



# PROJET :THERMODYNAMIQUE DES MACHINES THERMIQUES

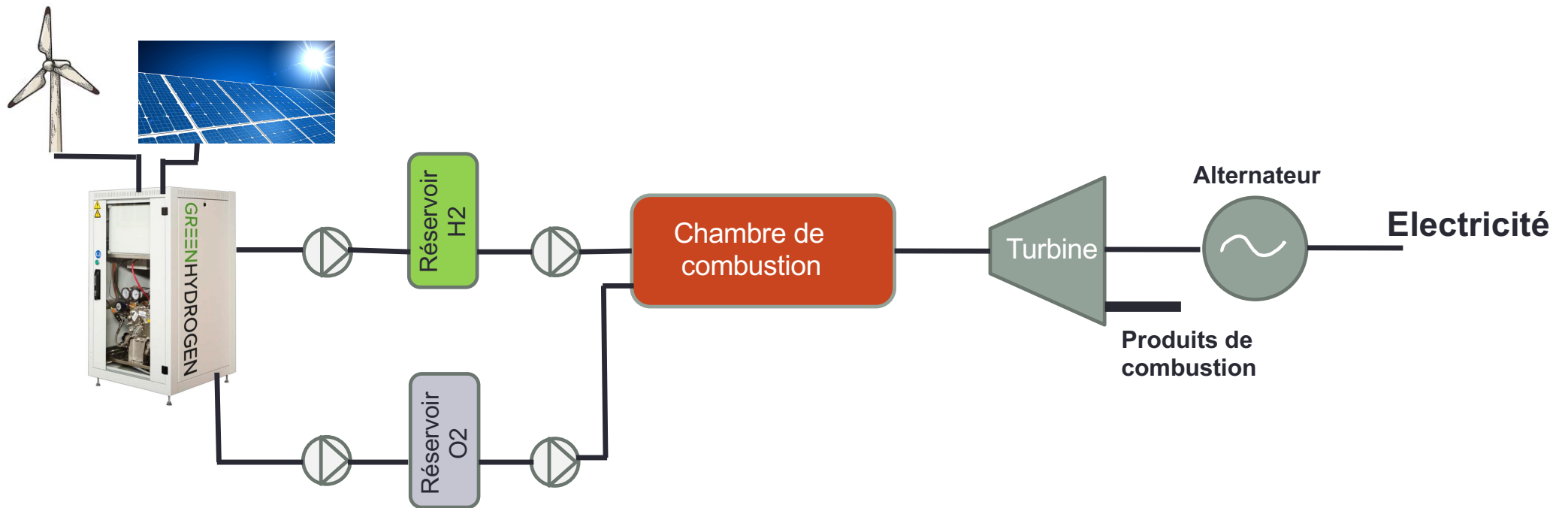
---

# Contexte

---

- **Transition énergétique** : une des solutions est la décarbonation par le biais d'électrification
- **Production d'électricité décarbonée** : énergies renouvelables (éolienne, solaire)
  - ✓ **Problème** : énergies intermittentes
  - ✓ **Solution** : vecteurs énergétiques permettant le stockage de surplus d'électricité
- **Vecteur énergétique** : le dihydrogène produit par le biais de l'électrolyse de l'eau (le procédé produit le dioxygène également).
- **Electricité décarbonée** : combustion  $H_2$  et  $O_2$

# Installation



# Thermochimie

---

## Calcul analytique de la température adiabatique de flamme :

- Calculer la température et la composition des gaz brûlés générés suite à une combustion isobare adiabatique d'un mélange stœchiométrique  $H_2 / O_2$ 
  - ✓ La température et la pression initiales sont égales à 300 K et 0.1 MPa, respectivement.

## Calcul CANTERA :

- Calculer la température de la flamme aux mêmes conditions avec le logiciel CANTERA
- Donner l'évolution de  $T_{ad}$  en fonction de la pression  $P \in [0.1 \text{ MPa}, 10^4 \text{ MPa}]$

# Thermochimie

---

## Etude de l'influence de la température et la pression d'équilibre sur les propriétés du mélange

- Tracer l'évolution de l'enthalpie des gaz brûlés en fonction de la température ( $300\text{ K} < T < 4000\text{ K}$ ) pour quatre valeurs de pression  $P = 0.1, 1, 10, 10^4\text{ MPa}$ .
- Déduire :
  - ✓ la chaleur libérée par la réaction considérée.
  - ✓ la contribution énergétique de la dissociation en fonction de la température pour  $P = 0.1\text{ MPa}$ .
  - ✓ la température adiabatique de flamme en fonction de la pression.
- Tracer l'évolution de la fraction molaire des espèces OH et H<sub>2</sub>O en fonction : (i) de la pression à la  $T=3400\text{ K}$  et (ii) de la température à la pression  $0.1\text{ MPa}$ .

## Influence de la richesse, la température et la pression initiales sur la température de la flamme

- Etudier l'influence de la richesse  $0.1 \leq \phi \leq 10$  sur la température de flamme dans le cas d'une combustion isobare adiabatique à  $T_0 = 300\text{ et }500\text{ K}$  pour  $P_0 = 0.1\text{ et }10\text{ MPa}$ .

# Machine thermique

---

**La dernière étude s'intéresse à l'installation présentée précédemment, le but étant de :**

- caractériser les produits de combustion à la sortie de la turbine,
- faire évoluer l'installation pour une meilleur efficacité,
- déterminer le (les) rendement(s) de l'installation.

## **Données :**

- Température des gaz brûlés d'entrée de turbine 773 K
- Pression de la chambre de combustion 6 MPa
- Rendements :  $\eta_{turbine} = 0.85$  ;  $\eta_{alternateur} = 0.98$

# Tuto CANTERA

---

## Importation de librairies

---

```
import numpy as np
import cantera as ct
import matplotlib
import matplotlib.pyplot as plt
import csv
```

---

```
# - numpy: pour le calcul scientifique (ici pour le calcul matriciel)
# - matplotlib: pour le tracé des graphiques
# - cantera: pour le calcul thermodynamique
# - csv: pour l'export des données au format lisible par excel
```

# Tuto CANTERA

## Création d'un objet gaz

```
gas=ct.Solution('gri30.xml')
gas()
```

gri30:

temperature 300 K  
pressure 1.0133e+05 Pa  
density 0.081894 kg/m<sup>3</sup>  
mean mol. weight 2.016 kg/kmol  
phase of matter gas

	1 kg	1 kmol	
enthalpy	26469	53361	J
internal energy	-1.2108e+06	-2.441e+06	J
entropy	64910	1.3086e+05	J/K
Gibbs function	-1.9447e+07	-3.9204e+07	J
heat capacity c <sub>p</sub>	14311	28851	J/K
heat capacity c <sub>v</sub>	10187	20536	J/K
	mass frac. Y	mole frac. X	chem. pot. / RT
H2	1	1	-15.717
[ +52 minor]	0	0	



# Tuto CANTERA

## Sélection d'un nombre réduit d'espèces

```
-----
ich4 = gas.species_index('CH4')
io2 = gas.species_index('O2')
ico = gas.species_index('CO')
ih2o=gas.species_index('H2O')
ico2=gas.species_index('CO2')
ih2=gas.species_index('H2')
ioh=gas.species_index('OH')
io=gas.species_index('O')
ih=gas.species_index('H')
spec = ct.Species.listFromFile('gri30.xml')
gas = ct.Solution(thermo='IdealGas', species=[spec[i] for i in (ich4,io2,ico,ih2o,ico2,ih2,ioh,io,ih)])
gas()
```

	mass frac. Y	mole frac. X	chem. pot. / RT
CH4	1	1	-1.0247e+07
[ +8 minor]	0	0	

# Tuto CANTERA

## Création du mélange stoechiométrique CH4 / O2

T=300.

P=101325

combustible = 'CH4'

Zst= gas.n\_atoms(combustible,'C') + 0.25\*gas.n\_atoms(combustible,'H')

gas.TPX = T, P, 'CH4:1, O2:{0}'.format(Zst)

gas()

temperature	500 K		
pressure	2.0133e+05 Pa		
density	1.292 kg/m^3		
mean mol. weight	26.68 kg/kmol		
phase of matter	gas		
	1 kg	1 kmol	
enthalpy	-6.7736e+05	-1.8072e+07	J
internal energy	-8.3319e+05	-2.2229e+07	J
entropy	8087.4	2.1577e+05	J/K
Gibbs function	-4.7211e+06	-1.2596e+08	J
heat capacity c_p	1357.6	36220	J/K
heat capacity c_v	1046	27906	J/K
	mass frac. Y	mole frac. X	chem. pot. / RT
CH4	0.20044	0.33333	-41.297
O2	0.79956	0.66667	-24.799
[ +7 minor]	0	0	

# Tuto CANTERA

## Calcul de la température de flamme et la composition des gaz brûlés

-----		temperature	3159.9 K		
		pressure	2.0133e+05 Pa		
		density	0.16466 kg/m^3		
gas.equilibrate('HP')		mean mol. weight	21.489 kg/kmol		
gas()		phase of matter	gas		
-----					
			1 kg	1 kmol	
			-----	-----	
		enthalpy	-6.7736e+05	-1.4556e+07	J
		internal energy	-1.9e+06	-4.0828e+07	J
		entropy	13198	2.836e+05	J/K
		Gibbs function	-4.2381e+07	-9.1071e+08	J
		heat capacity c_p	2175.7	46752	J/K
		heat capacity c_v	1788.8	38438	J/K
			mass frac. Y	mole frac. X	chem. pot. / RT
			-----	-----	-----
		CH4	2.0441e-13	2.7379e-13	-64.526
		O2	0.12361	0.083009	-32.294
		CO	0.20523	0.15745	-34.724
		H2O	0.32879	0.39219	-39.121
		CO2	0.22739	0.11103	-50.871
		H2	0.006767	0.07213	-22.975
		OH	0.076978	0.097262	-27.634
		O	0.028985	0.03893	-16.147
		H	0.0022518	0.048003	-11.487

# Tuto CANTERA

## Enthalpie en fonction de la température et de la pression

```
-----
gas1=ct.Solution('gri30.xml')
T=np.linspace(300,4000,200)
P=np.array([1e5,1e7], 'd')
h=np.zeros([P.size,T.size])

Zst= gas.n_atoms(combustible,'H')+ 0.25*gas.n_atoms(combustible,'H')

for i in range (P.size):
    for j in range (T.size):
        gas1.TPX = T[j], P[i], 'CH4:1, O2:{0}'.format(Zst)
        gas1.equilibrate('TP')
        h[i,j]=gas1.h

plt.plot(T, h[0,:],label='$p_0=1atm$')
plt.plot(T, h[1,:],label='$p_0=100atm$')
plt.legend(bbox_to_anchor=(0, 1), loc=2, borderaxespad=1.)

plt.ylabel('Enthalpie')
plt.xlabel('T')
plt.show()
-----
```

