif. Elle est définie au chapitre 4 :

$$D_m = \frac{1 - Y_k}{\sum_{j \neq k} X_j / D_{jk}} \quad (6.29)$$

où Y_k est la fraction massique de l'espèce k et D_{jk} sont les diffusivités moléculaires des espèces j dans k , calculées à partir de relations empiriques fonctions du logarithme de la température [20].

$Le < 1$: La diffusivité moléculaire est plus grande que la diffusivité thermique, ce qui se traduit par une diminution de la vitesse de flamme. Ces effets thermo-diffusifs sont alors déstabilisants.

$Le < 1$: La diffusion de chaleur est importante par rapport à la diffusion de masse. Cela implique une augmentation de la vitesse de flamme dans les zones concaves et une diminution dans les zones convexes. Les effets thermo-diffusifs sont donc stabilisants.

Les nombres de Lewis Le_D et Le_E sont déterminés en considérant respectivement le réactif limitant ou le réactif en excès. Celle-ci permet de définir un nombre de Lewis «effectif» Le_{eff} , correspondant à une moyenne pondérée des nombres Le_D et Le_E nombre de Lewis Le_{eff} est définie par [21] :

$$Le_{eff} = 1 + \frac{(Le_E - 1) + (Le_D - 1)A}{1 + A} \quad (6.30)$$

A est tel que $A = 1 + \beta(\theta - 1)$, avec $\theta = \phi$ si le mélange est riche et $\theta = 1/\phi$ si le mélange est pauvre, ϕ étant la richesse du mélange. β correspond à l'énergie réduite d'activation de la réaction et est définie par la relation suivante :

$$\beta = E(T_a - T_i)/RT_a \quad (6.31)$$

où R est la constante des gaz parfaits, T_i est la température initiale des gaz frais et T_a , est la température adiabatique de flamme déterminée en utilisant le code de calcul *EQUIL* du package Chemkin [20] et E est l'énergie d'activation de la réaction [21].

Exercice 6.1

Le temps caractéristique de réaction d'un processus de combustion est donné par la relation suivante : $\frac{1}{\tau} = 1.10^{10} \exp\left(-\frac{160}{RT}\right) s^{-1}$. Le coefficient de diffusion moyen a la valeur $D = 0.1(T/298)^{1.7} cm^2$. Le nombre de Lewis $Le=1$. Quelles sont les valeurs de la vitesse de flamme laminaire à 1000K et 2000K. L'épaisseur de la flamme est donnée approximativement par $d = cons/(\rho_u v_L)$. De quelle manière l'épaisseur de la flamme dépend de la pression.

$$\text{Soit : } Le = D/\alpha \text{ avec } \alpha = \lambda/\rho c_p$$

$$\text{Vitesse de flamme } v_L = \sqrt{\alpha/\tau}$$

$$\delta_L = \frac{\lambda}{\rho c_p S_L^0}$$

Exercice 6.2

Un mélange hydrocarbure-air dans une bulle de savon avec un diamètre de 2 cm est allumé dans le centre. La température de gaz non brûlé est $T_u = 300$ K, celle des gaz brûlés est $T_b = 1500$ K. La conduction thermique entre les deux couches doit être négligée. La vitesse de propagation de front de flamme de l'expansion sphérique est de $V_b=150$ cm/s. Quelle est la vitesse de flamme laminaire (prendre en compte que V_b observé est causé par une combinaison de propagation de la flamme et l'expansion). Combien de temps faut-il pour que la flamme a atteint la limite de la bulle, quelle est alors son diamètre? Trace le comportement dans le temps du rayon de la flamme et le rayon de la bulle de savon.

Chapitre 7 : Flamme de diffusion laminaire

7.1 Intérêt des flammes de diffusion laminaire

Dans les flammes non prémélangées ou flammes de diffusion, les réactifs sont introduits séparément dans la zone de réaction, de part et d'autre de la flamme. Ils sont alors essentiellement localement entraînés dans la zone de réaction par diffusion moléculaire. Le prototype de ces flammes, schématisé sur la figure (7.1), est obtenu par injection d'un combustible gazeux dans une atmosphère oxydante (le plus souvent l'air) au repos. C'est, par exemple, la géométrie d'une flamme de bec Bunsen quand la virole est fermée (pas de prémélange d'air à la base du brûleur), d'une flamme de briquet ou encore d'une veilleuse de chauffe-eau. Si cette configuration est moins performante, en terme de dégagement d'énergie, la flamme de diffusion offre, deux avantages indéniables : la simplicité et la sécurité. Les flammes de diffusion sont invoquées pour décrire les combustions liquide/gaz ou solide/ gaz, dont voici quelques exemples.

- **Combustible liquide dans une atmosphère oxydante** (Fig. 7-2). Dans la plupart des applications pratiques, on considère que le liquide est vaporisé avant la zone de flamme qui sépare alors vapeur de combustible et oxydant. Feux de nappes (Fig. 7-5). Dans cette situation, voisine de la précédente, la flamme se développe au-dessus d'un bac de liquide. L'analyse de cette configuration est plutôt du ressort de la protection incendie.

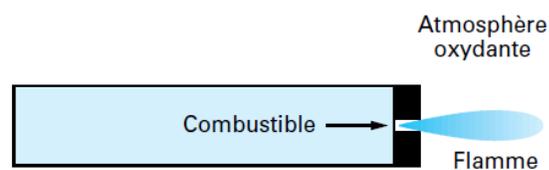


Fig. 7-1 : Géométrie d'une flamme de diffusion laminaire obtenue par injection d'un jet de combustible dans une atmosphère oxydante au repos



Fig.7-2 : (a) Combustion d'une goutte de combustible dans une atmosphère oxydante, (b) Feux de nappes

Combustible solide dans une atmosphère oxydante (Fig. 7-3). Identique à la précédente, hormis le remplacement du combustible liquide par un combustible solide, cette situation concerne nombre de situations pratiques (combustion du bois, du charbon, certains moteurs-fusée, ...) mais aussi la sécurité incendie (combustion d'une paroi, d'un plancher, d'un plafond). Remarquons que l'orientation du combustible solide par rapport à la verticale peut jouer un grand rôle dans la description du phénomène puisqu'elle conditionne l'action de la convection naturelle.

-Déposition chimique en phase vapeur (Chemical Vapor Deposition, ou CVD). Très importante pour l'industrie des semi-conducteurs, cette technique consiste à déposer sur une paroi une couche de matériau (silicium en général) à partir d'un écoulement gazeux. Si cette application est un peu en marge de la combustion « traditionnelle » (écoulements très lents, de quelques millimètres à 1 cm/s ; réactions avec des temps caractéristiques très longs), elle peut néanmoins être décrite comme une flamme de diffusion laminaire. Vu l'importance pratique des flammes non prémélangées, l'étude et la compréhension des flammes laminares de diffusion sont indispensables.

En effet, si elles ne se rencontrent que dans quelques rares applications pratiques (briquet, veilleuse de chauffe-eau ou de chaudière, CVD,...), elles constituent un élément fondamental de la description des flammes turbulentes non prémélangées dont l'importance pratique est considérable (moteurs-fusée, fours industriels et domestiques, moteurs Diesel, etc.). En effet, les flammes turbulentes sont le plus souvent décrites comme constituées d'éléments de flamme laminaire (ou « flammelettes »). La connaissance de la structure et des caractéristiques des flammes laminares de diffusion devient alors primordiale. En outre, la stabilisation des flammes turbulentes s'effectue généralement dans des zones laminares de l'écoulement.

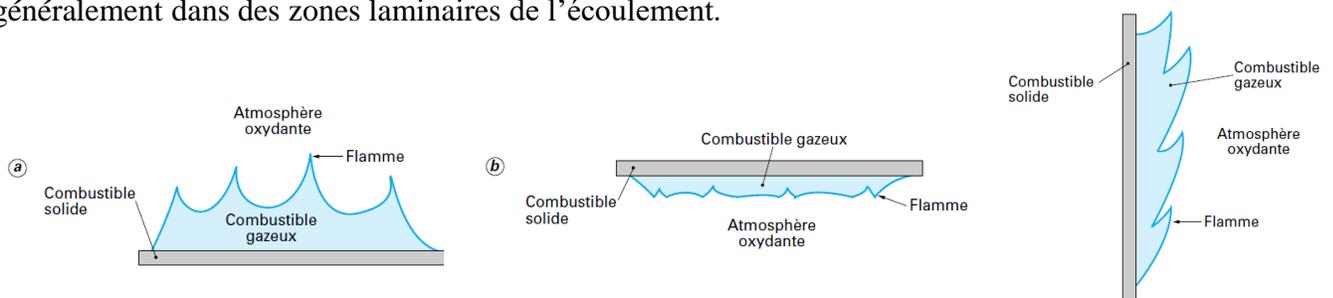


Fig.7-3 :Trois situations sont représentées, selon que la combustion se déroule au-dessus du combustible **a** , au-dessous **b** ou le long d'une paroi **c** [22]

7.1.1 Structure des flammes de diffusion

Dans les flammes de diffusion (ou non-prémélangées par opposition aux flammes parfaitement prémélangées), les réactifs sont introduits séparément dans la zone de réaction, de part et d'autre de la flamme. Une représentation schématique d'une flamme de diffusion est donnée sur la figure 7.4. Dans ce régime de combustion, la flamme est pilotée par la quantité de réactifs entraînés par diffusion moléculaire dans la zone de réaction. L'apport de masse par diffusion limite alors les vitesses de réaction.

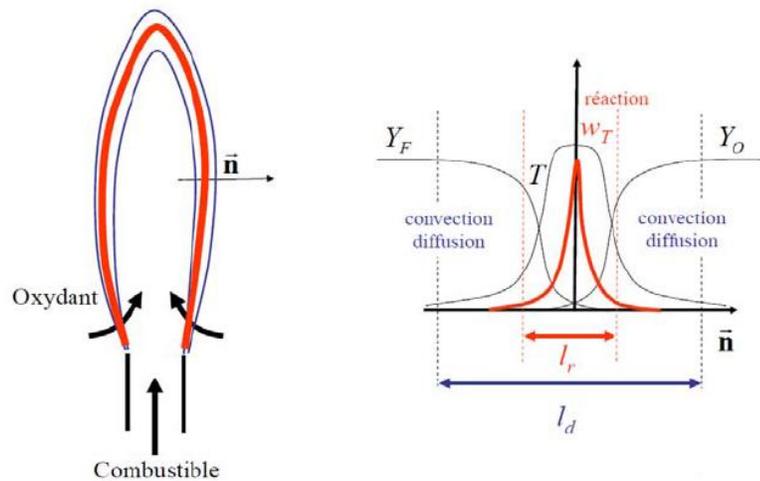


Fig.7-4 : Structure d'une flamme laminaire de diffusion (d'après [23]).

La flamme de diffusion se structure en trois zones distinctes (Fig. 7-4) :

- la zone de réaction (l_r) correspond à la zone de dégagement maximal de chaleur (les termes sources chimiques atteignent un maximum), lorsque les réactifs chauds sont mélangés à l'échelle moléculaire dans des proportions stœchiométriques. Les réactifs y sont entièrement consommés et la température atteint la température adiabatique de flamme.
- la zone de diffusion (l_d) est une zone où les réactifs froids se mélangent aux produits de réaction chauds évacués de la zone de réaction par diffusion. Les réactifs y sont chauffés par diffusion thermique de la zone de réaction et par dilution avec les gaz chauds. Dans l'hypothèse d'un nombre de Lewis unitaire, les zones de diffusion des espèces et de la température sont similaires.

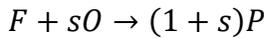
- la zone d'apport des réactifs froids, de part et d'autre de la zone de diffusion, alimentée dans le cas présenté ci-dessus par convection.

La structure de la flamme de diffusion laminaire est entièrement pilotée par la compétition entre la chimie et la diffusion, et donc indirectement par l'apport des réactifs. Elle se distingue de la flamme de prémélange, la dynamique de la flamme de diffusion est imposée par la dynamique de l'écoulement qui alimente la flamme.

7.2 Calcul d'une flamme de diffusion laminaire

Il s'agit de l'étude d'un jet plan bidimensionnel de combustible F , cocourant avec un jet infini d'oxydant O . Les deux jets sont supposés avoir le même débit unitaire initial ρ_u (soit $\rho_F U_F = \rho_O U_O$ où ρ_F et ρ_O désignent respectivement les masses volumiques des écoulements combustible et oxydant, tandis que U_F et U_O correspondent aux vitesses de ces écoulements). Cette configuration idéale n'est pas réaliste puisqu'elle suppose implicitement un débit infini d'oxydant.

Dans le cas simplifié d'une réaction unique et irréversible du type :



où s désigne le coefficient stœchiométrique massique de la réaction (pour brûler 1 kg de combustible, il faut s kg d'oxydant).

Soit Y_F et Y_O les fractions massiques de combustible et de comburant. Elles obéissent aux équations de transport :

$$\frac{\partial \rho Y_F}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{V} Y_F) = \nabla \cdot (\rho D \nabla Y_F) + \omega_F \quad (7.1)$$

$$\frac{\partial \rho Y_O}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{V} Y_O) = \nabla \cdot (\rho D \nabla Y_O) + \omega_O \quad (7.2)$$

où D coefficient de diffusion, t temps, \vec{V} vecteur vitesse, ρ masse volumique, ω_F et ω_O vitesses de réaction respectivement du combustible F et du comburant O . Les flux de diffusion moléculaires sont supposés suivre la loi de Fick avec la diffusivité massique ρD .

De même, la fraction massique de produits de combustion Y_P suit l'équation

$$\frac{\partial \rho Y_P}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{V} Y_P) = \nabla \cdot (\rho D \nabla Y_P) + \omega_P \quad (7.3)$$

avec ω_P vitesse de production de produits P . La stœchiométrie de la réaction et la conservation de la masse totale imposent les deux relations :

$$\omega_O = s\omega_F \quad \text{et} \quad \omega_P = -(1 + s)\omega_F \quad (7.4)$$



En supposant que tous les constituants ont, pour simplifier, la même capacité thermique massique à pression constante c_p et la même conductivité thermique λ , l'équation pour température T s'écrit :

$$\frac{\partial \rho c_p T}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{V} c_p T) = \nabla \cdot (\lambda \nabla T) - \Delta H^0 \dot{\omega}_F \quad (7.5)$$

avec ΔH^0 chaleur de réaction massique (par unité de masse de combustible). Le milieu est ici supposé adiabatique (pas de pertes thermiques) et le rayonnement de la flamme est négligé. Il convient maintenant d'ajouter l'équation de conservation de la masse (ou de continuité) :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{V}) = 0 \quad (7.6)$$

et les équations de quantité de mouvement ($j = 1, 2$ ou 3) :

$$\frac{\partial \rho u_j}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{V} u_j) = -\frac{\partial p}{\partial x_j} + \Delta \cdot \tau \quad (7.7)$$

avec u_j composante dans la direction x_j du vecteur vitesse \vec{V} , p pression, τ tenseur des forces visqueuses.

Les forces d'action en volume, et donc la convection naturelle, sont ici négligées.

Pour simplifier le système d'équations précédent, Burke et Schumann [30] introduisent les hypothèses suivantes :

- l'écoulement est stationnaire ;
- toutes les vitesses sont supposées parallèles à l'axe des jets ($u_2 = u_3 = 0$) ; en fait, cette hypothèse n'est pas en fait, cette hypothèse n'est pas légitime, comme cela fut découvert par la suite ; il faudrait faire ici une analyse de type « couche limite » en conservant le gradient transversal de la vitesse u_2 (soit $\partial u_2 / \partial x_2$) ; néanmoins, cette hypothèse permet une analyse simple et ne s'avère pas trop fautive ; c'est pourquoi nous la conserverons ici ;
- tous les flux de diffusion dans la direction de l'écoulement sont négligés devant les flux convectifs ;
- les fluides sont supposés newtoniens.

Les équations précédentes se simplifient alors pour devenir :

$$\frac{\partial \rho u}{\partial x} = 0 \quad (7.8)$$

$$\frac{\partial \rho u Y_F}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial y} \left(\rho D \frac{\partial Y_F}{\partial y} \right) + \dot{\omega}_F \quad (7.9)$$

$$\frac{\partial \rho u Y_O}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial y} \left(\rho D \frac{\partial Y_O}{\partial y} \right) + \dot{\omega}_O \quad (7.10)$$

$$\frac{\partial \rho u Y_P}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial y} \left(\rho D \frac{\partial Y_P}{\partial y} \right) + \dot{\omega}_P \quad (7.11)$$

$$\frac{\partial \rho u c_p T}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial y} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial y} \right) - \Delta H^0 \dot{\omega}_F \quad (7.12)$$

$$\frac{\partial \rho u^2}{\partial x} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial y} \right) \quad (7.13)$$

avec μ viscosité dynamique du fluide.

Nous supposons les nombres de Schmidt des espèces égaux à l'unité, c'est-à-dire que les viscosités dynamique et moléculaire sont identiques ($\mu = \rho D$).

L'équation (7.7) conduit, compte tenu de l'hypothèse que les jets ont le même débit unitaire initial ρu , à la solution immédiate :

$$\rho u = \rho_F U_F = \rho_O U_O = Cte \quad (7.14)$$

L'équation de quantité de mouvement devient alors inutile car la pression est sensiblement constante dans un tel écoulement. Il nous reste donc maintenant à déterminer Y_F , Y_O , Y_P et T . Pour cela, une nouvelle variable, dont vont dépendre ces quatre grandeurs, est introduite.

$$Z_F = Y_F - \frac{Y_O}{s} \quad (7.15)$$

où s est le coefficient stœchiométrique massique de la réaction ($s = \nu_O M_O / \nu_F M_F$), F est le combustible de fraction massique Y_F , O est l'oxydant de fraction massique Y_O et P correspond aux produits. Dans ces conditions de chimie infiniment rapide, la résolution de la flamme de diffusion laminaire est entièrement déterminée par la connaissance de Z_F . L'équation qui régit l'évolution de Z_F est de type convection-diffusion (sans terme source chimique) et Z_F est donc un scalaire passif.

La combinaison linéaire [(7.1) – (7.2)/s] des équations de transport des fractions massiques Y_F et Y_O permet d'établir facilement une équation de transport pour Z_F :

$$\frac{\partial \rho Z_F}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} Z_F) = \nabla \cdot (\rho D \nabla Z_F) + \left(\dot{\omega}_F - \frac{\dot{\omega}_O}{s} \right) \quad (7.16)$$

Par définition de la réaction chimique et du coefficient stœchiométrique massique s , le terme source de cette équation, est nul (équation (7.4)). En effet, il faut s kg d'oxydant O pour brûler 1 kg de combustible F .

La grandeur Z_F suit donc une équation de convection/diffusion sans terme source. C'est pourquoi Z_F est alors appelé scalaire passif (c'est un scalaire qui n'est pas modifié par la réaction chimique). Il est aussi connu sous le nom de variable de Schwab-Zeldovitch.

Remarquons que :

-dans l'écoulement de combustible, $Z_F = Y_F^\infty$ où Y_F^∞ désigne la fraction massique de combustible dans cet écoulement ; cette fraction massique peut être différente de l'unité si le combustible est dilué ;

-dans l'écoulement d'oxydant, Z_F est négatif et vaut $Z_F = -Y_F^\infty/s$, où Y_F^∞ désigne la fraction massique d'oxydant O dans cet écoulement ; cette fraction massique est inférieure à l'unité quand l'oxydant est dilué ; ainsi la fraction massique d'oxygène dans un écoulement d'air (et donc dilué dans l'azote) vaut $Y_F^\infty \approx 0.23$;

- si la réaction chimique est supposée infiniment rapide, c'est-à-dire si le combustible F et l'oxydant O ne peuvent coexister sans être immédiatement transformés en produits P, la zone de réaction vérifie $Y_F = Y_O = 0$ et correspond donc à une valeur $Z_F = 0$; par conséquent, la zone de réaction correspond à l'isovaleur $Z_F = 0$.

Nous avons donc défini un scalaire passif Z_F qui vérifie l'équation de convection-diffusion :

$$\frac{\partial \rho Z_F}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} Z_F) = \nabla \cdot (\rho D \nabla Z_F) \quad (7.17)$$

où la combustion n'intervient pas directement et dont la valeur $Z_F = 0$ correspond à la zone de réaction. La description d'une flamme de diffusion laminaire revient finalement à décrire un problème de mélange. Ce scalaire passif n'est pas unique et il est possible d'en définir d'autres par combinaison linéaire des équations de conservation des espèces et de la température. Ainsi :

- $Z_P = Y_F + Y_F/(1 + s)$ est un scalaire passif qui relie les fractions massiques Y_F de combustible et Y_P de produits de réaction ; de même, $Z_O/s = Y_P/(1 + s)$ est aussi un scalaire passif reliant Y_O et Y_P ;
- sous l'hypothèse d'un nombre de Lewis unitaire (diffusivités thermique et moléculaire identiques : $\rho D_m = D_{th} = \lambda/\rho C_p$), $Z_T = Y_F + c_p/\Delta H^0$ est un scalaire passif qui relie la fraction massique de combustible Y_F à la température T.

Il est facile de montrer que tous ces scalaires passifs sont des fonctions linéaires les uns des autres. Par exemple, remplacer le scalaire Z_P par $Z_P = \alpha Y_F + \beta$, où α et β sont deux constantes, dans l'équation de transport de Z_P redonne immédiatement l'équation de transport de Z_F .



7.2.1 Chimie infiniment rapide

L'hypothèse de chimie infiniment rapide, c'est-à-dire où combustible F et oxydant O ne peuvent coexister, permet de simplifier considérablement notre problème. Nous avons déjà remarqué que la flamme correspond à la valeur $Z_F = 0$, mais il est aussi possible de déterminer complètement la structure du front.

-Du côté du combustible ($Z_F \geq 0$) $Y_O = 0$ (puisque'il ne peut exister d'oxydant), on a :

$$Y_F = Z_F \quad (7.18)$$

-Du côté de l'oxydant $Z_F \leq 0$ et $Y_O = -s Z_F$ (puisque $Y_F = 0$, car il ne peut y avoir du combustible), on a :

$$Y_O = -s Z_F \quad (7.19)$$

Les fractions massiques du combustible Y_F et d'oxydant Y_O sont donc directement proportionnelles au scalaire passif Z_F . La détermination de la fraction massique Y_P des produits de combustion est un peu plus délicate. Puisque $Y_F + Y_P/(1+s)$ et $Y_O/s + Y_P/(1+s)$ sont aussi des scalaires passifs, ils sont des fonctions linéaires de Z_F . La fraction massique Y_P est donc une fonction linéaire de Z_F , par morceaux sur les intervalles $[-Y_F^\infty/s, 0]$ et $[0, Y_F^\infty]$. Bien évidemment, $Y_P = 0$ pour $Z_F = Y_F^\infty$ (écoulement combustible) et $Z_F = -Y_O^\infty/s$ (écoulement oxydant). Puisque Z_P est un scalaire passif, fonction linéaire de Z_F , nous avons :

$$Z_P = Y_F + \frac{Y_P}{1+s} = \alpha Z_F + \beta \quad (7.20)$$

où α et β sont deux constantes, Vu les conditions aux limites :

$$Z_P = Y_F^\infty \quad \text{pour} \quad Z_F = Y_F^\infty$$

$$\alpha = \frac{\emptyset}{\emptyset+1} \quad \text{et} \quad \beta = \frac{Y_F^\infty}{\emptyset+1} \quad (7.21)$$

Où $\emptyset = sY_F^\infty/Y_O^\infty$ est le rapport d'équivalence de la réaction chimique. Doù :

$$Z_P = Y_F + \frac{Y_P}{1+s} = \frac{\emptyset}{\emptyset+1} Z_F + \frac{Y_F^\infty}{\emptyset+1} \quad (7.22)$$

- Côté combustible ($Z_F \geq 0$), on a alors :

$$Y_P = \frac{1+s}{\emptyset+1} [Y_F^\infty - Y_F] \quad (7.23)$$

- Côté oxydant ($Z_F \leq 0$), on a alors :

$$Y_P = \frac{1+s}{\emptyset+1} [\emptyset Z_F + Y_F^\infty] = \frac{1+s}{s} \frac{\emptyset}{1+\emptyset} [sZ_F + Y_O^\infty] \quad (7.24)$$

La fraction massique maximale de produits Y_P^{max} , est donc obtenue sur la surface de flamme ($Z_F = 0$) et vaut :



$$Y_P^{max} = \frac{1+s}{\phi+1} [Y_F^\infty] = \frac{1+s}{s} \frac{\phi}{1+\phi} [Y_O^\infty] \quad (7.25)$$

Le même raisonnement s'applique au scalaire passif $Z_T = Y_F + C_P T / \Delta H^0$ et permet de déterminer la température T :

$$Z_T = Y_F + \frac{C_P T}{\Delta H^0} = \frac{1}{\phi+1} \left[1 + \frac{C_P}{Y_F^\infty \Delta H^0} (T_F - T_0) \right] (\phi Z_F + Y_F^\infty) + \frac{C_P T_0}{\Delta H^0} \quad (7.26)$$

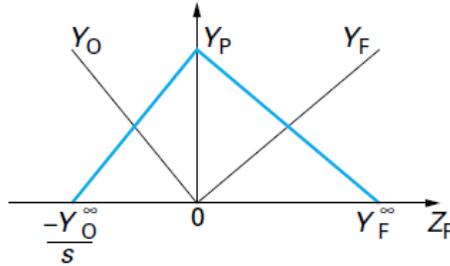


Fig.7-5 : Fractions massiques de combustible Y_F , d'oxydant Y_O et de produits de combustion Y_P en fonction du scalaire passif $Z_F = Y_F - Y_O/s$ pour une chimie infiniment rapide.

où ont été introduites les températures respectives T_F et T_0 , a priori différentes, des écoulements initiaux de combustible et d'oxydant. Il en résulte donc l'expression de la température T en fonction du scalaire passif Z_F :

$$T = \frac{1}{\phi+1} \frac{\Delta H^0}{C_P} \left[Y_F^\infty - \left(1 - \phi \frac{C_P (T_F - T_0)}{Y_F^\infty \Delta H^0} \right) Z_F \right] + T_0 + \frac{T_F - T_0}{\phi+1} \quad (7.27)$$

-côté oxydant ($Z_F \leq 0$) :

$$T = \frac{1}{\phi+1} \frac{\Delta H^0}{C_P} \left[1 + \frac{C_P (T_F - T_0)}{Y_F^\infty \Delta H^0} \right] (\phi Z_F + Y_F^\infty) + T_0 \quad (7.29)$$

La température maximale, T_{max} , atteinte sur la flamme ($Z_F = 0$) vaut donc :

$$T_{max} = \frac{1}{\phi+1} \frac{\Delta H^0}{C_P} Y_F^\infty + T_0 + \frac{T_F - T_0}{\phi+1} \quad (7.30)$$

Ces résultats sont résumés dans le tableau (7.1) et la figure (7.5). La description de la structure d'une flamme de diffusion laminaire se réduit donc, dans le cadre d'une chimie infiniment rapide, à la description du scalaire passif Z_F . La connaissance de Z_F permet alors la connaissance directe des fractions massiques Y_F , Y_O et Y_P ainsi que la température T . La fin du calcul ne nécessite donc plus que la résolution de l'équation (9.17).

Tableau 7-1 : Détermination de la température T et des fractions massiques de combustible Y_F , d'oxydant Y_O et de produits de combustion Y_P à partir du scalaire passif ($Z_F = Y_F - Y_O/s$) pour une chimie infiniment rapide.

	Z_F	Y_F	Y_O	Y_P	T
Combustible	$Z_F \geq 0$	Z_F	0	$\frac{1+s}{\phi+s} [Y_F^\infty - Z_F]$	$\frac{1}{\phi+1} \frac{\Delta H^0}{C_p} \left[Y_F^\infty - \left(1 - \phi \frac{C_p(T_F - T_0)}{Y_F^\infty \Delta H^0} \right) Z_F \right] + T_0 + \frac{T_F - T_0}{\phi+1}$
Oxydant	$Z_F \leq 0$	0	$-sZ_F$	$\frac{1+s}{s} \frac{\phi}{1+\phi} [sZ_F + Y_O^\infty]$	$\frac{1}{\phi+1} \frac{\Delta H^0}{C_p} \left[1 + \frac{C_p(T_F - T_0)}{Y_F^\infty \Delta H^0} \right] (\phi Z_F + Y_F^\infty) + T_0$

Remarque : dans le cas où les températures initiales des écoulements de combustible et d'oxydant sont identiques ($T_F = T_O = T_i$), les grandeurs $Y_P/(1+s)$ et $C_p (T - T_i)/\Delta H^0$ sont identiques.

En effet, elles ont la même équation de transport et les mêmes conditions aux limites, nulles en $Z_F = -Y_F^\infty/s_F$ et $Z_F = Y_F^\infty$. Ce résultat est la conséquence de l'hypothèse d'un milieu adiabatique et d'un nombre de Lewis unitaire (diffusivités moléculaire et thermique identiques). Il peut être démontré soit directement à partir des équations de transport, soit à partir des expressions établies ci-dessus, comme nous allons le faire ici. En effet, lorsque $T_F = T_O = T_i$:

- côté combustible, les équations (7.23) et (7.27) permettent d'écrire :

$$\frac{Y_P}{1+s} = \frac{1}{\phi+1} [Y_F^\infty - Z_F] = \left[\frac{C_p(T-T_i)}{\Delta H^0} \right] \quad (7.30)$$

- côté oxydant, les équations (7.24) et (7.28) permettent d'écrire :

$$\frac{Y_P}{1+s} = \frac{1}{\phi+1} [\phi Z_F - Y_F^\infty] = \left[\frac{C_p(T-T_i)}{\Delta H^0} \right] \quad (7.31)$$

7.2.2 Résolution de l'équation de Z_F

Avec les hypothèses précédentes (§ 7.1), le problème de Burke et Schumann se réduit à la résolution de l'équation du scalaire passif Z_F :

$$\rho u \frac{\partial Z_F}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial y} \left(\rho D \frac{\partial Z_F}{\partial y} \right) \quad (2.32)$$

Avec les conditions aux limites :

- en $x = 0$, $Z_F = Y_F^\infty$ pour $y \leq e_0$ (jet de combustible), $Z_F = -Y_O^\infty/s$ pour $y > e_0$ (jet d'oxydant) ;

- en $y = 0$, $\frac{\partial Z_F}{\partial y} = 0$ (condition de symétrie) ;

- en $y = +\infty$, $Z_F = -Y_O^\infty/s$ (jet d'oxydant).

Pour simplifier la résolution de l'équation (7.32), nous supposons que ρD est constant.

L'équation de Z_F devient alors :

$$\frac{\partial Z_F}{\partial x} = \alpha \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial Z_F}{\partial y} \right) \quad (7.33)$$

$$\alpha = \frac{\rho D}{\rho u} = \frac{D_F}{U_F} = \frac{D_O}{U_O} \quad (7.34)$$

où D_F et D_O désignent respectivement les coefficients de diffusion des écoulements de combustible et d'oxydant.

L'équation (7.33) est en fait l'équation de la chaleur, en régime permanent, dont la solution est classique :

$$\frac{Z_F + Y_O^\infty/s}{Y_F^\infty + Y_O^\infty/s} = \frac{1}{2\sqrt{\pi\alpha x}} \int_{-e_0}^{+e_0} \exp\left(-\frac{(y-y')^2}{4\alpha x}\right) dy' \quad (7.35)$$

qui, pour des valeurs de l'abscisse x grandes comparées à la demi-taille e_0 du jet de combustible, peut être approchée par :

$$\frac{Z_F + Y_O^\infty/s}{Y_F^\infty + Y_O^\infty/s} = \frac{e_0}{\sqrt{\pi\alpha x}} \exp\left(-\frac{y^2}{4\alpha x}\right) \quad (7.36)$$

Le problème est donc maintenant résolu et il est possible de tracer les profils radiaux et transversaux de Z_F , Y_F , Y_O , Y_P et T (Fig. 7-6). Nous pouvons aussi déterminer la longueur L_f de la flamme par le point d'intersection de l'isovaleur $Z_F = 0$ avec l'axe x ($Z(x = L_f, y = 0) = 0$) :

$$L_f = \frac{e_0^2 U_F}{\pi D_F} (\Phi + 1)^2 \quad (7.37)$$

et se réécrit, en introduisant le nombre de Reynolds $Re = 2e_0 U_F^0 / D_F$ du jet de combustible (remarquons que $Re = 2e_0 U_F^0 / \nu$ puisque, comme les nombres de Schmidt ont été supposés égaux à l'unité, coefficient de diffusion D_F et viscosité cinématique ν sont égaux) :

$$L_f = \frac{e_0 Re}{2\pi} (\Phi + 1)^2 \quad (7.38)$$

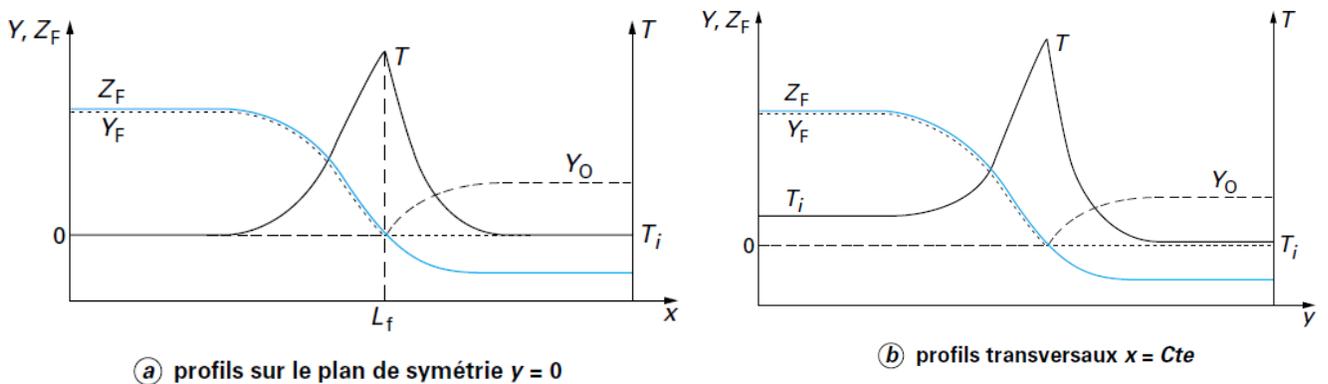


Fig. 7-6 : Profils du scalaire passif Z_F , des fractions massiques de combustible Y_F et d'oxydant Y_O et de température T dans la flamme de Burke et Schumann

La longueur L_f de la flamme varie donc linéairement avec la vitesse du combustible et avec le carré de la demi-taille du jet e_0 et est inversement proportionnelle au coefficient de diffusion D_F . L_f est aussi proportionnel au nombre de Reynolds Re du jet de combustible, du moins tant que l'écoulement reste laminaire, c'est-à-dire que Re reste inférieur à un nombre de Reynolds critique. L'expérience montre que, lorsque l'écoulement devient turbulent, la longueur de flamme ne dépend plus du nombre de Reynolds.

Remarque : tout le calcul précédent a été conduit pour un jet plan. La même analyse peut être faite avec un jet axisymétrique (« jet rond »). L'équation (7.33), en coordonnées cylindriques, s'intègre alors avec des fonctions de Bessel

7.3 Utilisation du scalaire passif Z

7.3.1 Définitions

En général, à la définition simple du scalaire passif de la relation (7.15), on préfère :

$$Z = \frac{1}{\phi+1} \left[\phi \frac{Y_F}{Y_F^\infty} - \frac{Y_O}{Y_O^\infty} + 1 \right] \quad (7.39)$$

où ϕ est le **rapport d'équivalence** de la réaction, défini par :

$$\phi = \frac{sY_F^\infty}{Y_O^\infty} \quad (7.40)$$

Il est facile de montrer que Z ainsi défini est également un scalaire passif (il s'agit, en fait, d'un adimensionnement du scalaire passif défini par la relation (7.15) qui vérifie l'équation de convection-diffusion, sans terme source) :

$$\frac{\partial \rho Z}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} Z) = \nabla \cdot (\rho D \nabla Z) \quad (7.41)$$

Le scalaire passif Z, appelé aussi fraction de mélange, a les propriétés intéressantes suivantes :

- $Z = 1$ dans l'écoulement de combustible pur ;
- $Z = 0$ dans l'écoulement d'oxydant pur ;
- dans l'hypothèse d'une chimie infiniment rapide, la flamme se situe sur l'iso-surface $Z = Z_{st}$ telle que $Y_F = Y_O = 0$:

$$Z_{st} = \frac{1}{\phi+1} \quad (7.42)$$

qui correspond à la valeur de Z obtenue quand les réactifs F et O sont en proportions stœchiométriques ;



- en l'absence de réaction chimique, Z caractérise le mélange du combustible et de l'oxydant justifiant ainsi son appellation de fraction de mélange. Tous les calculs du § 7.2 peuvent être refaits avec ces nouvelles définitions. À titre d'exemple, le tableau (7.2) explicite les relations liant les fractions massiques Y_F , Y_O à la fraction de mélange Z . Il reprend, avec la nouvelle définition de Z , les résultats du tableau (7.1).

Remarques

1. La définition du scalaire passif Z n'utilise pas l'existence d'une flamme de diffusion. Elle reste donc valable en prémélange où cette notion n'a toutefois aucun intérêt puisque Z est alors constant dans tout le champ. Par ailleurs, Z peut être utilisé pour décrire le mélange entre deux constituants inertes (mélange pur) ou deux réactifs dans le cas de situations partiellement prémélangées.

2. La définition de Z repose ici sur une chimie simple à une étape avec des coefficients de diffusion identiques pour les deux espèces, combustible et oxydant, considérées. Cette notion de scalaire passif est toutefois généralisable, sous certaines conditions, à des situations plus complexes, par exemple en utilisant la conservation des atomes.

3. Le rapport d'équivalence Φ ne doit pas être confondu avec la richesse introduite en prémélange, malgré l'ambiguïté du terme anglais « equivalence ratio » utilisé pour désigner les deux notions. Φ ne dépend que de la nature des réactifs initiaux et de leur éventuelle dilution (tableau 7-3) mais pas des conditions opératoires, notamment des débits relatifs des écoulements. Ainsi, le rapport d'équivalence pour la combustion d'hydrogène pur dans de l'oxygène pur est toujours $\phi = 8$. Le rapport d'équivalence correspond en fait à la richesse qu'aurait un prémélange réalisé avec la **même masse** de combustible et d'oxydant. Cette notion n'est donc pas équivalente à celle d'excès d'air, utilisée par les industriels, qui compare le débit d'air injecté à celui nécessaire pour une combustion stœchiométrique.

7.3.2 Description de la flamme en terme du scalaire passif Z

Nous avons vu précédemment que, dans le cas d'une cinétique chimique infiniment rapide, la flamme de diffusion pouvait être décrite à l'aide du scalaire passif Z et qu'elle correspondait à l'isosurface $Z = Z_{st}$. Nous allons essayer de préciser ces notions. Pour cela, récrivons l'équation de transport du combustible (1) dans un nouveau repère lié aux isosurfaces Z (direction normale à l'isosurface Z locale et deux directions orthogonales dans le plan tangent à l'isosurface Z). Les

coordonnées (t, x_1, x_2, x_3) sont alors remplacées par les coordonnées (t, Z, y_1, y_2) . Ces nouvelles coordonnées sont connues sous le nom de variables de Crocco. L'équation (7.1) peut être entièrement réécrite dans le nouveau repère [24]. Pour alléger le calcul, nous supposons que seuls les gradients perpendiculaires aux iso-surfaces $Z = \text{cste}$ sont importants (on ne conservera donc que les gradients $\partial/\partial Z$). Le changement de variables s'écrit : $\frac{\partial}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\partial Z}{\partial t} \frac{\partial}{\partial Z}$, $\nabla = \nabla Z \frac{\partial}{\partial Z}$

L'équation (1) devient alors :

$$\rho \frac{\partial Y_F}{\partial t} + \rho \frac{\partial Z \partial Y_F}{\partial t \partial Z} + \rho \mathbf{u} \nabla Z \frac{\partial Y_F}{\partial Z} = \nabla \cdot (\rho D \nabla Z) \frac{\partial Y_F}{\partial Z} + \rho D (\nabla Z)^2 \frac{\partial^2 Y_F}{\partial Z^2} + \dot{\omega}_F \quad (7.43)$$

qui se simplifie, en utilisant l'équation de Z (équation (7.41)) et l'équation de continuité (équation (7.6)) pour devenir :

$$\rho \frac{\partial Y_F}{\partial t} = \rho D (\nabla Z)^2 \frac{\partial^2 Y_F}{\partial Z^2} + \dot{\omega}_F \quad (7.44)$$

où apparaît une quantité très importante dans l'étude des flammes de diffusion : la dissipation scalaire χ :

$$\chi = 2D |\nabla Z|^2 = 2D \left(\frac{\partial Z}{\partial x_i} \right)^2 \quad (7.45)$$

Remarque: cette définition varie selon les auteurs. En effet, la masse volumique ρ peut y être incorporée ($\chi = 2\rho D |\nabla Z|^2$), ou, au contraire, le coefficient 2 supprimé ($\chi = D |\nabla Z|^2$).

L'équation (44) se réécrit alors :

$$\rho \frac{\partial Y_F}{\partial t} = \rho \frac{\chi}{2} \frac{\partial^2 Y_F}{\partial Z^2} + \dot{\omega}_F \quad (7.46)$$

Tableau 7-2 : Détermination des fractions massiques de combustible Y_F , d'oxydant Y_O et de produits Y_P à partir du scalaire passif Z pour une chimie infiniment rapide

	Z	Y_F	Y_O	Y_P
Combustible	$Z \geq Z_{st}$	$Y_F \frac{Z(\emptyset + 1) - 1}{\emptyset}$	0	$(1 + s) \left[\frac{Y_F^\infty (1 - Z)}{\emptyset} \right]$
Oxydant	$Z \leq Z_{st}$	0	$Y_O^\infty [1 - Z(\emptyset + 1)]$	$(1 + s) Z Y_F^\infty$

Z varie de 0 dans l'écoulement de comburant à 1 dans celui de combustible. \emptyset est le rapport d'équivalence de la réaction chimique et $Z_{st} = 1/(\emptyset + 1)$ désigne la valeur stœchiométrique du scalaire passif Z.

Tableau 7-3 : Quelques valeurs du rapport d'équivalence pour la combustion d'un combustible pur ($Y_F^\infty = 1$) dans l'air ($Y_O^\infty = 0,23$) ou dans l'oxygène pur ($Y_O^\infty = 1,0$)

\emptyset	Hydrogène H_2	Méthane CH_4	Propane C_3H_8
Air	34.8	17.4	15.8
Oxygène pur	8.0	4.0	3.6

Dans le cadre de nos hypothèses (seuls les gradients perpendiculaires aux surfaces iso-Z sont importants), la fraction massique de combustible Y_F (ainsi que les fractions massiques d'oxydant Y_O , de produits Y_P et la température) peut être directement déterminée en fonction de Z à partir de l'équation (7.44). Si le champ de scalaire passif Z est connu, tous les autres champs peuvent alors être calculés. Dans le cas général, les fractions massiques de combustible, d'oxydant et de température dépendent donc de Z , de c , la dissipation scalaire de Z , et du temps t (équation (7.44)). Signalons toutefois deux cas particuliers : celui du mélange pur et celui de la chimie infiniment rapide.

7.3.2.1 Mélange pur

Il s'agit ici du mélange de deux constituants inertes F et O. En régime stationnaire, l'équation (7.44) se réduit immédiatement à :

$$\frac{\partial^2 Y_f}{\partial Z^2} = 0 \quad (7.47)$$

Les fractions massiques sont alors des fonctions linéaires de Z . Les conditions aux limites :

- en $Z = 0$: $Y_O = Y_O^\infty$ et $Y_F = 0$;
- en $Z = 1$: $Y_F = Y_F^\infty$ et $Y_O = 0$

conduisent immédiatement à la solution (Fig. 7-7) :

$$Y_F = Y_F^\infty Z ; Y_O = Y_O^\infty (1 - Z) \quad (1.48)$$

Le scalaire passif Z caractérise bien le mélange des deux réactifs. En outre, ceux-ci sont en proportion stœchiométrique lorsque $sY_F = Y_O$, ce qui correspond à $Z = Z_{st}$. La richesse locale φ du mélange constitué est donnée par :

$$\varphi = \frac{sY_F}{Y_O} = \frac{sY_F^\infty Z}{Y_O^\infty (1-Z)} = \emptyset \frac{Z}{(1-Z)} \quad (1.49)$$

et dépend donc du rapport d'équivalence \emptyset et de la fraction de mélange Z .

7.3.2.2 Chimie infiniment rapide

Le taux de réaction est nul en dehors de l'isosurface $Z = Z_{st}$. En régime permanent, l'équation (7.44) donne également une solution linéaire en Z . Les conditions aux limites sont toutefois différentes des précédentes :

- en $Z = 0$: $Y_O = Y_O^\infty$ et $Y_F = 0$;
- en $Z = Z_{st}$: $Y_O = Y_F^\infty$; $Y_F = 0$;



- en $Z = 1$: $Y_F = Y_F^\infty$ et $Y_O = 0$.

On retrouve alors la solution de Burke et Schumann (tableau 7-2), représentée sur la figure (7-7).

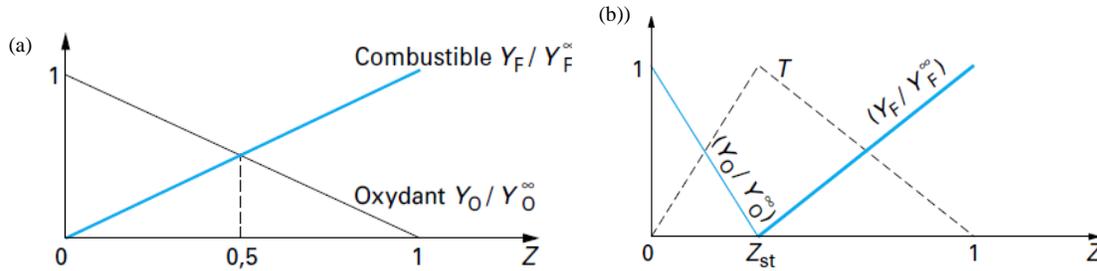


Fig. 7-7 : Fractions massiques réduites de combustible Y_F/Y_F^∞ et d'oxydant Y_O/Y_O^∞ et de température en fonction du (a) scalaire passif Z dans le cas d'un mélange inerte (b) du scalaire passif Z dans le cas d'une cinétique chimique infiniment rapide (solution de Burke et Schumann).

7.3.2.3 Cas général

Dans le cas général, la solution de l'équation (7.44) dépend non seulement de Z mais aussi de la dissipation scalaire χ et du temps t . En pratique, on observe des écarts à la solution de Burke et Schumann, comme le montre la figure (7.8). Signalons aussi qu'une dissipation scalaire excessive χ peut conduire à l'extinction de la flamme (voir § 7.4.2.3).

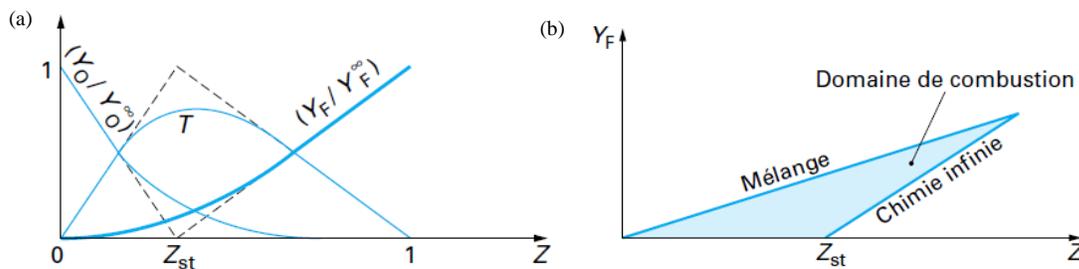


Fig.7.8 – (a) Fractions massiques réduites de combustibles Y_F/Y_F^∞ d'oxydant Y_O/Y_O^∞ et température en fonction du scalaire passif Z . Allure de la solution dans le cas général (écart à la solution de Burke et Schumann). (b) Domaine d'évolution de la fraction massique de combustible Y_F en fonction de la fraction de mélange Z

7.3.3 Remarques

7.3.3.1 Domaine de combustion

Les deux cas limites mélange pur (rien ne brûle, § 7.4.2.1) et chimie infiniment rapide (tout ce qui peut brûler brûle, § 7.4.2.2) sont très intéressants car ils déterminent, relativement à la fraction de mélange Z , le domaine dans lequel peuvent évoluer les fractions massiques. La figure (7.8b) présente le domaine d'évolution de la fraction massique Y_F . Les courbes $Y_F(Z)$ qui décrivent la combustion sont situées dans ce domaine et sont souvent appelées trajectoires dans l'espace des phases. Leur détermination permet de décrire la flamme et est à la base de modèles pour la combustion turbulente non prémélangée [25].

7.3.3.2 Vitesse de réaction - extinction

La relation (7.44) a une autre conséquence importante. En effet, lorsqu'une situation stationnaire est atteinte, la vitesse de réaction apparaît être le produit de deux contributions, l'une correspondant au mélange (dissipation scalaire de Z), l'autre dépendant de la structure de la flamme :

$$\dot{\omega} = \underbrace{-\rho D(\nabla Z)^2}_{\text{méla}} \underbrace{\frac{\partial^2 Y_F}{\partial Z^2}}_{\text{chimi}} = \rho \frac{\chi}{2} \frac{\partial^2 Y_F}{\partial Z^2} \quad (7.50)$$

Plus le mélange est important, plus la vitesse de réaction est donc importante. Néanmoins, ce phénomène a une limite. L'épaisseur l_d de la zone de diffusion peut être estimée à partir du gradient de la variable de mélange Z :

$$l_d \approx \frac{1}{|\nabla Z|} \approx \sqrt{\frac{2D}{\chi}} \quad (7.51)$$

Plus le mélange augmente (plus la dissipation scalaire χ augmente), plus le taux de réaction augmente mais plus l'épaisseur l_d de la couche diffusive diminue. Au-delà d'une certaine dissipation scalaire χ_{ext} , le flux thermique qui quitte la zone de réaction, d'autant plus important que l'épaisseur l_d est faible, n'est plus compensé par le dégagement de chaleur et la flamme s'éteint (voir § 7.4.2.3). Ce mécanisme est facile à observer : pour entretenir un feu de bois, il est possible de souffler dessus, mais pas trop...

7.33.3 Vers la modélisation de la combustion turbulente

La plupart des modèles développés pour décrire la combustion turbulente non prémélangée sont basés sur la notion de « flammelettes ». La flamme turbulente est analysée comme une collection d'éléments de flamme laminaire, les « flammelettes », convectés et modifiés, en particulier étirés, par l'écoulement turbulent. Cette vision conduit immédiatement à deux types de modèles pour exprimer la vitesse de consommation moyenne de combustible, qui intervient dans les équations moyennées de la combustion turbulente [25].

Si la réaction chimique est infiniment rapide, comparativement aux temps caractéristiques du transport turbulent, et donc a fortiori de la diffusion moléculaire, nous avons vu que la flamme correspondait à l'interface $Z = Z_{st}$. Si Σ désigne la densité de surface de cette iso-surface $Z = Z_{st}$ (soit la quantité de surface disponible par unité de volume), la vitesse de réaction peut s'écrire :

$$\overline{\dot{\omega}_F} = V_F \Sigma \quad (7.52)$$

où V_F désigne la vitesse de réaction du combustible F par unité de surface de flamme. Cette formulation a l'avantage de découpler l'aspect purement chimique de la réaction, incorporé dans V_F , de la description du plissement du front de flamme par la turbulence décrit par Σ . Il reste alors à déterminer V_F et Σ . Si la densité de surface de flamme Σ est généralement décrite par une expression algébrique ou une équation de transport, cette description dépasse largement le cadre de notre étude. En revanche, l'expression du taux de réaction par unité de surface V_F provient, par hypothèse, de l'analyse des flammes laminaires de diffusion. En général, il est déduit de l'étude des flammes laminaires étirées (voir § 7.4).

Puisque la fraction massique de combustible d'une flamme laminaire ne dépend, en régime stationnaire, que de la fraction de mélange Z et de sa dissipation scalaire χ (équation (7.44)), la fraction massique moyenne du combustible F peut simplement s'écrire par une analyse statistique:

$$\bar{\rho} \tilde{Y}_F = \overline{\rho Y_F} = \int_Z \int_\chi \rho Y_F(Z, \chi) P(Z, \chi) d\chi dZ \quad (7.53)$$

où désigne $\bar{\rho}$ la moyenne de la quantité ρ , \tilde{Y} la moyenne de Favre (pondérée par la masse) de cette quantité et $P(Z, \chi)$ la fonction densité de probabilité jointe de la fraction de mélange Z et de sa dissipation scalaire χ . Si $Y_F(Z, \chi)$ est directement solution de l'équation (7.44), la description de la combustion turbulente réclame la connaissance de la fonction densité de probabilité $P(Z, \chi)$. Sans entrer dans des détails qui dépassent le cadre de cette étude, signalons

que cette fonction densité de probabilité peut être soit présumée (c'est-à-dire avoir une forme fixée a priori qui peut dépendre de grandeurs solutions des équations résolues), soit être solution d'une équation de transport.

7.3.3.4 Généralisation de l'équation (7.44)

Lors de l'établissement de l'équation de transport de la fraction massique Y_F dans l'espace de la fraction de mélange Z (équation (7.44)), nous nous sommes volontairement restreints aux gradients perpendiculaires aux surfaces iso- Z . Il est toutefois possible d'écrire une équation plus générale [24], en se plaçant dans le repère où Z est l'une des coordonnées, les deux autres, x et y , mesurant les distances le long de surfaces où Z est constant. Soient u et v les vitesses dans les directions x et y , relatives à ce nouveau repère. On peut montrer que l'équation de transport de la fraction massique de combustible Y_F (équation (7.1)) devient, dans ce repère :

$$\rho \frac{\partial Y_F}{\partial t} + \rho \mathbf{V}_\perp \nabla_\perp Y_F = \rho D |\nabla Z|^2 \frac{\partial^2 Y_F}{\partial Z^2} + \dot{\omega}_F + \nabla_\perp \cdot (\rho D \mathbf{V}_\perp Y_F) - \rho D \nabla_\perp (\ln |\nabla Z|) \cdot \nabla_\perp Y_F \quad (7.54)$$

où \mathbf{V}_\perp est le vecteur bidimensionnel de composantes (u, v) dans le plan (x, y) et ∇_\perp l'opérateur gradient bidimensionnel dans ce même plan (x, y) . Le premier terme du membre de gauche et les deux premiers termes du membre de droite constituent l'équation (7.44). Les autres termes concernent des gradients le long des surfaces iso- Z que nous avons négligés précédemment. Si l'équation (7.54) est, a priori, plus satisfaisante pour l'esprit puisqu'elle n'introduit pas d'autres hypothèses que l'existence d'un scalaire passif Z , elle n'est néanmoins pas utilisée en pratique. En effet, toutes les études de flamme laminaire de diffusion se contentent de l'équation (7.44) et se restreignent le plus souvent au régime stationnaire ($\frac{\partial}{\partial t} = 0$).

7.4. Flammes de diffusion laminaires étirées

7.4.1 Introduction

Les flammes laminaires étirées, tant de prémélange que de diffusion, ont fait et font toujours l'objet de nombreuses études aussi bien théoriques qu'expérimentales. La configuration la plus simple pour une flamme de diffusion est celle de la flamme à contrecourant (Fig. 7-9). Un jet de combustible et un jet de comburant de directions opposées forment un écoulement avec un point de stagnation ($x = y = 0$). Le front de flamme est alors **étiré** dans son propre plan, voisin du plan $y = 0$. L'intérêt de ces flammes étirées est double.

Il s'agit d'une des configurations les plus simples. En première approximation, ces flammes peuvent être supposées monodimensionnelles et ne dépendent que d'une seule coordonnée spatiale. Elles ont aussi l'avantage d'être stationnaires, ce qui facilite considérablement toute étude expérimentale. Ainsi, elles se prêtent particulièrement bien aux confrontations théories/expériences et permettent l'analyse aisée de nombreux phénomènes dont, notamment, l'influence de schémas cinétiques chimiques détaillés.

Elles constituent l'ingrédient de base de nombre de modèles proposés pour décrire la combustion turbulente. En effet, sous l'hypothèse dite de « flammelettes », nous avons vu (§ 7.3.3.3) que les flammes turbulentes peuvent être analysées comme constituées d'éléments de flamme laminaire étirée. Ainsi, le taux de réaction de combustible VF par unité de surface de flamme est, le plus souvent, exprimé comme celui d'une flamme laminaire étirée.

7.4.2 Flamme de diffusion étirée stationnaire à contre-courant

7.4.2.1 Solution analytique

Pour simplifier l'analyse, nous supposons la masse volumique ρ constante. Cette hypothèse forte, dite thermodiffusive, offre l'avantage de découpler le champ de vitesse de celui des constituants chimiques (fractions massiques, vitesse de réaction) puisque, faute de dilatation thermique, il n'y a pas rétroaction de la combustion sur la structure de l'écoulement.

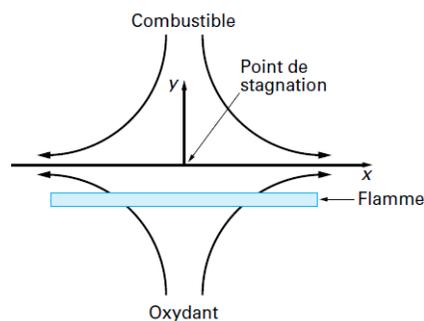


Fig. 7-9 : Flamme plane de diffusion laminaire étirée à contre-courant[5].

Remarque : cette hypothèse est clairement fautive pour la plupart des flammes d'intérêt pratique, mais elle permet d'obtenir des solutions analytiques simples et mettre en évidence un certain nombre de phénomènes. Il est possible de reprendre cette analyse avec une masse volumique ρ variable et d'obtenir des expressions similaires, en incorporant les variations de masse volumique dans les coordonnées

spatiales (transformation de Howarth-Dorodnitsyn). La variable y , coordonnée normale à la flamme, est alors remplacée par :

$$y' = \frac{1}{\rho_0} \int_0^y \rho d\xi$$

où ρ_0 est une masse volumique de référence. Moyennant cette transformation, les équations deviennent formellement identiques à celles obtenues pour une masse volumique constante.

Soit y l'axe vertical qui correspond à l'axe des deux jets et x la direction transversale (Fig. 7.9). L'origine des axes est choisie au point de stagnation ($\mathbf{u} = 0$). Le problème est supposé ici bidimensionnel plan et stationnaire. L'équation de continuité (ou de conservation de la masse) s'écrit :

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \quad (7.55)$$

où u et v désignent respectivement les composantes du vecteur vitesse \mathbf{u} dans les directions x et y .

Soit ε_s l'étirement, supposé constant :

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \varepsilon_s; \quad \frac{\partial v}{\partial y} = -\varepsilon_s \quad (7.56)$$

L'équation de transport du scalaire passif, ou fraction de mélange, Z s'écrit :

$$\frac{\partial Z}{\partial t} + u \frac{\partial Z}{\partial x} + v \frac{\partial Z}{\partial y} = \frac{1}{\rho} \nabla \cdot [\rho D \nabla Z] \quad (7.58)$$

En supposant que le problème est stationnaire et monodimensionnel (Z ne dépend que de la coordonnée y) et en ajoutant, pour simplifier, l'hypothèse d'un coefficient de diffusion D constant, l'équation (7.58) se réduit à :

$$-\varepsilon_s y \frac{\partial Z}{\partial y} = D \frac{\partial^2 Z}{\partial y^2} \quad (7.59)$$

avec les conditions aux limites :

- $Z(+\infty) = 1$ (jet de combustible)
- $Z(-\infty) = 0$ (jet d'oxydant)

La solution de l'équation (7.59) est immédiate :

$$Z = \frac{1}{2} \left[\operatorname{erf} \left(\sqrt{\frac{\varepsilon_s}{2D}} y \right) + 1 \right] \quad (7.60)$$

où erf est la fonction d'erreur exponentielle, définie par :

$$\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\pi} \int_0^x e^{-\eta^2} d\eta \quad (7.61)$$

Puisque la flamme se situe à l'interface $Z = Z_{st}$ (voir relation (7.42)), sa position y_f est obtenue à partir de l'équation (7.60) :

$$y_f = \sqrt{\frac{2D}{\varepsilon_s}} \operatorname{erf}^{-1} \left(\frac{1-\phi}{1+\phi} \right) = \sqrt{\frac{2D}{\varepsilon_s}} w \quad (7.62)$$

en introduisant :

$$w = \operatorname{erf}^{-1} \left(\frac{1-\phi}{1+\phi} \right) \quad (7.63)$$

Cette relation permet de préciser la position de la flamme relativement au plan $y = 0$ qui contient le point d'arrêt ($x = y = 0$) de l'écoulement :

- si $\phi = 1$ (réactifs en proportion stœchiométrique), la flamme correspond au plan d'arrêt $y = 0$;
- si $\phi \geq 1$ (combustible en excès), la flamme se situe du côté de l'oxydant ($y_f \leq 0$) ;
- si $\phi \leq 1$ (oxydant en excès), la flamme est du côté du combustible ($y_f \geq 0$).

La flamme se situe donc du côté du réactif en défaut. Compte tenu des valeurs pratiques du rapport d'équivalence ϕ , voir tableau (7-3), la flamme est généralement du côté de l'écoulement d'oxydant, au moins pour les combustibles non dilués. Par ailleurs, la flamme se rapproche du point d'arrêt lorsque le taux d'étirement ε_s augmente.

Dans le cas d'une chimie infiniment rapide, les profils des fractions massiques de combustible Y_F , de comburant, Y_O et de produits Y_P se déduisent immédiatement du tableau (7.2) et de la solution (7.60) :

- pour $y \geq y_f$ (côté combustible) :

$$Y_F = Y_F^\infty \frac{\operatorname{erf} \left(\sqrt{\frac{\varepsilon_s}{2D}} y \right) - \operatorname{erf} \left(\sqrt{\frac{\varepsilon_s}{2D}} y_f \right)}{1 - \operatorname{erf} \left(\sqrt{\frac{\varepsilon_s}{2D}} y_f \right)} \quad (7.64)$$

$$Y_O = 0 \quad (7.65)$$

$$Y_P = Y_F^\infty \frac{s+1}{2\phi} \left[1 - \operatorname{erf} \left(\sqrt{\frac{\varepsilon_s}{2D}} y \right) \right] \quad (7.66)$$

- pour $y \leq y_f$ (côté oxydant)

$$Y_F = 0 \quad (7.67)$$

$$Y_O = Y_O^\infty \frac{\operatorname{erf} \left(\sqrt{\frac{\varepsilon_s}{2D}} y_f \right) - \operatorname{erf} \left(\sqrt{\frac{\varepsilon_s}{2D}} y \right)}{1 + \operatorname{erf} \left(\sqrt{\frac{\varepsilon_s}{2D}} y_f \right)} \quad (7.68)$$

$$Y_P = Y_F^\infty \frac{s+1}{2} \left[1 + \operatorname{erf} \left(\sqrt{\frac{\varepsilon_s}{2D}} y \right) \right] \quad (7.69)$$

Tous ces profils sont représentés sur la figure (7.10).

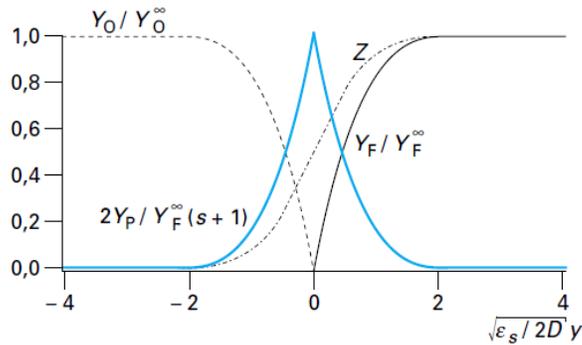


Fig. 7-10 : Profils de la fraction de mélange Z et des fractions massiques réduites de combustible Y_F/Y_F^∞ , d'oxydant $Y_O = Y_O^\infty$ et de produits $2Y_P/Y_F^\infty (s + 1)$ dans une flamme plane de diffusion laminaire à contre-courant (étirement constant ε_s) tracés en fonction de la coordonnée spatiale adimensionnée $\sqrt{\varepsilon_s/2D} y$

La vitesse de réaction correspond, en chimie infiniment rapide, à l'apport des réactifs par diffusion moléculaire à la flamme. La vitesse de consommation massique de combustible par unité de surface de flamme, V_F est donc donnée par :

$$V_F = -\rho D \left[\frac{\partial Y_F}{\partial y} \right]_{y=y_f} = +\frac{1}{s} \rho D \left[\frac{\partial Y_O}{\partial y} \right]_{y=y_f} \quad (7.70)$$

ce qui conduit à :

$$V_F = -\rho Y_F^\infty \frac{\phi + 1}{\phi} \left[\sqrt{\frac{D\varepsilon_s}{2\pi}} e^{-w^2} \right]$$

où w est défini par la relation (7.63). En raison de nos conventions de signe (équation (7.1)), V_F est logiquement négatif puisqu'il correspond à une consommation de réactifs. La vitesse de consommation massique d'oxydant, V_O est donnée par :

$$V_O = \rho D \left[\frac{\partial Y_O}{\partial y} \right]_{y=y_f} = -\rho Y_O^\infty (\phi + 1) \left[\sqrt{\frac{D\varepsilon_s}{2\pi}} e^{-w^2} \right] \quad (7.72)$$

qui vérifie bien la relation stœchiométrique attendue (équation (7.4))

$$V_O = \phi \frac{Y_O^\infty}{Y_F^\infty} V_F = s V_F \quad (7.73)$$

7.42.2 Relation entre taux d'étirement ε_s et dissipation scalaire χ

Au paragraphe précédent, la structure de la flamme étirée a été décrite en terme de taux d'étirement ε_s (relations (7.60) à (7.73)); Pourtant, d'après l'équation (7.44), cette structure est fonction de la dissipation scalaire χ . Il est donc intéressant de préciser la relation entre ces deux notions. Pour une flamme laminaire étirée à contrecourant, le scalaire passif Z ne dépend que des gradients le long de la direction y :



$$\chi = 2D \left(\frac{\partial Z}{\partial y} \right)^2 \quad (7.74)$$

d'où, d'après l'équation (7.60) :

$$\chi = \frac{\varepsilon_s}{\pi} \exp\left(-\frac{\varepsilon_s}{D} y^2\right) \quad (7.75)$$

La dissipation scalaire χ_f au front de flamme ($y = y_f$) vaut donc, d'après l'équation (7.62) :

$$\chi_f = \frac{\varepsilon_s}{\pi} \exp(-2w^2) \quad (7.76)$$

Le taux de réaction V_F du combustible F et V_O de l'oxydant O s'exprime alors directement en fonction de χ_f :

$$V_O = -\rho Y_F^\infty \left(\frac{\phi+1}{\phi} \right) \sqrt{\frac{D\chi_f}{2}} \quad (7.77)$$

$$V_O = -\rho Y_O^\infty (\phi + 1) \sqrt{\frac{D\chi_f}{2}} \quad (7.78)$$

Ces relations sont très importantes et montrent que les notions d'étirement et de dissipation scalaire sont intimement liées. Dans le cas d'une flamme laminaire étirée stationnaire à contre-courant, étudié ici, la dissipation scalaire au front de flamme, χ_f , est directement proportionnelle à l'étirement ε_s (relation (7.76)). Remarquons toutefois que dans cette situation, l'étirement ε_s est constant dans tout le champ, tandis que la dissipation scalaire dépend de la coordonnée spatiale y (équation (7.75)).

La structure locale d'une flamme de diffusion peut donc être déterminée soit en terme de taux d'étirement ε_s , soit en terme de dissipation scalaire au front de flamme χ_f . Ainsi, il est possible de remplacer la dissipation scalaire χ par le taux d'étirement ε_s dans l'expression (7.53) et exprimer Y_F en fonction de Z et de ε_s . La principale différence entre ε_s et χ réside dans le fait que l'étirement ne dépend que de l'écoulement puisqu'il n'est fonction que des gradients de vitesse, tandis que la dissipation scalaire incorpore des notions relatives aux réactifs chimiques (intervention du rapport d'équivalence ϕ , via w , dans l'expression (7.76)). Moins intuitive que la notion d'étirement, la dissipation scalaire est finalement plus riche. En effet, si l'on cherche, par exemple à déterminer la structure d'une flamme étirée à contre-courant non infiniment mince (chimie à vitesse finie), la résolution des équations du (§ 7.4.2.1) impose de se fixer les valeurs du scalaire passif Z (le plus souvent $Z = 0$ ou $Z = 1$) à une certaine distance y_{lim} (éventuellement infinie) de la flamme, pour accéder à la solution $Y_F(Z, \varepsilon_s)$. En revanche, les conditions aux limites de l'équation (7.44), pour déterminer $Y_F(Z, \chi)$, sont, par définition même du scalaire passif Z , toujours $Y_F = 0$ pour $Z = 0$ et $Y_F = Y_F^\infty$ pour $Z = 1$. La résolution dans l'espace des phases (coordonnée Z) sera donc plus adaptée à la prise en compte d'effets de dilution par les gaz brûlés ou de prémélange

partiel, susceptibles de modifier sensiblement les conditions aux limites de Z dans l'espace physique (coordonnée y).

7.4.2.3 Influence du taux d'étirement sur la vitesse de réaction

La vitesse de réaction V_F croît avec la racine carrée du taux d'étirement ε_s (équation (7.71)) ou de la dissipation scalaire χ_f au front de flamme (équation (7.77)). En fait, plus le taux d'étirement augmente, plus l'apport des réactifs à la zone de flamme est important et donc plus la réaction est intense puisque, dans la limite d'une chimie infiniment rapide, tout le combustible au contact de l'oxydant brûle immédiatement. En pratique, la réaction chimique a une vitesse limite et il existe alors une valeur critique du taux d'étirement, ε_s^{ext} (ou de la dissipation scalaire, χ_f^{ext}), au-delà de laquelle la flamme s'éteint. En fait, si l'apport des réactifs augmente avec ε_s , la réaction chimique n'est plus assez rapide pour brûler les réactifs disponibles et le refroidissement de la zone de réaction, dû à la vitesse croissante de l'écoulement conduit à l'extinction.

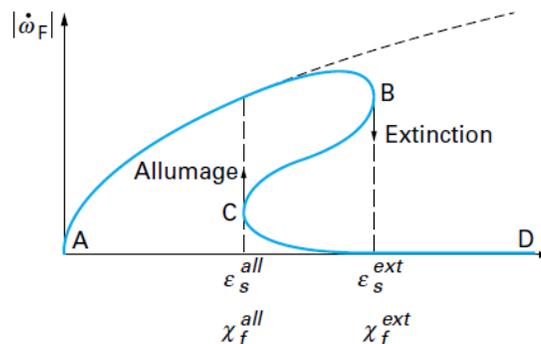


Fig.7-11 : Valeur absolue du taux de réaction d'une flamme laminaire étirée à contre-courant en fonction de l'étirement ε_s ou de la dissipation scalaire au front de flamme χ_f

Remarque : La solution correspondant à une cinétique chimique infiniment rapide est tracée en tireté. La branche BC de la courbe en S est instable et les valeurs ε_s^{ext} , χ_f^{ext} , ε_s^{all} et χ_f^{all} correspondent respectivement aux valeurs critiques d'extinction et d'allumage de l'étirement et de la dissipation scalaire. Un phénomène d'hystérésis apparaît : si la flamme s'éteint pour un étirement supérieur ε_s à ε_s^{ext} , le réallumage n'est possible qu'en deçà de la valeur ε_s^{all} de l'étirement.

On observe alors que la vitesse de réaction du combustible suit, en fonction du taux d'étirement ε_s ou de la dissipation scalaire χ_f , une « courbe en S » caractéristique, présentée sur la figure (7.11). Au delà des valeurs ε_s^{ext} ou χ_f^{ext} (point B), la flamme s'éteint. En revanche, partant de valeurs supérieures aux conditions d'extinction pour la dissipation scalaire ou l'étirement (flamme éteinte), il faut revenir en deçà

des valeurs ε_s^{all} ou χ_f^{all} (point C) pour pouvoir rallumer la flamme. La branche BC de la courbe est instable. Les valeurs typiques des taux d'étirements d'extinction sont, pour les combustibles les plus courants (hydrogène, méthane, propane, ...) dans les conditions normales, de l'ordre de quelques dizaines à quelques centaines de s^{-1} . Bien évidemment, plus la cinétique chimique est lente, plus les valeurs des taux d'étirement et de dissipation scalaire d'extinction sont basses.

7.4.3 Flamme de diffusion étirée instationnaire

Au paragraphe précédent (§7.5.2), nous avons décrit la structure d'une flamme étirée à contre-courant stationnaire. L'objectif est maintenant d'analyser la réponse instationnaire d'une telle flamme à une perturbation de l'écoulement. Considérons une flamme stationnaire soumise à un taux d'étirement constant ε_s^0 . À l'instant $t = 0$, l'étirement passe brutalement à la valeur ε_s , comme le montre la figure (7.12). Pour simplifier, nous supposons le nouveau champ de vitesse stationnaire dès l'instant $t = 0$.

L'équation (58) devient ici :

$$\frac{\partial Z}{\partial t} - \varepsilon_s y \frac{\partial Z}{\partial y} = D \frac{\partial^2 Z}{\partial y^2} \quad (7.79)$$

avec toujours les conditions aux limites :

- $Z(+\infty) = 1$ (jet de combustible)
- $Z(-\infty) = 0$ (jet d'oxydant)

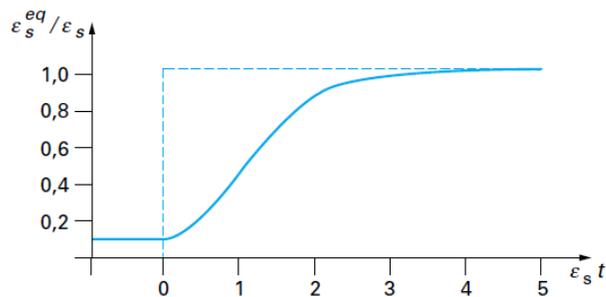


Fig.7-12 : Réponse d'une flamme de diffusion laminaire étirée à contre-courant à une perturbation instantanée de l'étirement

Remarque : À l'instant $t = 0$ l'étirement subi par la flamme (courbe en tireté) passe brutalement de la valeur ε_s^0 à ε_s la valeur tandis que la réponse de la flamme (courbe en continu) est représentée en terme d'étirement équivalent.

Puisque la solution stationnaire (pour $t \leq 0$ ou $t \rightarrow -\infty$) de cette équation est connue [équation (7.60)], cherchons les solutions instationnaires sous la forme :

$$Z = \frac{1}{2} \left[\operatorname{erf} \left(\sqrt{\frac{\varepsilon_s}{2D}} f(t) y \right) + 1 \right]$$

où $f(t)$ est une fonction du temps t dont les conditions aux limites sont, d'après l'équation (7.60) :

- pour $t \leq 0, f(t) = \sqrt{\varepsilon_s^0 / \varepsilon_s}$,

- pour $t \rightarrow -\infty, f(t) = 1$.

Reporter la solution (7.80) dans l'équation (7.79) conduit à l'équation pour f :

$$\frac{\partial f}{\partial t} - \varepsilon_s f + \varepsilon_s f^3 \quad (7.81)$$

qui s'intègre, après multiplication de chaque terme par f en :

$$f(t) = \sqrt{\frac{\varepsilon_s^0 e^{2\varepsilon_s t}}{\varepsilon_s + \varepsilon_s^0 (e^{2\varepsilon_s t} - 1)}} \quad (7.82)$$

La flamme réagit donc avec un temps de réponse de l'ordre de $1/\varepsilon_s$. Ce temps n'est pas négligeable puisque, pour des étirements caractéristiques de 100 à 1 000 s^{-1} , il s'échelonne de 1 à 10 ms, ce qui correspond à des déplacements de l'ordre de 1 à 10 cm dans un écoulement à 10 m/s. Sur une telle distance, l'étirement induit par l'écoulement a pu être considérablement modifié...

Il est possible de définir un « taux d'étirement équivalent » $\varepsilon_\varepsilon^{eq}$ comme le taux d'étirement de la flamme stationnaire qui aurait la même structure et la même vitesse de réaction. D'après les relations (7.80) et (7.82), ce taux d'étirement équivalent s'exprime par :

$$\varepsilon_\varepsilon^{eq} = \varepsilon_s \frac{\varepsilon_s^0 e^{2\varepsilon_s t}}{\varepsilon_s + \varepsilon_s^0 (e^{2\varepsilon_s t} - 1)} \quad (7.83)$$

Ce qui permet de tracer la réponse de la flamme en terme d'étirement équivalent $\varepsilon_\varepsilon^{eq} / \varepsilon_s$ sur la figure (7.12) pour le cas $\varepsilon_s / \varepsilon_s^0 = 10$.

L'existence de ce temps de réponse d'une flamme de diffusion laminaire à une perturbation du taux d'étirement (ou de dissipation scalaire) a plusieurs conséquences pratiques :

- une flamme laminaire étirée pourra supporter sans s'éteindre des taux d'étirement largement supérieurs au taux d'étirement d'extinction introduit au paragraphe (7.5.2.3), pourvu que ces taux d'étirement ne soient pas appliqués trop longtemps (temps inférieurs à $1/\varepsilon_s$) ;
- le temps de réponse de la flamme induit un effet de filtre passe-bas. En effet, la flamme sera incapable de réagir à des perturbations du taux d'étirement à des fréquences trop élevées (typiquement du même ordre de grandeur que le taux d'étirement ε_s , soit environ 1000 Hz en pratique) ;
- l'introduction d'un taux d'étirement équivalent $\varepsilon_\varepsilon^{eq}$ est très intéressante pour la description des flammes turbulentes non prémélangées. En effet, nous avons vu que ces dernières pouvaient être analysées comme collection d'éléments de flammes laminaires (voir § 7.3.3.3). Dès lors, les effets instationnaires pourront être pris en compte via $\varepsilon_\varepsilon^{eq}$ qui permet d'utiliser la structure



d'une flamme laminaire étirée stationnaire équivalente, pour déterminer, en particulier, la vitesse de réaction.

7.5. Stabilisation des flammes de diffusion

Jusqu'à présent, nous avons essentiellement analysé la structure de flammes laminares de diffusion établies, sans se préoccuper de leur initiation ou des mécanismes de stabilisation qui leur permettent de subsister. En pratique, l'initiation des flammes fait appel à un apport d'énergie extérieur qui provient, par exemple, d'une petite flamme annexe (allumette) ou de l'étincelle issue d'une bougie d'allumage. Mais cet apport n'intervient en général que pendant un temps limité. Ensuite, la flamme doit rester stable sans source extérieure d'énergie, sous peine de s'éteindre. L'analyse des mécanismes de stabilisation d'une flamme est donc très importante en pratique : une flamme qui s'éteint intempestivement non seulement ne remplit plus sa mission (que penser d'un réacteur d'aviation qui s'éteindrait en vol ?) mais peut conduire à de graves problèmes ultérieurs (explosion) si les écoulements de réactifs ne sont pas stoppés... Les principaux mécanismes de stabilisation des flammes de diffusion vont maintenant être brièvement décrits. Ils sont évoqués à la fois pour décrire la stabilisation des flammes laminares et des flammes turbulentes. Il est vrai que la stabilisation des flammes turbulentes est le plus souvent analysée comme se produisant dans des zones où les caractéristiques de l'écoulement sont laminares...

7.5.1 Auto-inflammation

Ce mécanisme, illustré sur la figure (7.13) est le plus simple : les réactifs mis en contact s'auto-inflamment spontanément. Ce mécanisme remplit à la fois les rôles d'allumage (pas d'apport d'énergie extérieur pour initier la réaction) et de stabilisation. La flamme ne se développe en général qu'à partir d'une distance d_i , distance d'auto-inflammation. Un prémélange se forme d'abord en aval des lèvres du brûleur puis s'enflamme spontanément ensuite [26]. En pratique, ce mécanisme d'auto-inflammation se rencontre dans deux situations :

- le couple de réactifs réagit spontanément dans les conditions d'injection. Ce n'est pas le cas des combustibles usuels pour les conditions atmosphériques. Par ailleurs, la réaction hydrogène/ fluor, utilisée pour réaliser des lasers chimiques, est spontanée dans les conditions ambiantes ;



- au moins un des écoulements est préchauffé jusqu'à une température suffisante pour provoquer l'auto-inflammation. Cette situation se rencontre dans les « superstatoréacteurs » (statoréacteurs en écoulement supersonique) où l'écoulement d'air est naturellement préchauffé par compression jusqu'à des températures de l'ordre de 1000 K. La connaissance, et la maîtrise, de la distance d'allumage d_i est primordiale pour la conception de ces foyers.

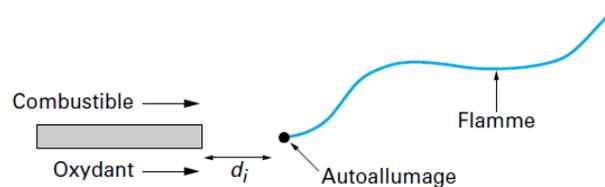


Fig.7-13: Stabilisation d'une flamme de diffusion par auto-inflammation[22].

7.5.2 Stabilisation sur les lèvres du brûleur

Si les échanges thermiques avec la flamme permettent à la lèvre du brûleur de rester suffisamment chaude, la flamme peut s'accrocher à celle-ci, comme le montre la figure (7.14). Cette situation se rencontre, par exemple, dans le cas d'une flamme de bec Bunsen (virole fermée) mais est plutôt « fragile » : une légère augmentation de la vitesse du jet de combustible peut conduire à l'extinction par diminution de la température de la lèvre du brûleur.

7.5.3 Stabilisation par flamme triple

Si la flamme n'est pas accrochée à la lèvre du brûleur, une zone de prémélange se forme en aval du brûleur. La composition de ce prémélange n'est, bien évidemment, pas uniforme mais il existe des zones où sa richesse est voisine de l'unité. Ce prémélange peut être enflammé par apport extérieur d'énergie (étincelle, allumette, ...). Une flamme de prémélange se développe alors et se propage vers l'amont du brûleur avec une vitesse S_L . Elle se stabilisera en un point de l'écoulement où la vitesse des gaz est voisine de S_L (en fait, une analyse plus poussée montre que la flamme modifie l'écoulement en amont et peut soutenir des vitesses d'écoulements de l'ordre de $S_L\sqrt{T_b/T_u}$ où T_u et T_b désignent respectivement la température des gaz frais et des gaz brûlés). On observe alors une flamme qui a l'allure présentée sur la figure (7.15) et connue sous le nom de flamme triple. Elle est constituée de trois parties. La flamme prémélangée a deux branches : une branche riche en combustible (du côté de l'écoulement de combustible) qui laisse

du combustible imbrûlé en aval et une branche pauvre (côté oxydant) qui laisse en aval des gaz chauds encore oxydants. En aval de cette double flamme de prémélange se développe la flamme de diffusion proprement dite. Ce mécanisme de stabilisation par flamme triple est également invoqué, à l'échelle microscopique, pour décrire la stabilisation d'une flamme sur les lèvres du brûleur (§ 7.5.2). Ces flammes sont également observées lors de la combustion de milieux réactifs non parfaitement prémélangés où coexistent des zones riches (combustible en excès) et pauvres (combustible en défaut). Historiquement, ces flammes triples ont d'ailleurs été mises en évidence pour la première fois (Phillips, 1965) lors de l'étude des « coups de grisou » dans les mines où une stratification est observée entre l'air ambiant et le méthane plus léger donc plus proche du plafond. D'un point de vue pratique, ces flammes détachées des lèvres du brûleur, sont relativement fragiles. Elles ne peuvent en particulier supporter que des vitesses d'écoulement faibles, de l'ordre de la vitesse de flamme laminaire prémélangée S_L (typiquement de quelques dizaines de cm/s selon le combustible). Une perturbation des conditions opératoires peut conduire à les souffler.

Remarque : Signalons que l'extinction d'une flamme stabilisée dans le jet d'une bouteille de gaz, exercice classique des pompiers, se fait simplement en interposant un obstacle entre la sortie de la bouteille et le point de stabilisation de la flamme triple.

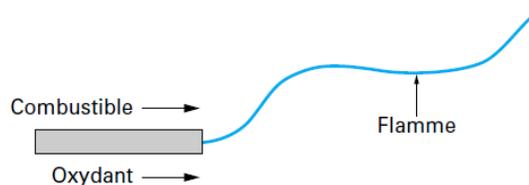


Fig. 7-14 : Stabilisation d'une flamme de diffusion par la lèvre du brûleur si celle-ci reste suffisamment chaude[22]

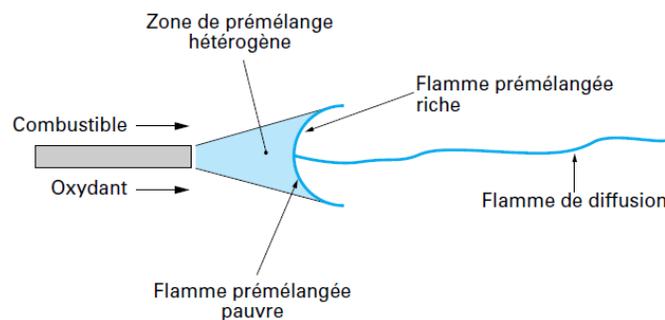


Fig. 7-15 : Stabilisation par « flamme triple » d'une flamme de diffusion décrochée des lèvres du brûleur [22].

7.5.4 Stabilisation par zone de recirculation

Nous avons vu aux deux paragraphes précédents (§ 7.5.2 et 7.5.3) que la stabilisation d'une flamme sur les lèvres d'un brûleur maintenues suffisamment chaudes ou par une flamme triple en aval de celle-ci est relativement fragile. En effet, une perturbation minime des conditions opératoires peut conduire à une extinction non contrôlée de la flamme qui doit être évitée, ne serait ce que pour des raisons évidentes de sécurité. C'est pourquoi, la plupart des dispositifs pratiques ont recours à une stabilisation par zone de recirculation (ou en aval d'un « bluff-body » [27], pour reprendre le terme anglais), illustrée sur la figure (7.16). L'idée est d'opposer à l'écoulement un obstacle suffisamment grand, qui peut d'ailleurs être les lèvres du brûleur elles-mêmes, pour permettre le développement de zones de recirculation. Ces zones de recirculation, utilisées également pour la stabilisation des flammes prémélangées, offrent deux avantages évidents :

- elles créent et maintiennent dans l'écoulement des points de vitesses suffisamment faibles pour permettre un accrochage de type « flamme triple » de la flamme [28] ;
- elles sont susceptibles de constituer un réservoir de gaz chauds (recirculation des gaz issus de la combustion) à température suffisante pour enflammer les réactifs. Si la structure interne de ces zones de recirculation n'est pas toujours bien comprise ni parfaitement décrite par les modèles, ce processus de stabilisation est à la fois simple à fabriquer et particulièrement efficace. C'est pourquoi il est utilisé dans la quasi-totalité des applications pratiques.

7.5.5 Flamme pilote

Il s'agit cette fois de « forcer » l'inflammation des réactifs par l'utilisation d'une petite flamme annexe, généralement située au voisinage des lèvres du brûleur (voir figure (7.17)). Cette petite flamme est le plus souvent prémélangée. Cette configuration est parfois utilisée pour la stabilisation de flamme de grandes dimensions ou fonctionnant dans des conditions opératoires proches des limites d'extinction.

Remarque : *les veilleuses de chauffe-eau ou de chaudières jouent, dans une certaine mesure, le rôle de flamme pilote, au moins pour provoquer l'allumage des flammes principales.*

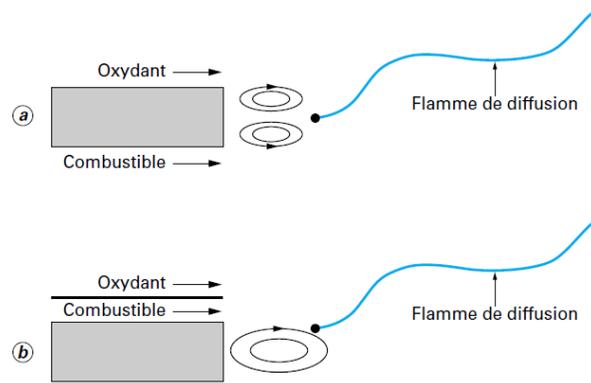


Fig.7-16 : Flamme de diffusion stabilisée en aval d'une zone de recirculation(L'obstacle qui génère la zone de recirculation peut séparer les deux écoulements combustible et oxydant (a) ou se trouver à la périphérie (b) [22].

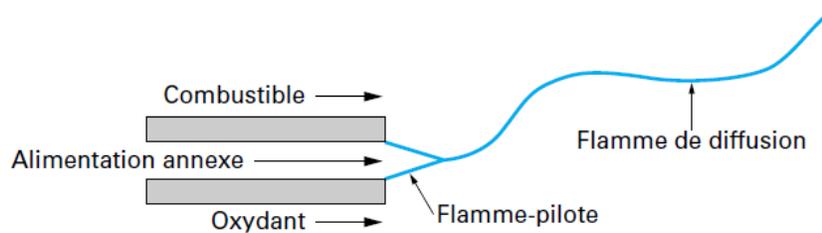


Fig.7-17 : Stabilisation d'une flamme de diffusion par flamme pilote (Cette flamme-pilote, alimentée par un dispositif annexe, est le plus souvent prémélangée) [22].

Exercice1

Un jet gazeux laminaire de l'écoulement carburant et l'air, où il est allumé. La hauteur de la flamme est de 8 cm. Ensuite, le diamètre du jet est augmenté de 50% et la vitesse du jet réduit de 50%. Comment la hauteur de la flamme change? Montrer que la hauteur d'un jet de flamme de diffusion ne dépend pas de la pression pour un flux de masse constante.

Exercice2

On considère une flamme de diffusion co-courant (acétylène-oxygène). L'écoulement 1 se compose uniquement de l'oxygène (O_2), l'écoulement 2 seulement de l'acétylène (C_2H_2)

(a) déterminer les fractions de mélange ξ_i pour les éléments C, H et O avant l'allumage.

(b) Déterminer les fractions de mélange pour C, H et O après l'allumage. Prendre en compte que CO_2 et H_2O sont formés (assumer diffusivités égales).

(c) Quelle est la valeur de la fraction de mélange à composition stœchiométrique?

Exercice3

Supposons que vous avez un jet de flamme de diffusion laminaire de l'hydrogène dans l'air qui a une longueur de flamme L (voir Fig.7.18). Estimer la longueur de la flamme si le carburant hydrogène H_2 est remplacé par du deutérium D_2 . (Deutérium a deux fois la masse d'hydrogène, avec près de la même cinétique chimique et thermique de la combustion.)

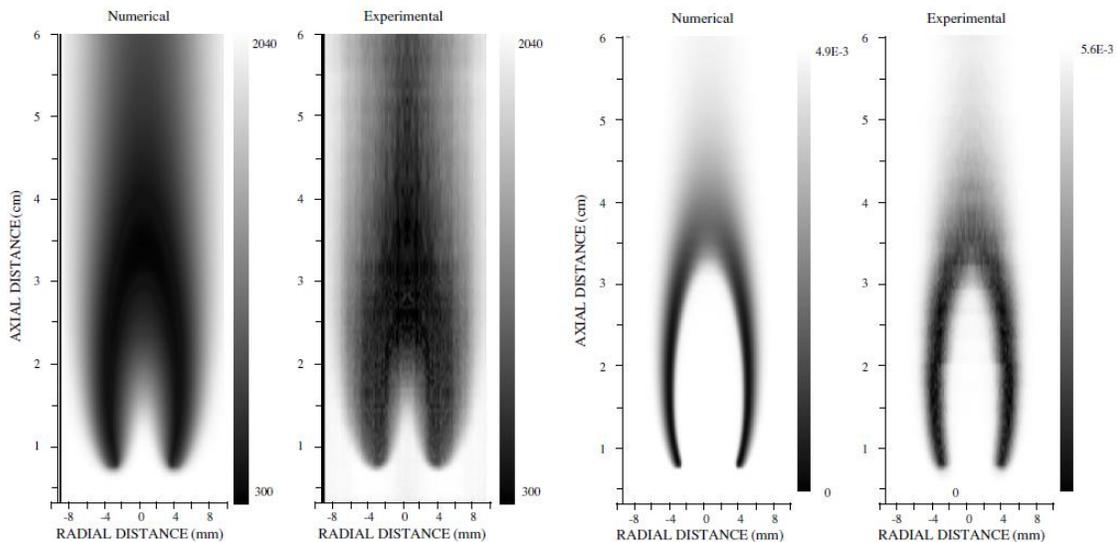


Fig.7-18 : Resultats expérimentales et numérique de la température (de gauche) et la fraction molaire de radical OH (de droite) dans un jet de la flamme de diffusion laminaire flamme (Smooke et al. [29]).

Références

- [1] Borghi R., Destriau M., *La Combustion et les flammes* Editions Technip, Paris, 1995
- [2] Meijer E. W. van 't Hoff J. H., *Hundred Years of Impact on Stereochemistry in the Netherlands*, *Angewandte Chemie International Edition* 40 (20) , pp. 3783-3789, 2001.
- [3] Arrhenius. S, *Über die Reaktionsgeschwindigkeit bei der Inversion von rohrzucker-durch Sauren*. *ZPhys chem.* 4(226),1889.
- [4] Stefan J., *Sitzungsberichte Akad, Wiss. Wien*, II(68)325, 1874.
- [5] Warnatz J., Maas U., Dibble R.W., *Combustion*, Springer-Verlag, New York, 2 (1996).
- [6]Wilke CR., *A viscosity equation for gaz mixtures*, *J. chem. Phys.*, 18(517), 1950.
- [7]Mallard, E., le Chatelier, H. L., *Combustion des mélanges gazeuse explosifs*, *Ann. Mines*, 4(62), pp. 379–568, 1883.
- [8] Poinso T., Veynante D., *Theoretical and Numerical Combustion*, 2nd ed., R.T. Edwards, 2005.
- [9]Glassman I., *Combustion*, 3rd ed., Academic Press, San Diego, CA, 1996
- [10] Zeldovich Y. B., *Theory of combustion and detonation of gases*, Academy of Sciences (in Russian), Moscow, 1944.
- [11] Williams F. A., *Combustion Theory*, 2nd ed., Perseus Books Reading, Massachussets, 1985.
- [12] Clavin P., *Dynamic behavior of premixed flame fronts in laminar and turbulent flows*, *Progress in Energy and Combustion Science*, 11(1), pp. 1-59, 1985.
- [13] Markstein G. H., *Non steady flame propagation*, Advisory Group for Aeronautical Research and Development, North Atlantic Treaty Organization by Pergamon Press, Oxford, 1964.
- [14] Williams F. A., *A review of some theoretical considerations of turbulent flame structure*, *Agard Conference Proceedings*, 164, 1974.
- [15] Benedicte G, *Caracterisation experimentale des flammes laminaires et turbulentes en expansion*. Thèse doctorat, Université d'Orleans, 2014.
- [16] Bonhomme A., Selle L.,Poinso T., *Curvature and confinement effects for flame speed measurements in laminar spherical and cylindrical flames*, *Combustion and Flame*, 160(7), pp. 1208-1214, 2013.
- [17]Bradley D., Gaskell P. H. Gu X. J., *Burning velocities, markstein lengths, and flame quenching for spherical methane-air flames: A computational study*, *Combustion and Flame*, 104, pp. 176-198,1996.



- [18] Candel S. M., Poinso T. J., *Flame Stretch and the Balance Equation for the Flame Area*, Combustion Science and Technology, 70, pp. 1-15,1990.
- [19] Poinso T., Veynante D., *Theoretical and Numerical Combustion*, 2nd ed., R.T. Edwards, 2005.
- [20] Kee R. J., Rupley F. M., Miller J. A., *Chemkin-II: A Fortran chemical kinetics package for the analysis of gas phase chemical kinetics*, Report No. SAND89-8009B, Sandia National Laboratories, 1989.
- [21] Bechtold J. K., Matalon M., *The dependence of the Markstein length on stoichiometry*, Combustion and Flame, 127, pp. 1906-1913,2001.
- [22] Veynante D., *Flamme de diffusion laminaire*, Techniques de l'Ingénieur, traité Génie énergétique. BE 8 320-1, 2008.
- [23] Mura A., *Aérothermochimie des Ecoulements Turbulents Réactifs*. Cours de Master ISAE-ENSMA, 2007.
- [24] Williams F.A., *Combustion Theory*. Benjamin- Cummings 1985.
- [25] Vervisch L., Poinso T., *Direct numerical simulation of non-premixed turbulent flames*. Annual Rev. Fluid Mech. 30, pp. 655-691, 1998.
- [26] Kuo K.K., *Principles of Combustion*. Wiley-Interscience, 1986.
- [27] El-mahallawy.F, habik S., *Fundamentals and technology of combustion*, Elsevier,2002.
- [28] Turns S.R., *An introduction to combustion, concepts and applications*. Series in Mechanical Engineering Mc Graw-Hill, 1996.
- [29] Smooke, M.D., Mitchell R.E., Keyes D.E., *Numerical solution of two-dimensional axisymmetric laminar diffusion flames*. Comb Ssi Technol 67(85), 1989.
- [30] Burke S. P., Schumann T. E. W., *Diffusion Flames*, Ind. Eng. Chem., 20(10), pp.998-1004, 1928.

