



 Institut Supérieur de l'Aéronautique et de l'Espace
 Ecole Nationale Supérieure de
 Mécanique et d'Aérotechnique


 CNRS



 UNIVERSITÉ
 de Poitiers


 中国民航大学
 CIVIL AVIATION UNIVERSITY OF CHINA

S4 – Option Propulsion

Combustion Fondamentale
et application à l'aéronautique
(HT41)

Djamel Karmed djamel.karmed@isae-ensma.fr
Avril 2018



Fluide-Thermique-Combustion
 CNRS • Université de Poitiers • ENSMA •
 UPR 3346
 ENSMA • Téléport 2
 1, avenue Clément Ader • BP40109
 F86961 FUTUROSCOPE

Année 2017-2018

1

Contenu du cours :

- **Introduction de la combustion**
- **Généralités sur les écoulements réactifs à petit nombre de Mach**
 - *Grandeurs et systèmes thermodynamiques, mélange de gaz*
 - *Descriptions des phénomènes de combustion, flammes*
 - *Bilans de masse et d'énergie*
- **Introduction à la cinétique chimique de la combustion**
 - *Evaluation des taux de production chimique des espèces*
 - *Réactions globales et réactions en chaîne, schémas cinétiques*
 - *Cinétique de combustion d'un mélange hydrogène-air*
 - *Cinétique de combustion d'un mélange méthane-air*
 - *Réactions globales pour la combustion des mélanges kérosène-air*
- **Structure d'une flamme de diffusion**
- **Structure d'une flamme plane de prémélange**
- **Foyer de turboréacteurs**

Introduction à La combustion :

→ Fait partie de l'Energétique

- Centrales thermiques (classiques) de production d'électricité
- Moteurs, propulseurs, turbines à gaz
- Procédés industriels (Chimie, pétrole, ciments, verre, papier ...)
- Chauffage domestique, industriel
- Incendie et sécurité

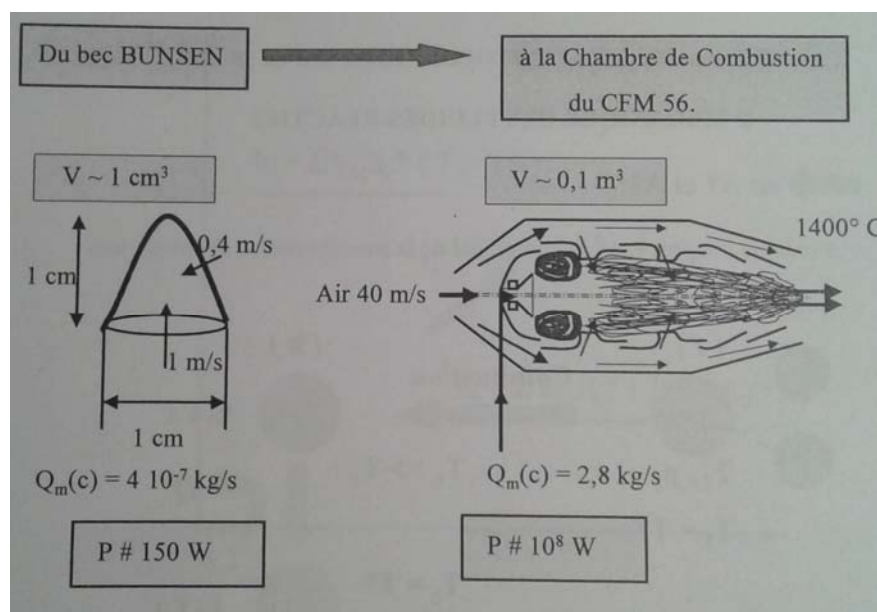
2000 : 70-80% de l'énergie mondiale

2050 : >50%

→ Science multidisciplinaire : combinée de sciences fondamentales

- Mécanique des fluides, Aérodynamique
 - Thermodynamique, Thermique
 - Chimie, Cinétique chimique
- } SPI

3



4

Caractérisation des phénomènes de combustion

5

Qu'est ce que la combustion ?

La combustion résulte d'une interaction entre réactions chimiques **exothermiques, phénomènes de transports moléculaires** (diffusion, conduction thermique et viscosité), et **convection** dans la partie fluide du système (liquide ou gaz).

L'existence de réactions chimiques nécessite la présence simultanée (**mélange**) d'un combustible et d'un oxydant.

air pour un moteur d'avion,
oxygène pur O_2 dans un moteur fusée

Hydrocarbures C_nH_m (kérosène pour les moteurs d'avions),
hydrogène pour les moteurs fusées

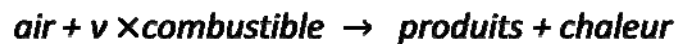
Rappel : 1 mole d'air = (1 mole d'oxygène + 3.76 moles d'azote)/4.76 (29g)

La combustion se traduit par l'évolution d'un mélange d'espèces chimiques :

Exemple mettant en jeu 5 espèces:

- Avant combustion: air ($O_2 + N_2$) + combustible
- Après combustion: produits de combustions: $CO_2 + H_2O + O_2 + N_2 + \dots$

Cette évolution correspond à une transformation chimique que l'on peut représenter par une réaction globale:



7

Combustion en milieu monophasique :

- Combustion des mélanges de gaz
- Dans de nombreux cas le combustible injecté sous forme de gouttes dans la chambre de combustion est **vaporisé avant** la combustion. Celle-ci concerne donc un mélange de gaz.

Exemples:

- Aéronautique : Turboréacteurs, statoréacteurs
- Automobile : Moteurs à allumage commandé

8

Combustion en milieu *diphase* :
combustion des liquides et des solides

Le combustible est solide ou liquide avant combustion,
 mais les produits de combustions sont gazeux

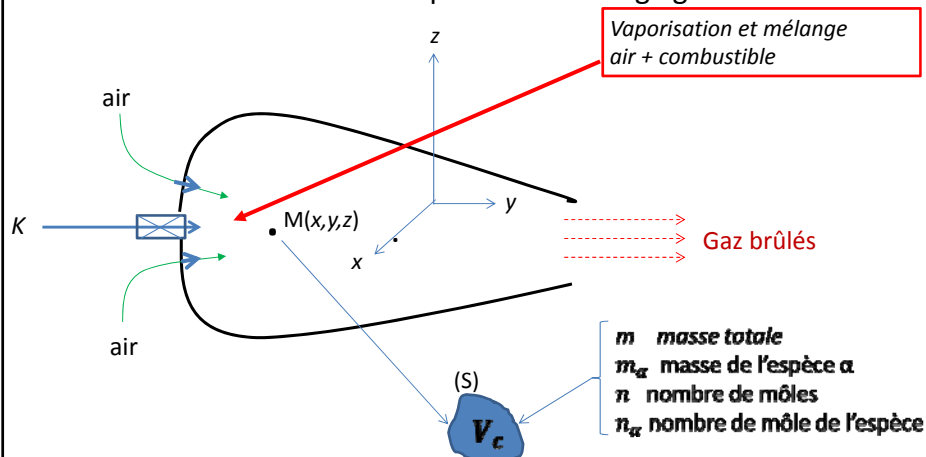
Exemples dans le domaine des systèmes propulsifs :

- **Moteurs diésels :** combustion d'un **nuage de gouttes de combustible** (brouillard) dans de l'air
- **Boosters de fusée :** combustion d'un **mélange solide** combustible + oxydant (prémélange solide) Propergols

dans les deux cas les produits de combustion (principalement eau et di-oxyde de carbone CO_2) sont à l'état **gazeux**.

9

Exemple d'une chambre de combustion, après vaporisation du
Combustible : Caractéristiques d'un mélange gazeux réactif



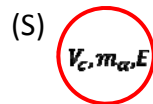
Chaque point (M) de l'écoulement est assimilé à un volume V_c
 infinitésimal constituant un **système thermodynamique ouvert**

10

Rappel sur les systèmes thermodynamiques
 (système V_c comprenant N espèces chimiques
 de masse totale m , d'énergie totale E)

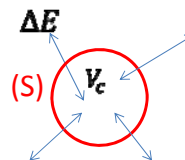
Système isolé:

pas d'échange avec
l'extérieur



Système fermé

Échange de chaleur
seulement



Flux d'énergie (chaleur) dans la direction \vec{dS} :

$$\vec{j}_q$$

Flux de chaleur à travers (S) :

$$I_q = \oint \vec{j}_q \cdot \vec{dS}$$

$$m = \text{constante}$$

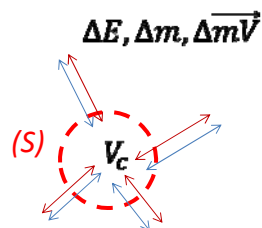
$$\left\{ \begin{array}{l} E = \text{constante} \\ m = \sum_1^N m_\alpha = \text{constante} \\ m_\alpha = \text{cst} : \text{pas de réaction chimique} \\ m_\alpha \neq \text{cst} : \text{réaction chimique} \end{array} \right.$$

11

Rappel sur les systèmes thermodynamiques :
Système ouvert

Système ouvert:

Échanges de chaleur, de masse
et de quantité de mouvement avec l'extérieur de V_c



Flux dans la direction \vec{dS} :

$$\text{Energie : } \vec{j}_q$$

$$\text{Masse de l'espèce } \alpha : \vec{j}_\alpha$$

$$\text{Quantité de mouvement : } \vec{\tau}$$

Flux à travers (S)

$$I_q = \oint \vec{j}_q \cdot \vec{dS}$$

$$I_\alpha = \oint \vec{j}_\alpha \cdot \vec{dS}$$

$$I_v = \oint \vec{\tau} \cdot \vec{dS}$$

τ_{ij} : Flux de la composante i du champ de vitesse dans la direction j

12

Caractéristiques d'un système réactif (1)
 (mélange constitué de N espèces)

- Espèces chimiques

$$Y_\alpha = \frac{m_\alpha}{m} \quad \text{fraction massique de l'espèce } \alpha$$

$$C_\alpha = \frac{n_\alpha}{V_c} = \rho \frac{Y_\alpha}{M_\alpha} \quad \text{concentration}$$

$$\rho_\alpha = \frac{m_\alpha}{V_c} \quad \text{masse volumique de l'espèce } \alpha \text{ (partielle)}$$

masse volumique d'un mélange : $\rho = \sum_{\alpha=1}^N \rho_\alpha = \frac{m}{V_c}$

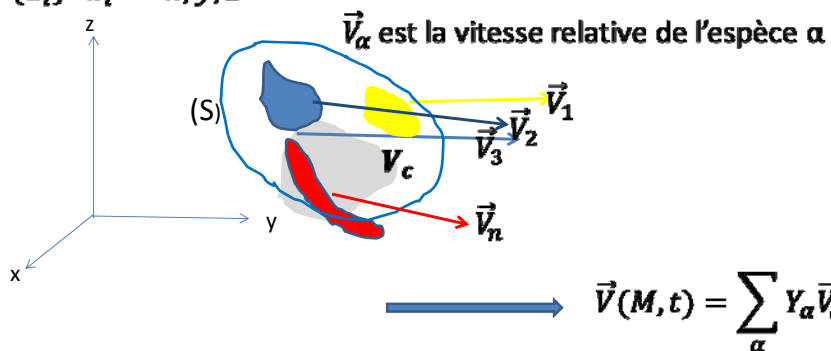
13

Caractéristiques d'un système réactif (2)

- Quantité de mouvement d'un mélange gazeux

$$m\vec{V}(M, t) = \sum_{\alpha} m_{\alpha} \vec{V}_{\alpha}$$

$\vec{V}(M, t)$: champ de vitesse au point M , de composantes $\{u_i\}$ $x_i = x, y, z$



14

Caractéristiques d'un système réactif (3)

- Energie
- Enthalpie du mélange par unité de masse

$$h = \sum_{\alpha} h_{\alpha} Y_{\alpha} \quad \left(= \frac{H}{m} \right)$$

$$h_{\alpha} = \int C_{p\alpha} dT + Q_{\alpha}^0 \quad (\text{mélange de gaz parfaits})$$

$C_{p\alpha}$: chaleur massique de l'espèce α à pression constante

Q_{α}^0 : chaleur de formation de l'espèce α à la température T_0



$$h = \int \bar{C}_p dT + \sum_{\alpha} Q_{\alpha} Y_{\alpha}$$

$\bar{C}_p = \sum_{\alpha} C_{p\alpha} Y_{\alpha}$ est la chaleur massique du mélange

Enthalpie totale : $h_t = h + \frac{1}{2} \vec{V} \cdot \vec{V}$

15

- Energie interne du mélange

$$e = \sum_{\alpha} e_{\alpha} Y_{\alpha} \quad \left(= \frac{E}{m} \right) = h - \frac{p}{\rho}$$

(mélange de gaz parfaits)

$C_{v\alpha}$: chaleur massique de l'espèce α à volume constant

$Q_{\alpha,v}^0$: chaleur de formation de l'espèce α à la température T_0 et volume constant

$$e_{\alpha} = \int C_{v\alpha} dT + Q_{\alpha,v}^0$$

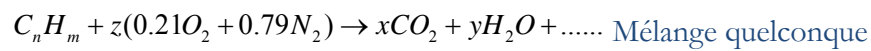
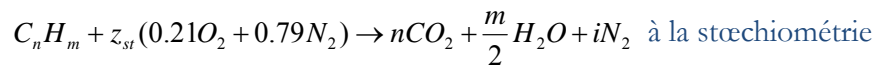
$\bar{C}_v = \sum_{\alpha} C_{v\alpha} Y_{\alpha}$ est la chaleur massique du mélange à volume constant

Energie totale : $e_t = e + \frac{1}{2} \vec{V} \cdot \vec{V}$

16

Notions de thermodynamique

Mélange réactif carburant-air



$$z_{st} = \frac{\left(n + \frac{m}{4}\right)}{0.21}$$

On appelle rapport dilution le rapport :

$$D = \frac{m_{air}}{m_c} = \frac{Y_{air}}{Y_c}$$

Si l'écoulement est stationnaire :

$$D = \dot{m}_{air} / \dot{m}_c = Y_{air} / Y_c$$

$$D_{st} = (\dot{m}_{air} / \dot{m}_c)_{st} = (Y_{air} / Y_c)_{st}$$

17

On appelle richesse d'un mélange le rapport :

$$\varphi = \frac{D_{st}}{D} = \frac{z_{st}}{z}$$

$\varphi < 1$ Mélange pauvre en carburant (fuel lean mixture), excès d'oxygène
CO₂, H₂O, N₂, O₂

$\varphi = 1$ Mélange strict ou stœchiométrique
CO₂, H₂O, N₂

$\varphi > 1$ Mélange riche en carburant (fuel rich mixture)
CO₂, H₂O, N₂, CO, H₂

$$z_{st} = (n + m/4) / 0.21 = (3 + 8/4) / 0.21 = 5 / 0.21 = 23.8$$

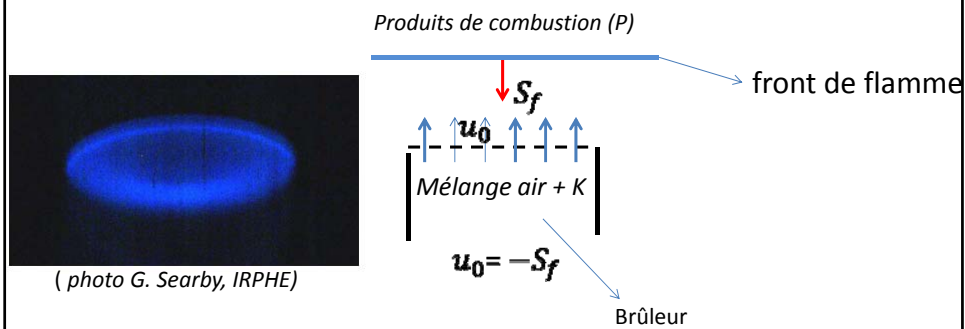
$$D_{st} = 23.8 * 28.84 / 44 = 15.6$$

15.6 kg d'air pour brûler
totalement 1 kg de propane

18

*Etude phénoménologique d'une flamme :
quelques exemples d'expériences.*

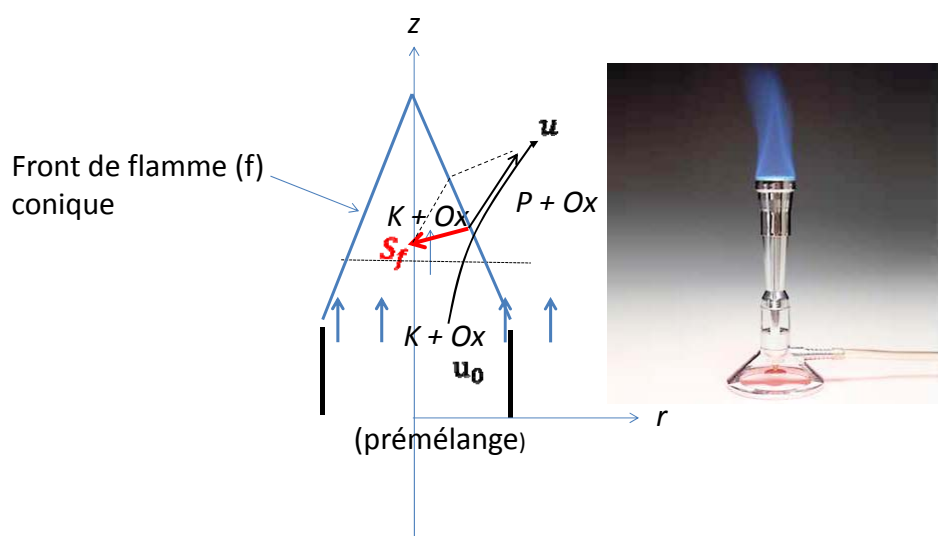
1- Flamme de **prémélange** plane stationnaire:



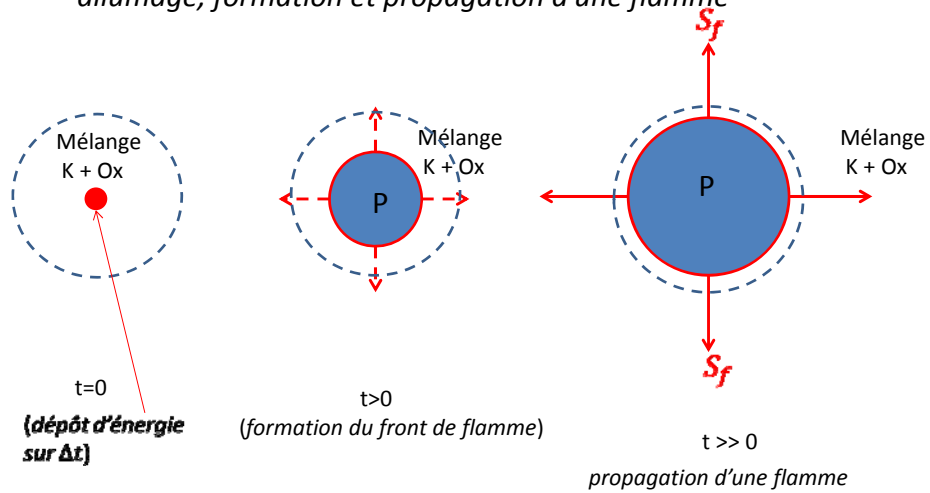
S_f : vitesse de flamme

Exemple : mélange stoechiométrique CH_4 -air $\rightarrow S_f \approx 38 \text{ cm/s}$

2- flamme de prémélange
stabilisée sur un brûleur Bunsen :

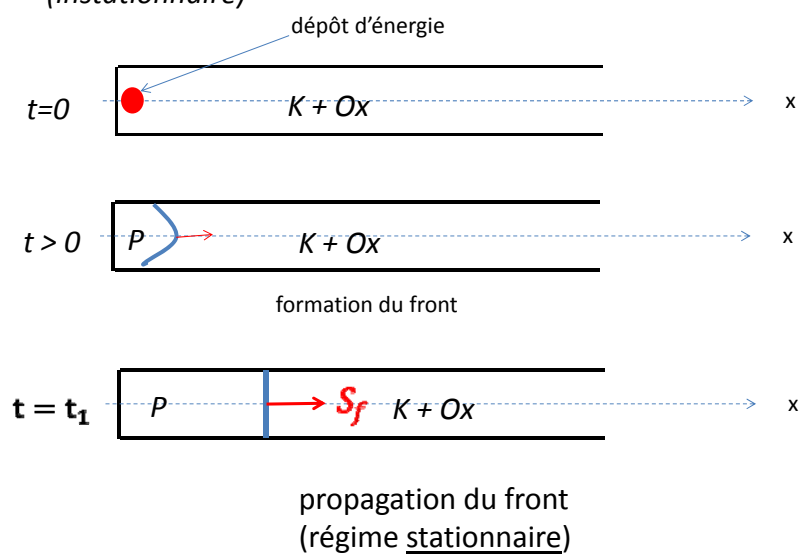


3- Flamme de prémélange sphérique instationnaire : allumage, formation et propagation d'une flamme



21

4- Flamme plane dans un tube (instationnaire)



22

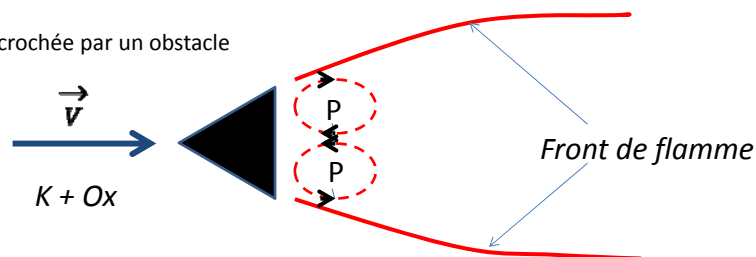
Conclusion : la flamme de prémélange a une dynamique propre, caractérisée par une vitesse de propagation:

la vitesse de flamme (S_f).

L'existence de cette vitesse permet la stabilisation de la flamme dans un écoulement.

- 1 – S_f dépend de la nature du mélange.
- 2 – le positionnement de la flamme dépend de l'écoulement.

Flamme accrochée par un obstacle (moteur) :



23

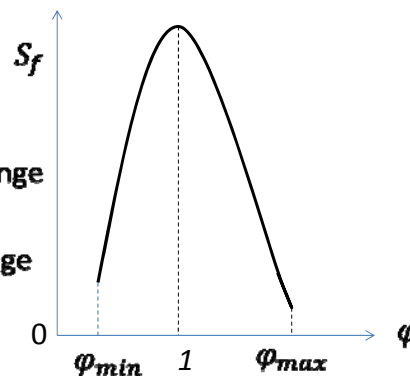
Richesse du mélange et limites d'inflammabilité

- | | | |
|---|---------------|-----------------------------------|
| { | $\varphi < 1$ | → mélange <u>pauvre</u> |
| | $\varphi = 1$ | → mélange <u>stoechiométrique</u> |
| | $\varphi > 1$ | → mélange <u>riche</u> |

Limites d'inflammabilité:

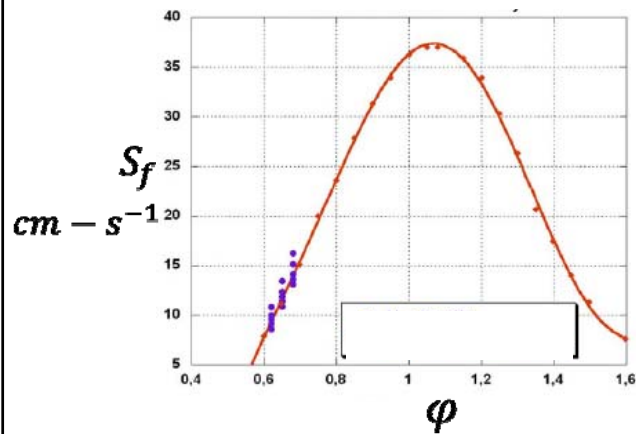
φ_{min} : limite d'extinction en mélange pauvre

φ_{max} : limite d'extinction en mélange riche



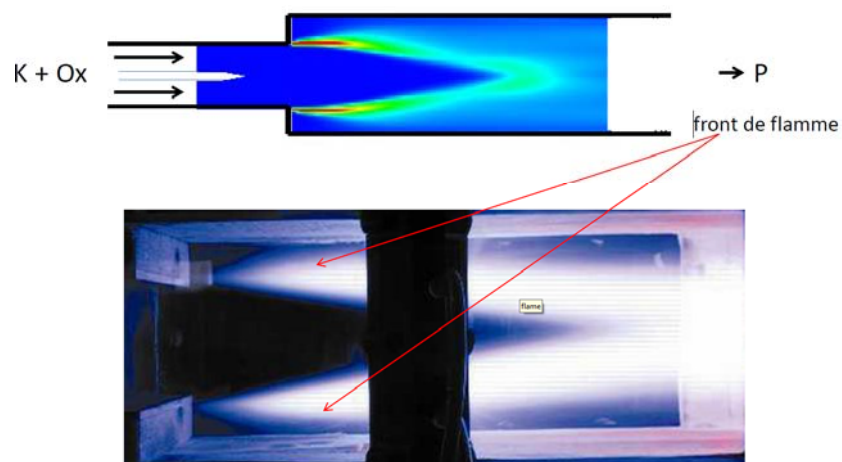
24

Limites d'inflammabilité, exemple du mélange méthane - air
température des gaz frais : $T_r = 300\text{ K}$

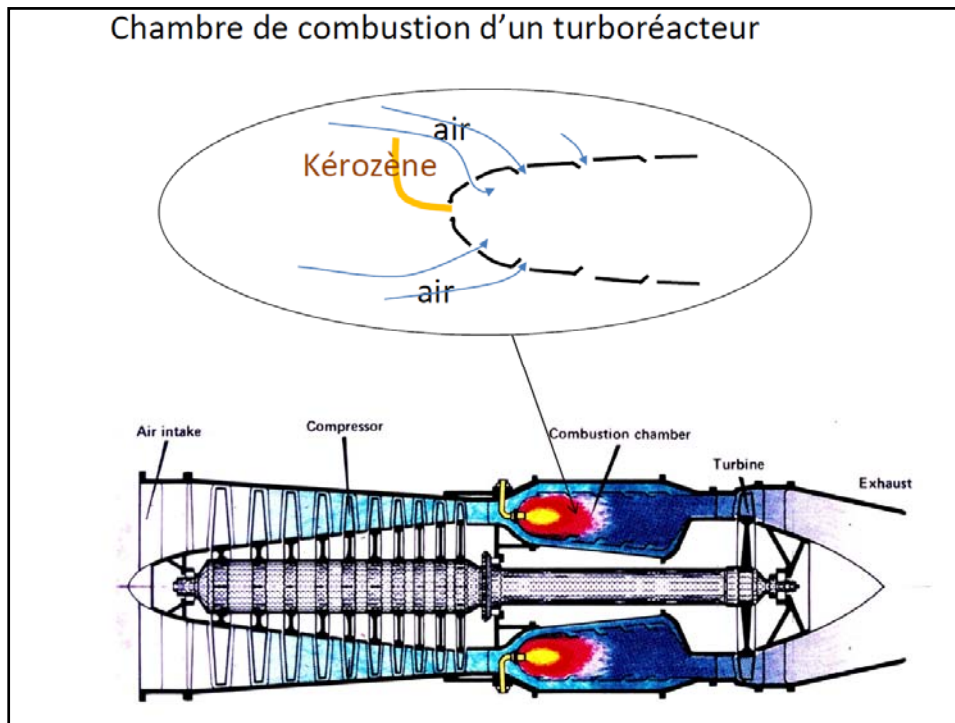


25

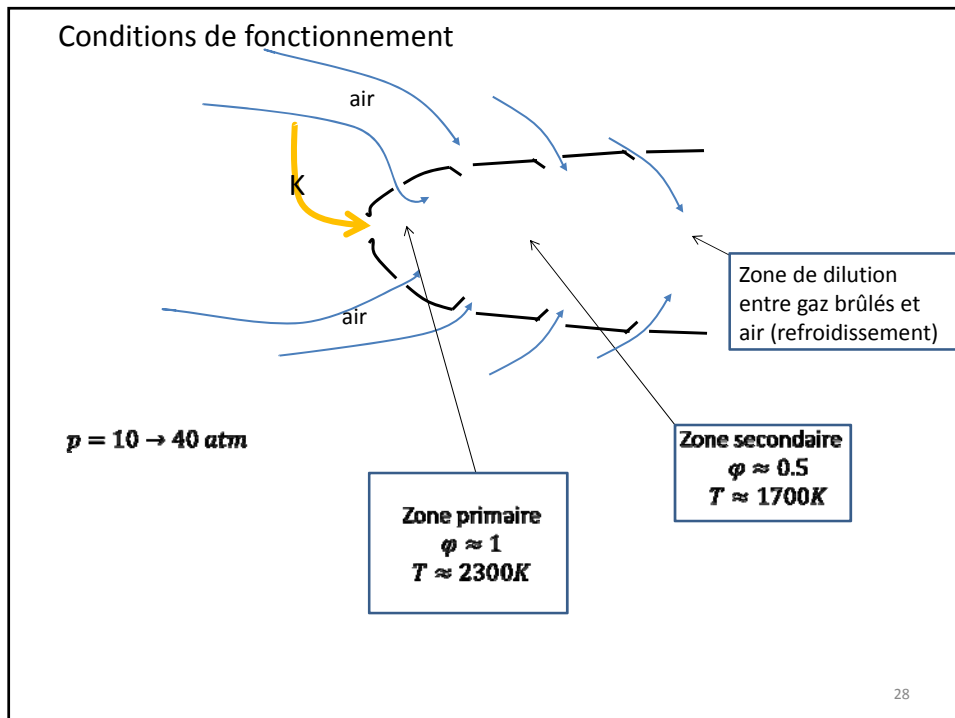
Montage expérimental ORACLES (ENSMA-Poitiers)
(flamme de prémélange accrochée par un élargissement brusque)



Chambre de combustion d'un turboréacteur



Conditions de fonctionnement

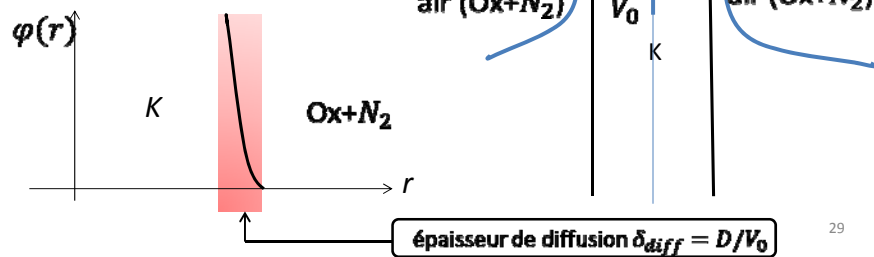


28

Flamme de diffusion (non prémélangée)

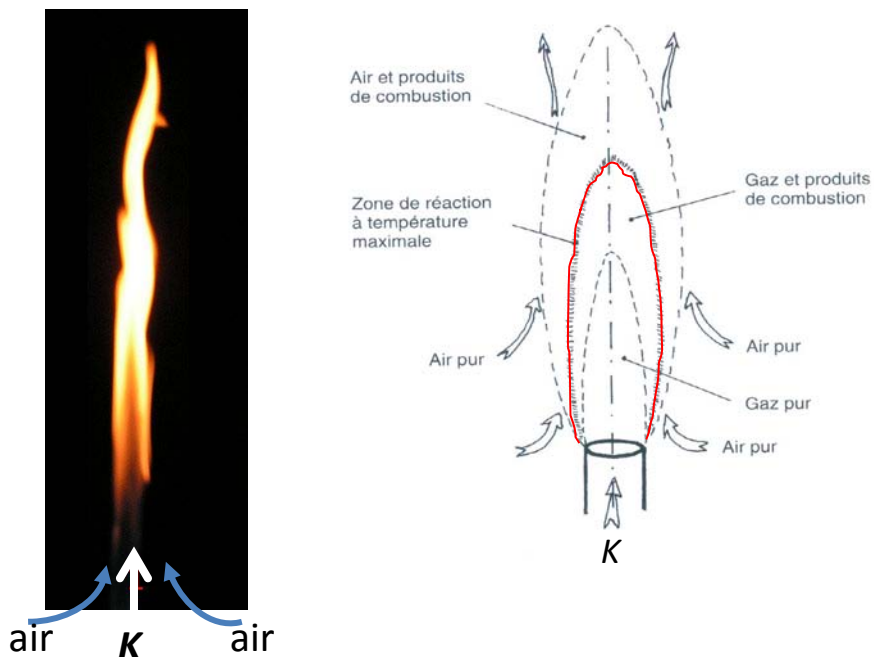
La flamme de diffusion est contrôlée par le mélange entre *air* et *K*.

La richesse varie à la traversée de la flamme:

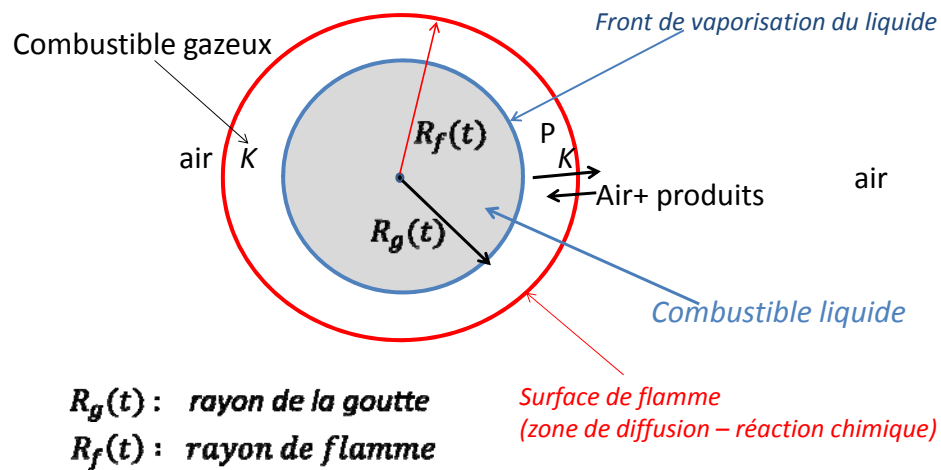


29

Flamme de diffusion (non prémélangée)



*Flamme de diffusion en milieu diphasique :
Combustion d'une goutte de combustible dans l'air*



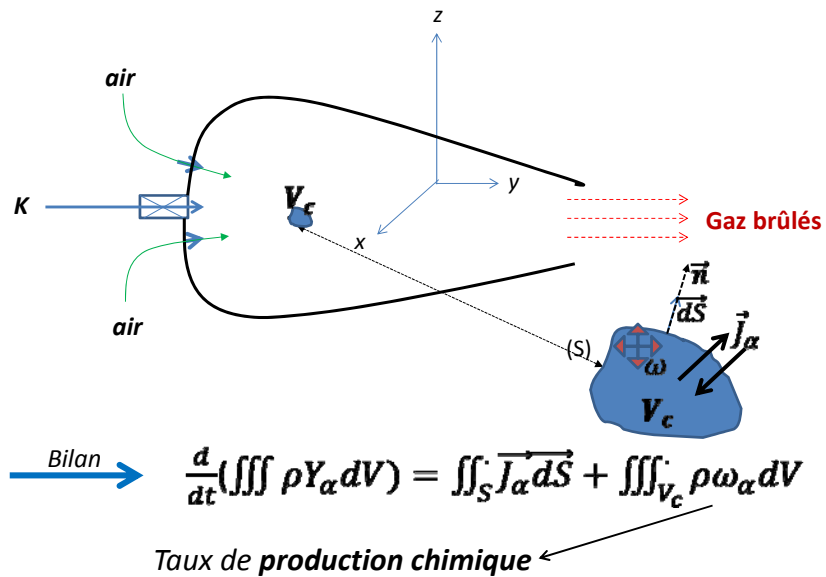
31

Bilan de masse pour un **milieu gazeux**
multi-composants

(mélange de N espèces chimique α, β, \dots)

32

Bilan de masse pour l'espèce α dans le volume V_c



33

- Taux de production chimique ω_α ($\alpha = 1, N$)

pour un mélange de N espèces chimiques

ω_α est le **taux de production chimique** de l'espèce α :

soit la masse de l'espèce α créée ou détruite par unité de temps et de masse totale, par les réactions chimiques

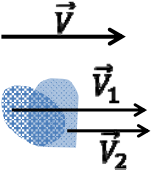
$\omega_\alpha > 0 \rightarrow$ création
 $\omega_\alpha < 0 \rightarrow$ destruction

34

Transport convectif et moléculaire.

Expression des flux \vec{j}_α ($\alpha = 1, N$)

$$\vec{j}_\alpha = \rho \vec{V}_\alpha Y_\alpha = \rho \vec{V} Y_\alpha + \rho (\vec{V}_\alpha - \vec{V}) Y_\alpha$$



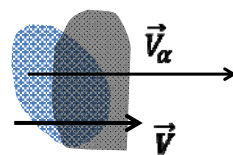
Vitesse de diffusion
 Transport moléculaire (diffusion)
 Convection par l'écoulement moyen (mélange)
 Loi de Fick

35

Loi de Fick pour un mélange binaire

$$\rho (\vec{V}_\alpha - \vec{V}) Y_\alpha \approx -\rho D_\alpha \vec{\nabla} Y_\alpha$$

D_α : coefficient de diffusion de l'espèce α dans le reste du mélange



(mélange des N-1 espèces restantes)

Exemple: Pour un mélange K + air (pauvre): L'air est l'espèce majoritaire

D_K \approx coefficient de diffusion de K dans l'air

D_{O_2} \approx coefficient de diffusion de O2 dans l'air

D_{CO_2} \approx coefficient de diffusion de K dans l'air

etc..

36

Bilan de masse pour l'espèce α : équation locale

$$\iint_S \vec{J}_\alpha d\vec{S} = \iiint_{V_c} \text{div} \vec{J}_\alpha dV \quad (\text{théorème de Green})$$



Bilan sur le volume V_c :

$$\frac{d}{dt} \iiint_{V_c} \rho Y_\alpha dV_c + \iiint_{V_c} \text{div}(\rho \vec{V} Y_\alpha + \vec{J}_\alpha) dV_c = \iiint_{V_c} \rho \omega_\alpha dV_c$$



Equation locale (valable en un point M quelconque) :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_\alpha) + \text{div}(\rho \vec{V} Y_\alpha - \rho D_\alpha \vec{V} Y_\alpha) = \rho \omega_\alpha, \quad \alpha = 1, N$$

Bilan de la masse totale

Propriétés: $\sum_\alpha Y_\alpha = 1 \quad \sum_\alpha \omega_\alpha = 0$

$$\rho \vec{V}(M, t) = \sum_\alpha Y_\alpha \vec{V}_\alpha \quad \longrightarrow \quad \sum_\alpha \vec{J}_\alpha = 0$$

$$\longrightarrow \sum_\alpha \left\{ \frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_\alpha) + \text{div}(\rho \vec{V} Y_\alpha) + \text{div}(\vec{J}_\alpha) \right\} = \sum_\alpha \rho \omega_\alpha = 0$$



$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div} \rho \vec{V} = 0$$

(Équation de continuité)

- *Bilan d'énergie*

- On suppose que l'élévation de la température du mélange est due uniquement aux réactions chimiques (globalement exothermiques).
 - On suppose de plus qu'il n'y a pas de pertes thermiques (système **adiabatique**).
- On montre alors que, pour un système **isobare et stationnaire**, l'enthalpie est solution de l'équation de bilan suivante:

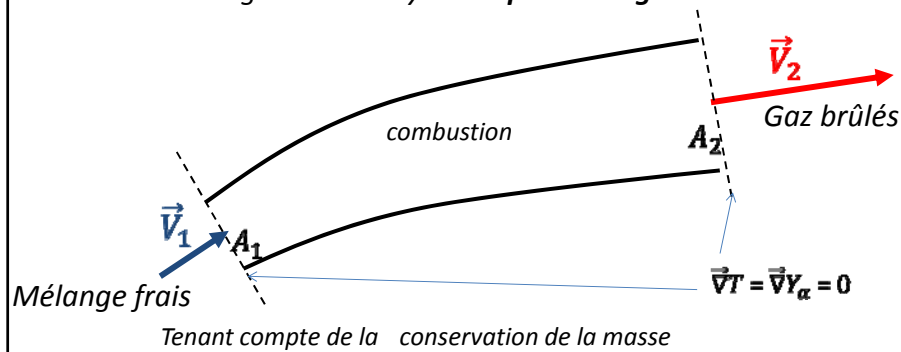
$$\text{div}[\rho \vec{V} h + \frac{\lambda}{\bar{C}_p} \vec{\nabla} h] = 0$$

λ : coefficient de conductivité thermique du mélange



39

- *Bilan d'énergie dans un système **prémélangé** stationnaire*



Tenant compte de la conservation de la masse

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

$$\Rightarrow \rho_1 V_1 A_1 = \rho_2 V_2 A_2$$

L'intégration de l'équation précédente entre les sections {1} et {2} conduit à :

$$h = h_1 = h_2$$

40

Equation d'état du mélange de gaz

nombre de moles du mélange par unité de masse : $\frac{n}{m} = \sum_{\alpha} \frac{Y_{\alpha}}{M_{\alpha}}$

→ Equation d'état des gaz parfaits :

$$p(\vec{x}, t) = \rho R T \sum_{\alpha} \frac{Y_{\alpha}}{M_{\alpha}}$$

Approximation isobare ($M_{\alpha} \ll 1$) :



$$\rho R T \sum_{\alpha} \frac{Y_{\alpha}}{M_{\alpha}} = p_0 = \text{Cst}$$

41

Formulation générale de la température adiabatique de combustion T_{ad}

La température adiabatique est la température des produits de combustion d'un système réactif prémélangé évoluant à **enthalpie constante**. Elle dépend de la composition (richesse) et de la température du mélange frais)

$$\int_{T_0}^{T_r} \bar{c}_p dT + \sum_{\alpha} Q_{\alpha} Y_{\alpha r} = \int_{T_0}^{T_{ad}} \bar{c}_p dT + \sum_{\alpha} Q_{\alpha} Y_{\alpha b}$$



$$\int_{T_r}^{T_{ad}} \bar{c}_p dT = \sum_{\alpha} Q_{\alpha} (Y_{\alpha r} - Y_{\alpha b})$$

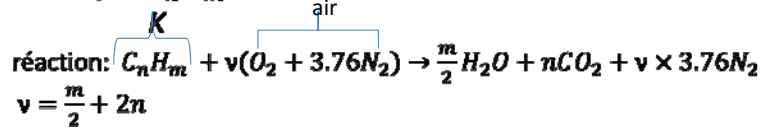
$Y_{\alpha r}$: composition du mélange frais

$Y_{\alpha b}$: composition des produits de combustion

42

Composition des gaz brûlés: cas d'une réaction globale

mélange $C_n H_m + \text{air}$



nombre de moles de $H_2 O$ formées/nombre de moles de combustible initiales = $\frac{m}{2}$

nombre de moles de CO_2 formées/nombre de moles de combustible initiales = n

$$\begin{aligned} Y_{H_2O,b} &= \frac{m}{2} \frac{M_{H_2O}}{M_K} Y_{K,0} \\ Y_{CO_2,b} &= n \frac{M_{CO_2}}{M_K} Y_{K,0} \end{aligned}$$

et :

$$\begin{cases} \varphi < 1 \rightarrow Y_{K,b} = 0, Y_{O_2,b} = 1 - Y_{CO_2,b} - Y_{H_2O,b} - Y_{N_2} \\ \varphi > 1 \rightarrow Y_{O_2,b} = 0, Y_{K,b} = 1 - Y_{CO_2,b} - Y_{H_2O,b} - Y_{N_2} \\ \varphi = 1 \rightarrow Y_{K,b} = 0, Y_{O_2,b} = 0 \end{cases}$$

43

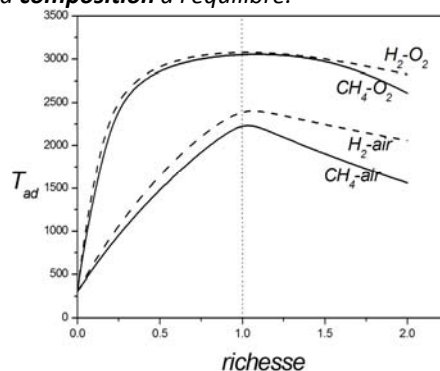
Température adiabatique de combustion T_{ad}

Remarque : $T_{ad} \equiv T_{eq}$

eq : équilibre chimique correspondant à l'état final du processus réactionnel

- Pour une réaction globale irréversible, la composition des produits brûlés (à l'équilibre) se déduit immédiatement de l'état final, en mélange riche ou pauvre.
- S'il y a de nombreuses réactions chimiques réversibles, il faut des équations supplémentaires pour déterminer la **composition** à l'équilibre.

Exemples de calcul de température adiabatique de combustion, utilisant un schéma cinétique détaillé (Cf. le chapitre suivant)



Cinétique chimique de la combustion

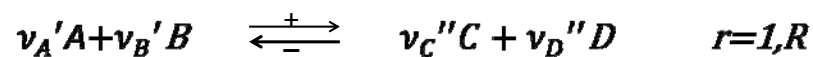
- *Expressions des taux de production chimiques ω_α*
- *Mécanismes réactionnels moléculaires*

45

Evaluation des taux de production chimique ω_α

$\rho\omega_\alpha$: masse de l'espèce α créée ou détruite par unité de temps et de volume, par l'ensemble des réactions chimiques en présence dans le milieu

*On décrit la cinétique chimique comme constituée de R réactions **moléculaires** de la forme générale:*



- + : sens direct
- : sens inverse

ν_α' coefficients stoechiométriques à gauche
 ν_α'' coefficients stoechiométriques à droite

46

Evaluation des taux de production chimique ω_α

Par la réaction (r) :

$$\rho\omega_\alpha = M_\alpha(v_{\alpha r}'' - v_{\alpha r}')W_r \quad \alpha = A, B, C, D$$

Par l'ensemble des réactions ($r=1, R$) :

$$\rho\omega_\alpha = \sum_{r=1}^R M_\alpha(v_{\alpha r}'' - v_{\alpha r}')W_r \quad \alpha = A, B, C, D$$

Expression du **taux de réaction** W_r donné par la Loi d'Arrhénius:

$$W_r = k^+ C_A^{v_A'} C_B^{v_B'} \exp\left(-\frac{E^+}{RT}\right) - k^- C_C^{v_C''} C_D^{v_D''} \exp\left(-\frac{E^-}{RT}\right)$$

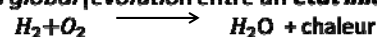
- E^\pm : énergies d'activation, sens direct et inverse
- k^\pm : facteurs pré-exponentiels, sens direct et inverse

47

Exemple de schéma réactionnel : H_2 -air

En 1^{re} approximation l'azote de l'air est considéré comme un gaz inerte

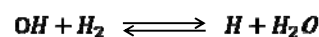
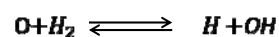
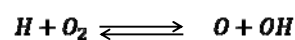
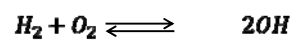
1- Schéma global (évolution entre un état initial et un état final):



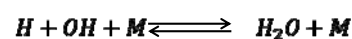
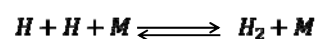
2- Schéma réel (cinétique détaillée)

espèces principales: H_2, O_2, H_2O

espèces radicalaires : O, H, OH



réactions bi-moléculaires



réactions tri-moléculaires

48

Taux de réaction pour le schéma réactionnel : H₂-air

- Réactions bi-moléculaires :

$$\begin{aligned}
 W_1 &= k_1^+ C_{H_2} C_{O_2} \exp\left(-\frac{E_1^+}{RT}\right) - k_1^- C_{OH} C_{OH} \exp\left(-\frac{E_1^-}{RT}\right) \\
 W_2 &= k_2^+ C_H C_{O_2} \exp\left(-\frac{E_2^+}{RT}\right) - k_2^- C_O C_{OH} \exp\left(-\frac{E_2^-}{RT}\right) \\
 W_3 &= k_3^+ C_{H_2} C_O \exp\left(-\frac{E_3^+}{RT}\right) - k_3^- C_H C_{OH} \exp\left(-\frac{E_3^-}{RT}\right) \\
 W_4 &= k_4^+ C_{OH} C_{H_2} \exp\left(-\frac{E_4^+}{RT}\right) - k_4^- C_H C_{H_2O} \exp\left(-\frac{E_4^-}{RT}\right)
 \end{aligned}$$

- Réactions tri-moléculaires :

$$\begin{aligned}
 W_5 &= k_5^+ C_H C_H C_M \exp\left(-\frac{E_5^+}{RT}\right) - k_5^- C_{H_2} C_M \exp\left(-\frac{E_5^-}{RT}\right) \\
 W_6 &= k_6^+ C_H C_{OH} C_M \exp\left(-\frac{E_6^+}{RT}\right) - k_6^- C_{H_2O} C_M \exp\left(-\frac{E_6^-}{RT}\right)
 \end{aligned}$$

49

Exemple de données pour les constantes cinétiques :

Mécanisme de Jachimowski pour la combustion d'un mélange H₂-air

Mécanisme cinétique à 7 réactions et 6 espèces réactives

Espèces réactives :

H₂, O₂, H₂O, OH, H et O

Constantes de la loi d'Arrhénius :

Réactions	Sens Direct			Sens Inverse		
	Coef. (A)	Exp. (b)	T ^o Act. (T _a)	Coef. (A)	Exp. (b)	T ^o Act. (T _a)
H ₂ + O ₂ → 2 OH	1,70E+07	0	2,4248E+04	2,7842E+04	0,3607	1,4629E+04
H ₂ + OH → H ₂ O + H	3,16E+01	1,8	1,5259E+03	8,9534E+02	1,5723	9,3467E+03
OH + H + M → H ₂ O + M	2,21E+10	-2	0	4,7292E+04	1,3131	5,0912E+04
2 OH → H ₂ O + O	5,50E+08	0	1,5107E+03	2,7972E+10	-0,2004	1,0486E+04
2 H + M → H ₂ + M	6,53E+05	-1	0	6,1603E+04	0,9647	4,7207E+04
H ₂ + O → OH + H	2,07E+08	0	6,9242E+03	1,1531E+08	-0,0273	5,7695E+03
O ₂ + H → OH + O	1,42E+08	0	8,2587E+03	4,1703E+05	0,3905	-2,0517E+02

50

Schéma réactionnel (réactions en chaîne)

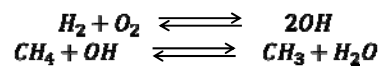
Ensemble des réactions chimiques élémentaires, bi ou tri-moléculaires réversibles dont le mélange gazeux est le siège.

On peut caractériser 3 étapes principales dans la chaîne :

1- initiation de chaîne

Ces réactions cassent les molécules de combustible et air pour former des radicaux

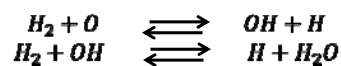
Exemples :



2- branchement-propagation de chaîne

Caractérisées par de **grandes énergies d'activation E**
(produisent et propagent les radicaux)

Exemples:



51

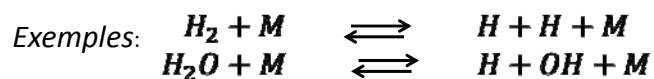
3- dissociation – recombinaison

-Réactions à faibles énergies d'activation

En général réactions tri-moléculaires faisant intervenir un « 3^e corps » *M*

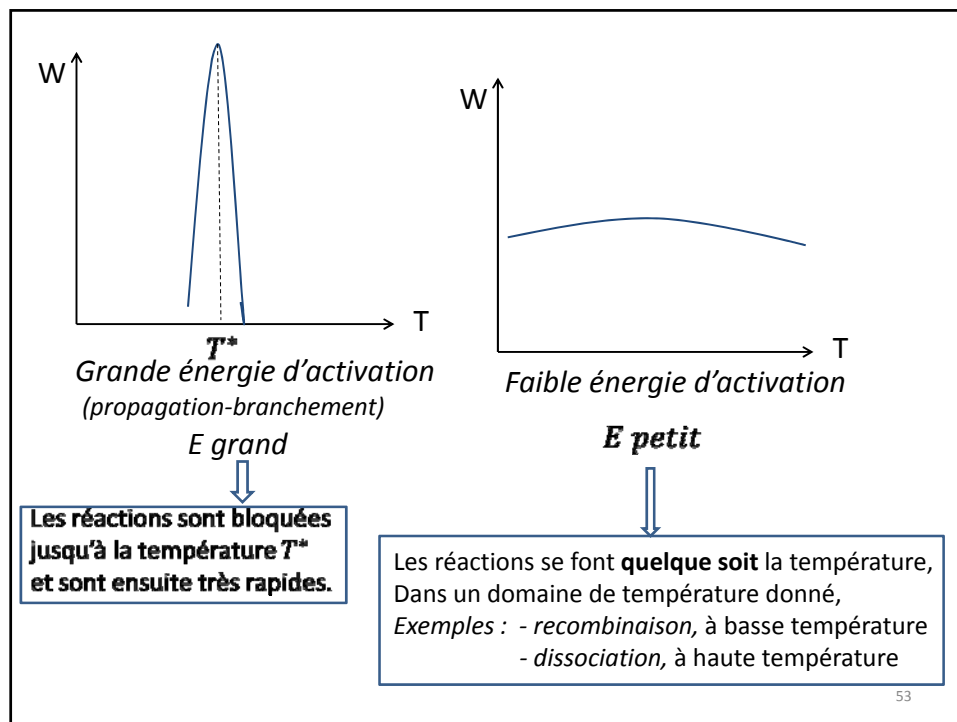
-Réactions **exothermiques** dans le sens de la recombinaison
et **endothermiques** dans le sens de la dissociation (sens +)

Le phénomène de dissociation se produit donc principalement à haute température



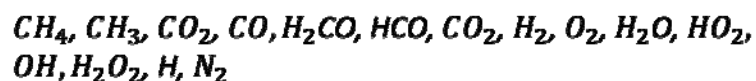
M correspond à l'ensemble des espèces du mélange qui favorisent la réaction par **chocs élastiques**.

52

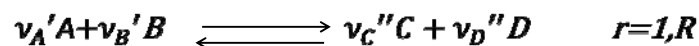


Exemple de schéma réactionnel pour l'hydrocarbure le plus simple:
le **méthane (1)**

- Cas d'un **mélange pauvre** CH_4 -air sans dissociation de l'azote de l'air:
- soit 14 espèces :



- 24 réactions chimiques bi et tri-moléculaires de la forme (r):



$$W_r = A_{rf} C_A^{\nu_A''} C_B^{\nu_B''} T^{Bf} \exp\left(-\frac{E_f}{RT}\right) - A_{rb} C_C^{\nu_C''} C_D^{\nu_D''} T^{Bb} \exp\left(-\frac{E_b}{RT}\right)$$

54

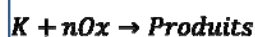
Exemple de schéma cinétique pour un mélange pauvre de méthane et d'air (2)

(Units for rate constants tabulated here are in °K, cm³, mole, sec, gm.) The backward rate constant for each of the reactions marked with an asterisk (*), in the table below, was calculated by the authors using the forward rate constant given in the literature cited and the equilibrium rate constant K_{eq} tabulated in JANAF tables. Stull *et al.* (1965).

<i>j</i>	Reaction	A_{if}	B_{if}	E_{if}	Temp (°K)†	A_{ib}	B_{ib}	E_{ib}	Temp (°K)†	Source (Ref.)	Phase
I	$\text{CH}_4 + \text{OH} \rightleftharpoons \text{CH}_3 + \text{H}_2\text{O}$	5.0×10^{13}	0	-9.9×10^3	300-2500	8.52×10^{13}	0	-2.696×10^4	300-2500	Frist. & West.	
II	$\text{CH}_4 + \text{H} \rightleftharpoons \text{CH}_3 + \text{H}_2$	5.0×10^{13}	0	-1.35×10^4	300-2500	1.8×10^{13}	0	-1.538×10^4	300-2500	Frist. & West.	
III*	$\text{CH}_4 + \text{O} \rightleftharpoons \text{CH}_3 + \text{OH}$	1.0×10^{13}	0	-8.06×10^3	—	1.546×10^{13}	0	-8.067×10^3	—	Sawyer <i>et al.</i>	Phase (i) CH ₄ Dis-
IV*	$\text{CH}_4 \rightleftharpoons \text{CH}_3 + \text{H}$	1.0×10^{13}	0	-8.5×10^3	1098-1720	1.026×10^{13}	0	$+1.698 \times 10^4$	1090-1720	Palmer <i>et al.</i>	appearance
V*	$\text{CH}_4 + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{CH}_3 + \text{HO}_2$	1.0×10^{14}	0	-5.5×10^4	—	1.479×10^{13}	0	$+2.687 \times 10^3$	—	Frist. & West.	
VI*	$\text{CH}_4 + \text{HO}_2 \rightleftharpoons \text{CH}_3 + \text{H}_2\text{O}_2$	1.0×10^{10}	0	0	—	8.569×10^8	0	$+1.3 \times 10^4$	—	Sawyer <i>et al.</i>	
VII*	$\text{CH}_3 + \text{O} \rightleftharpoons \text{H}_2\text{CO} + \text{H}$	1.9×10^{13}	0	0	1203-1900	2.326×10^{13}	0	-6.701×10^3	1233-1933	Sawyer <i>et al.</i>	
VIII*	$\text{CH}_3 + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{H}_2\text{CO} + \text{OH}$	1.0×10^{11}	0	0	—	8.453×10^{10}	0	-5.055×10^3	—	Frist. & West.	Phase (ii) CO
IX	$\text{H}_2\text{CO} + \text{OH} \rightleftharpoons \text{HCO} + \text{H}_2\text{O}$	2.4×10^{11}	0	-1.0×10^3	300-2500	9.3×10^{10}	0	-4.422×10^3	1000-2500	Frist. & West.	Production
X*	$\text{HCO} + \text{OH} \rightleftharpoons \text{CO} + \text{H}_2\text{O}$	5.39×10^{12}	-0.5	-5.04×10^3	—	1.174×10^{14}	-0.5	-9.139×10^3	—	Sawyer <i>et al.</i>	
XI	$\text{CO} + \text{OH} \rightleftharpoons \text{CO}_2 + \text{H}$	7.1×10^{12}	0	-7.7×10^3	—	8.6×10^{14}	0	-2.983×10^3	1000-2500	Frist. & West.	Phase (iii) CO
XII	$\text{H}_2 + \text{OH} \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O} + \text{H}$	2.19×10^{13}	0	-5.15×10^3	300-3000	8.41×10^{13}	0	-2.01×10^4	300-3000	Baulch/2	
XIII	$\text{H} + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{O} + \text{OH}$	2.24×10^{14}	0	-1.68×10^4	300-3000	1.3×10^{13}	0	0	303-1500	Baulch/3	Branching
XIV	$\text{H}_2 + \text{O} \rightleftharpoons \text{H} + \text{OH}$	1.74×10^{13}	0	-9.45×10^3	400-3000	7.33×10^{12}	0	-7.3×10^3	400-3000	Baulch/2	mainly during phase (ii)
XV	$\text{H}_2\text{O} + \text{O} \rightleftharpoons \text{OH} + \text{OH}$	5.75×10^{13}	0	-1.8×10^4	300-3000	5.75×10^{12}	0	-7.8×10^3	300-3000	Baulch/2	
XVI	$\text{H} + \text{H} + \text{M} \rightleftharpoons \text{H}_2 + \text{M}$	5.8×10^{18}	-1.15	0	1330-1560	3.7×10^{14}	0	-9.736×10^3	1330-1560	Jenkins <i>et al.</i>	
XVII	$\text{O} + \text{O} + \text{M} \rightleftharpoons \text{O}_2 + \text{M}$	4.7×10^{15}	-0.28	0	1330-1560	5.1×10^{15}	0	-1.15×10^5	1330-1560	Jenkins <i>et al.</i>	
XVIII	$\text{O} + \text{H} + \text{M} \rightleftharpoons \text{OH} + \text{M}$	5.3×10^{15}	0	$+2.78 \times 10^3$	1330-1560	3.6×10^{15}	0	-9.637×10^3	1330-1560	Jenkins <i>et al.</i>	Radical re-
XIX	$\text{H} + \text{OH} + \text{M} \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O} + \text{M}$	1.2×10^{17}	0	$+5.0 \times 10^3$	1330-1560	9.2×10^{17}	0	-1.177×10^5	1330-1560	Jenkins <i>et al.</i>	combination
XX	$\text{H} + \text{O}_2 + \text{M} \rightleftharpoons \text{HO}_2 + \text{M}$	1.59×10^{15}	0	$+1.0 \times 10^3$	300-2000	2.4×10^{15}	0	-4.59×10^3	300-2000	Baulch/3	mainly during phase (iii)
XXI	$\text{H}_2\text{O}_2 + \text{M} \rightleftharpoons \text{OH} + \text{OH} + \text{M}$	3.2×10^{18}	0	-4.3×10^4	950-1450	6.5×10^{14}	0	$+4.9 \times 10^3$	500-1000	Meyer <i>et al.</i>	
XXII*	$\text{HO}_2 + \text{HO}_2 \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O}_2 + \text{O}_2$	4.57×10^{14}	0	-1.345×10^4	300-1500	2.45×10^{15}	0	-5.564×10^3	300-1500	Watson	
XXIII	$\text{H}_2\text{O}_2 + \text{H} \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O} + \text{OH}$	3.18×10^{14}	0	-9.0×10^3	500-1000	5.6×10^{13}	0	-7.79×10^3	500-1000	Baulch/3	Branching
XXIV	$\text{O}_2 + \text{H}_2 \rightleftharpoons \text{OH} + \text{OH}$	8.0×10^{14}	0	-4.5×10^4	1330-1560	2.0×10^{13}	0	-2.5×10^4	1330-1560	Jenkins <i>et al.</i>	mainly during phase (ii)

Schémas cinétiques globaux pour les hydrocarbures lourds

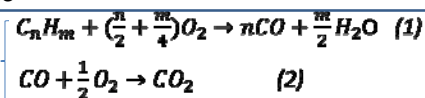
- 1 réaction irréversible



$$W = kC_K^a C_{\text{Ox}}^b T^a \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) \quad [\text{moles} - \text{cm}^{-3} - \text{s}^{-1}]$$

Exemple du kérozène: $\text{C}_{10}\text{H}_{22} + \frac{31}{2}\text{O}_2 \rightarrow 10\text{CO}_2 + 11\text{H}_2\text{O}$
 $k=3.8 \cdot 10^{11}$ $E = 30 \text{ kcal/môle}$ $a=0.25$ $b=1.5$

- 2 réactions irréversibles



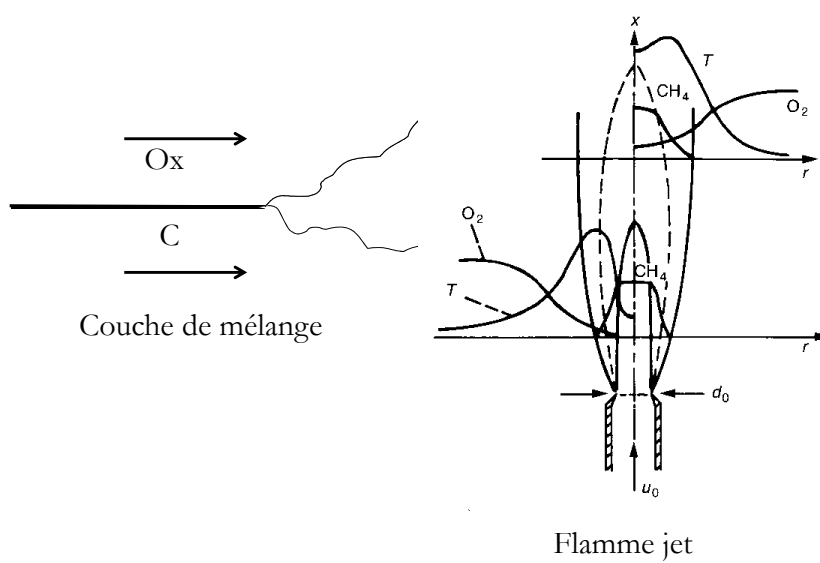
$$W_1 = k_1 C_K^{a1} C_{\text{O}_2}^{b1} \exp\left(-\frac{E_1}{RT}\right) \quad W_2 = k_2 C_{\text{CO}}^{a2} C_{\text{O}_2}^{b2} C_{\text{H}_2\text{O}}^{c2} \exp\left(-\frac{E_2}{RT}\right)$$

Exemple du kérozène: $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$
 $k_1=4.7 \cdot 10^{11}$ $E_1 = 30 \text{ kcal/môle}$ $a_1=0.25$ $b_1=1.5$
 $k_2=14.6$ $E_2 = 40 \text{ kcal/môle}$ $a_2=1.0$ $b_2=0.25$ $c_2=0.5$

56

57

Flammes laminaires de diffusion



58

$$\frac{\partial \rho Y_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j Y_\alpha}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D_\alpha \frac{\partial Y_\alpha}{\partial x_j} \right) + \omega_\alpha$$

$$\tau_{ch} = [A(T) \exp(-E/RT)]^{-1}$$

$$\rho D \frac{\partial^2 Y}{\partial x^2} \sim \frac{\rho Y}{\tau_{ch}}$$

$$\frac{D}{l_{ch}^2} \sim \frac{1}{\tau_{ch}}$$

$$l_{ch}^2 \sim D \tau_{ch}$$

$$l_{ch} \sim \sqrt{D \tau_{ch}} \sim \sqrt{\nu \tau_{ch}} \sim \sqrt{\frac{\lambda}{\rho c_p} \tau_{ch}}$$

ρ : masse volumique

D : coefficient de diffusion

λ : conductivité thermique

Y : fraction massique

c_p : chaleur spécifique à pression constante

l_{ch} : longueur caractéristique de la chimie

τ_{ch} : temps caractéristique de la chimie

ν : viscosité cinématique : $\nu = \mu / \rho$

59

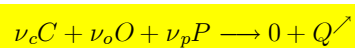
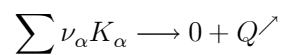
Hypothèse de Burke-Schumann

Chimie infiniment rapide (flamme infiniment mince)

$$\tau_{mec} \gg \tau_{ch}$$

Flamme laminaire de diffusion

Cinétique de combustion : une seule réaction globale irréversible



ν_c, ν_{O_2}, ν_p : coefficients

Stœchiométriques molaires

$$V_r = \frac{1}{\nu_\alpha} \frac{dC_\alpha}{dt} = A(T) e^{(-E/RT)} C_O^{n_O} C_C^{n_C}$$

Vitesse de la réaction
en mole/m³/s

60

$A(T)$: facteur pré-exponentiel

E : l'énergie d'activation.

C_O et C_C : concentrations de l'oxydant et du carburant

n_O et n_C : les ordres partiels de la réaction par rapport à l'oxydant et au carburant.

$$PV = NRT \quad P_\alpha V = x_\alpha RT \quad \Rightarrow P_\alpha = X_\alpha P$$

$$C_\alpha = \frac{x_\alpha}{V} \quad P_\alpha = C_\alpha RT \quad C_\alpha = X_\alpha \frac{P}{RT}$$

$$Y_\alpha = X_\alpha \frac{\mathcal{M}_\alpha}{\mathcal{M}}$$

$$C_\alpha = \frac{Y_\alpha \mathcal{M} P}{\mathcal{M}_\alpha RT} = \frac{\rho Y_\alpha}{\mathcal{M}_\alpha}$$

61

$$\omega_\alpha = \mathcal{M}_\alpha \frac{dC_\alpha}{dt} = \nu_\alpha V_r \mathcal{M}_\alpha \quad \text{Taux de production chimique d'une espèce } \alpha \text{ en kg/m}^3/\text{s}$$

$$V_r = \frac{\omega_o}{\nu_o \mathcal{M}_o} = \frac{\omega_c}{\nu_c \mathcal{M}_c} = \frac{\omega_p}{\nu_p \mathcal{M}_p}$$

$$V_r = A(T) e^{(-E/RT)} \left(\frac{\rho Y_O}{\mathcal{M}_O} \right)^{n_O} \left(\frac{\rho Y_C}{\mathcal{M}_C} \right)^{n_C}$$

$$\omega_\alpha = \nu_\alpha \mathcal{M}_\alpha A(T) \left(\frac{\rho Y_O}{\mathcal{M}_O} \right)^{n_O} \left(\frac{\rho Y_C}{\mathcal{M}_C} \right)^{n_C} e^{(-E/RT)}$$

62

Hypothèses :

- $M \ll 1$ (vitesse de l'écoulement \ll célérité du son),
- l'écoulement est laminaire,
- $c_{p\alpha} = c_p$ indépendant de la température,
- un nombre de Lewis égal à l'unité ($\mathcal{L}_e = \frac{\lambda}{\rho c_p D} = 1$)

Dans ce qui suit on fait l'hypothèse d'un régime permanent $\frac{\partial g}{\partial t} = 0$

63

Continuité

$$\frac{\partial \rho u_j}{\partial x_j} = 0$$

Quantité de mouvement

$$\frac{\partial \rho u_j u_i}{\partial x_j} = \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_i} - \frac{\partial p}{\partial x_i}$$

Fraction massique d'une espèce α

$$\frac{\partial \rho u_j Y_\alpha}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D_\alpha \frac{\partial Y_\alpha}{\partial x_j} \right) + \omega_\alpha \quad \alpha = O, C, P$$

64

Enthalpie

$$\frac{\partial \rho u_j h}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D \frac{\partial h}{\partial x_j} \right)$$

$$h = \int_{T^*}^T c_p dT + \sum_{\alpha=1}^N Y_{\alpha} h_{\alpha,F}^* ; \quad c_p = \sum_{\alpha=1}^N c_{p,\alpha} Y_{\alpha}$$

$$h = c_p (T - T^*) + \sum_{\alpha=1}^N Y_{\alpha} h_{\alpha,F}^*$$

65

$$V_r = \frac{\omega_o}{\nu_o \mathcal{M}_o} = \frac{\omega_c}{\nu_c \mathcal{M}_c} = \frac{\omega_p}{\nu_p \mathcal{M}_p}$$

Soit l'opérateur

$$\mathcal{L}(\bullet) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho u_j \bullet - \rho D \frac{\partial \bullet}{\partial x_j} \right)$$

$$\mathcal{L}(Y_o) = \omega_o = \nu_o \mathcal{M}_o V_r$$

$$\mathcal{L}(Y_c) = \omega_c = \nu_c \mathcal{M}_c V_r$$

$$\mathcal{L} \left(\frac{Y_c \nu_o \mathcal{M}_o}{\nu_c \mathcal{M}_c} \right) = \nu_o \mathcal{M}_o V_r$$

66

$$\phi = Y_o - sY_c$$

Variable de Schvab-Zeldovitch

$$s = \frac{\nu_o \mathcal{M}_o}{\nu_c \mathcal{M}_c}$$

Coefficient stœchiométrique massique

$$\mathcal{L}(\phi) = 0$$

$$\phi_{o,\infty} = Y_{o,\infty}$$

Oxydant pur

$$\phi_{c,0} = -sY_{c,0}$$

Carburant pur

67

Fraction de mélange Z – Grandeurs instantanées

$$Z = \frac{\phi - \phi_{o,\infty}}{\phi_{c,0} - \phi_{o,\infty}} = \frac{sY_c - Y_o + Y_{o,\infty}}{sY_{c,0} + Y_{o,\infty}}$$

à la stœchiométrie $Y_o \equiv Y_c \equiv 0 \Rightarrow \phi = 0$

$$Z_{st} = -\frac{\phi_{o,\infty}}{\phi_{c,0} - \phi_{o,\infty}} = \frac{Y_{o,\infty}}{sY_{c,0} + Y_{o,\infty}}$$

$$Z = Z_{st} + \frac{\phi}{\phi_{c,0} - \phi_{o,\infty}}$$

$$\phi = (Z - Z_{st})(\phi_{c,0} - \phi_{o,\infty})$$

68

$$-\phi_{o,\infty} = Z_{st}(\phi_{c,0} - \phi_{o,\infty}) \quad \phi_{c,0} - \phi_{o,\infty} = -\frac{\phi_{o,\infty}}{Z_{st}}$$

$$\phi = -\frac{\phi_{o,\infty}}{Z_{st}}(Z - Z_{st}) = \phi_{o,\infty} \left(1 - \frac{Z}{Z_{st}}\right) \quad \text{en fonction de } \phi \text{ côté Oxydant pur}$$

$$\phi_{c,0} = \phi_{o,\infty} - \frac{\phi_{o,\infty}}{Z_{st}} = \frac{-\phi_{o,\infty}}{Z_{st}}(1 - Z_{st}) \quad -\frac{\phi_{o,\infty}}{Z_{st}} = \frac{\phi_{c,0}}{1 - Z_{st}}$$

$$\phi = -\frac{\phi_{o,\infty}}{Z_{st}}(Z - Z_{st}) = \phi_{c,0} \frac{Z - Z_{st}}{1 - Z_{st}} \quad \text{en fonction de } \phi \text{ côté Carburant pur}$$

$$\phi = \phi_{o,\infty} \left(1 - \frac{Z}{Z_{st}}\right) = \phi_{c,0} \frac{Z - Z_{st}}{1 - Z_{st}}$$

69

Fraction massique

donc si :

$$Z \leq Z_{st} \Rightarrow Y_c = 0 \Rightarrow \phi = Y_o = \phi_{o,\infty} \left(1 - \frac{Z}{Z_{st}}\right) = Y_{o,\infty} \left(1 - \frac{Z}{Z_{st}}\right)$$

$$Z > Z_{st} \Rightarrow Y_o = 0 \Rightarrow \phi = -sY_c = \phi_{c,0} \frac{Z - Z_{st}}{1 - Z_{st}} = -sY_{c,0} \frac{Z - Z_{st}}{1 - Z_{st}}$$

$$Z \leq Z_{st} \begin{cases} Y_C = 0 \\ Y_O = Y_{O,\infty} \left(1 - \frac{Z}{Z_{st}}\right) \end{cases}$$

$$Z > Z_{st} \begin{cases} Y_C = Y_{C,0} \frac{Z - Z_{st}}{1 - Z_{st}} \\ Y_O = 0 \end{cases}$$

70

Température

(à partir de l'équation de l'enthalpie)

$$\frac{\partial \rho u_j c_p T}{\partial x_j} + \frac{\partial \rho u_j \sum Y_\alpha h_{\alpha,F}^*}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D \frac{\partial c_p T}{\partial x_j} \right) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D \frac{\partial \sum Y_\alpha h_{\alpha,F}^*}{\partial x_j} \right)$$

$$\frac{\partial \rho u_j \sum Y_\alpha h_{\alpha,F}^*}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D \frac{\partial \sum Y_\alpha h_{\alpha,F}^*}{\partial x_j} \right) + \sum h_{\alpha,F}^* \omega_\alpha$$

$$\frac{\partial \rho u_j c_p T}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D \frac{\partial c_p T}{\partial x_j} \right) - \sum h_{\alpha,F}^* \omega_\alpha$$

$$- \sum h_{\alpha,F}^* \omega_\alpha = -V_r \sum \nu_\alpha \mathcal{M}_\alpha h_{\alpha,F}^* = V_r Q \quad \nu_c C + \nu_o O + \nu_p P \longrightarrow 0 + Q'$$

$$\frac{\partial \rho u_j T}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) - \frac{\sum h_{\alpha,F}^* \omega_\alpha}{c_p}$$

Q(J, cal) chaleur de la réaction écrite**=enthalpie de formation des réactifs****- enthalpie de formation des produits**

$$Q = -\Delta_r H_F^*$$

71

$$\mathcal{L}(T) = \frac{V_r Q}{c_p} \quad \mathcal{L}(Y_\alpha) = V_r \nu_\alpha \mathcal{M}_\alpha \quad \mathcal{L}\left(\frac{Q}{c_p \nu_\alpha \mathcal{M}_\alpha} Y_\alpha\right) = \frac{V_r Q}{c_p}$$

$$\mathcal{L}\left(T - \frac{Q}{c_p \nu_\alpha \mathcal{M}_\alpha} Y_\alpha\right) = 0 \quad \text{On définit une variable du côté carburant :}$$

$$\phi_1 = T - \frac{Q}{c_p \nu_c \mathcal{M}_c} Y_c \quad \mathcal{L}(\phi_1) = 0$$

$$Z_1 = \frac{\phi_1 - \phi_{1o,\infty}}{\phi_{1c,0} - \phi_{1o,\infty}}$$

$$\phi_{1o,\infty} = T_{o,\infty} - \frac{Q Y_{c,\infty}}{c_p \nu_c \mathcal{M}_c} = T_{o,\infty}$$

$$Y_{c,\infty} = 0$$

$$\phi_{1c,0} = T_{c,0} - \frac{Q Y_{c,0}}{c_p \nu_c \mathcal{M}_c}$$

$$\text{si } T_{o,\infty} = T_{c,0} = T_f \Rightarrow$$

$$T = T_f - \frac{Q Y_{c,0}}{c_p \nu_c \mathcal{M}_c} Z_1 + \frac{Q}{c_p \nu_c \mathcal{M}_c} Y_c$$

$$\text{Du côté oxydant } (Y_c \equiv 0)$$

$$T = T_f - \frac{Q Y_{c,0}}{c_p \nu_c \mathcal{M}_c} Z_1$$

72

De même du côté oxydant

$$\mathcal{L}(\phi_2) = 0$$

$$\phi_2 = T - \frac{Q}{c_p \nu_o \mathcal{M}_o} Y_o$$

$$Z_2 = \frac{\phi_2 - \phi_{2o,\infty}}{\phi_{2c,0} - \phi_{2o,\infty}}$$

$$\phi_{2o,\infty} = T_{o,\infty} - \frac{Q Y_{o,\infty}}{c_p \nu_o \mathcal{M}_o}$$

$$\phi_{2c,0} = T_{c,0} - \frac{Q Y_{o,0}}{c_p \nu_o \mathcal{M}_o} = T_{c,0}$$

$$T = T_f - \frac{Q Y_{o,\infty}}{c_p \nu_o \mathcal{M}_o} (1 - Z_2) + \frac{Q}{c_p \nu_o \mathcal{M}_o} Y_o$$

La température du côté
carburant ($Y_o \equiv 0$) est
calculée par :

si $T_{o,\infty} = T_{c,0} = T_f \Rightarrow T = T_f - \frac{Q Y_{o,\infty}}{c_p \nu_o \mathcal{M}_o} (1 - Z_2)$

73

$$Z \leq Z_{st} \begin{cases} Y_C \equiv 0 \\ Y_O = Y_{O,\infty} \left(1 - \frac{Z}{Z_{st}}\right) \\ T = T_f - \frac{Q Y_{C,0}}{c_p \nu_c \mathcal{M}_c} Z \end{cases}$$

$$Z > Z_{st} \begin{cases} Y_O \equiv 0 \\ Y_C = Y_{C,0} \frac{Z - Z_{st}}{1 - Z_{st}} \\ T = T_f - \frac{Q Y_{o,\infty}}{c_p \nu_o \mathcal{M}_o} (1 - Z) \end{cases}$$

Si Z, Z_1, Z_2 ont les mêmes conditions
aux limites, alors pour un écoulement
permanent $Z = Z_1 = Z_2$

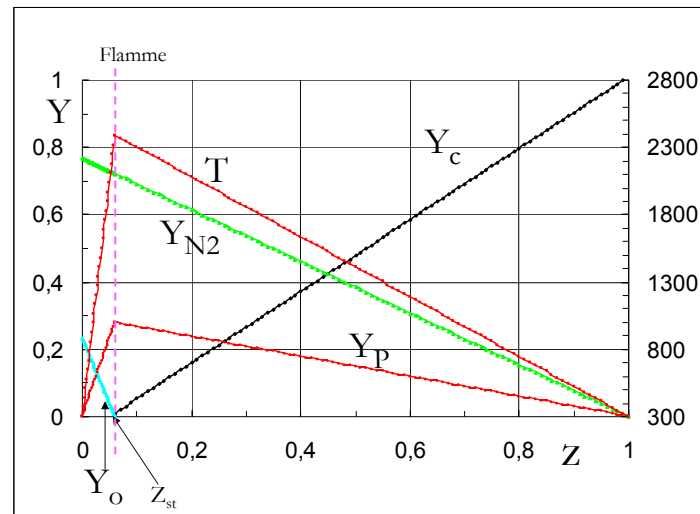
$$\mathcal{L}(Y_{N_2}) = 0$$

$$Z = \frac{Y_{N_2} - Y_{N_2,\infty}}{Y_{N_2,o} - Y_{N_2,\infty}}$$

$$Y_{N_2} = (Y_{N_2,o} - Y_{N_2,\infty}) Z + Y_{N_2,\infty}$$

$$Y_p = 1 - Y_c - Y_o - Y_{N_2}$$

74

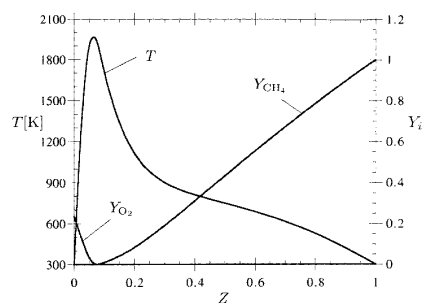


75

Cas d'une chimie complexe :

Mêmes hypothèses mais avec plusieurs réactions élémentaires réversibles. Chimie infiniment rapide mais limitée par l'équilibre chimique. Les fractions massiques sont calculées à l'équilibre chimiques.

T, P, richesse fixée : pour N espèces, M équations de bilan \Rightarrow **N-M équations**
Calcul d'équilibre chimique (Gaseq)

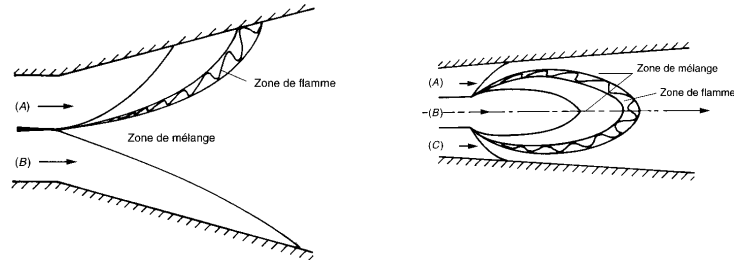


On montre la relation suivante entre la richesse et la fraction de mélange :

$$\varphi = \frac{Z(1-Z_{st})}{Z_{st}(1-Z)}$$

$$Y_{\alpha} = Y_{\alpha}^{eq}(Z)$$

76

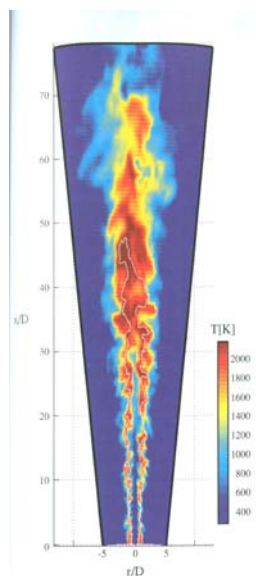


Flamme de diffusion en présence de parois

Si la flamme se développe près d'une paroi solide non adiabatique (par exemple une paroi à température fixée), la température et la fraction massique n'ont plus les mêmes conditions aux limites : $\left(\frac{\partial Y_\alpha}{\partial n}\right)_{\text{paroi}} = 0$ mais $\left(\frac{\partial T}{\partial n}\right)_{\text{paroi}} \neq 0$. Dans ce cas, une variable supplémen-

taire, par exemple l'enthalpie réduite ($Z_2 = \frac{h - h_{o,\infty}}{h_{c,0} - h_{o,\infty}}$) doit être introduite pour fermer le système.

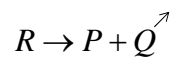
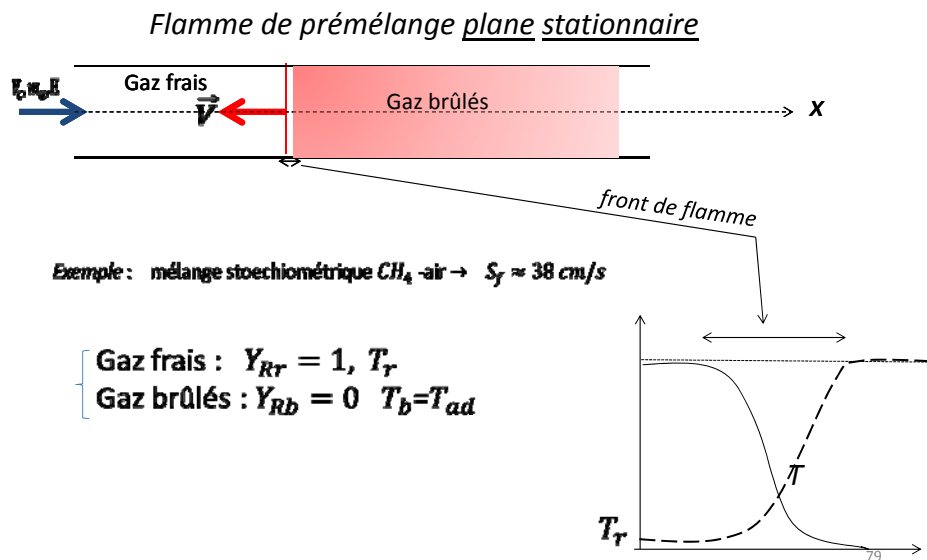
77



Flamme turbulente de diffusion

78

Flamme laminaire plane stationnaire de prémélange

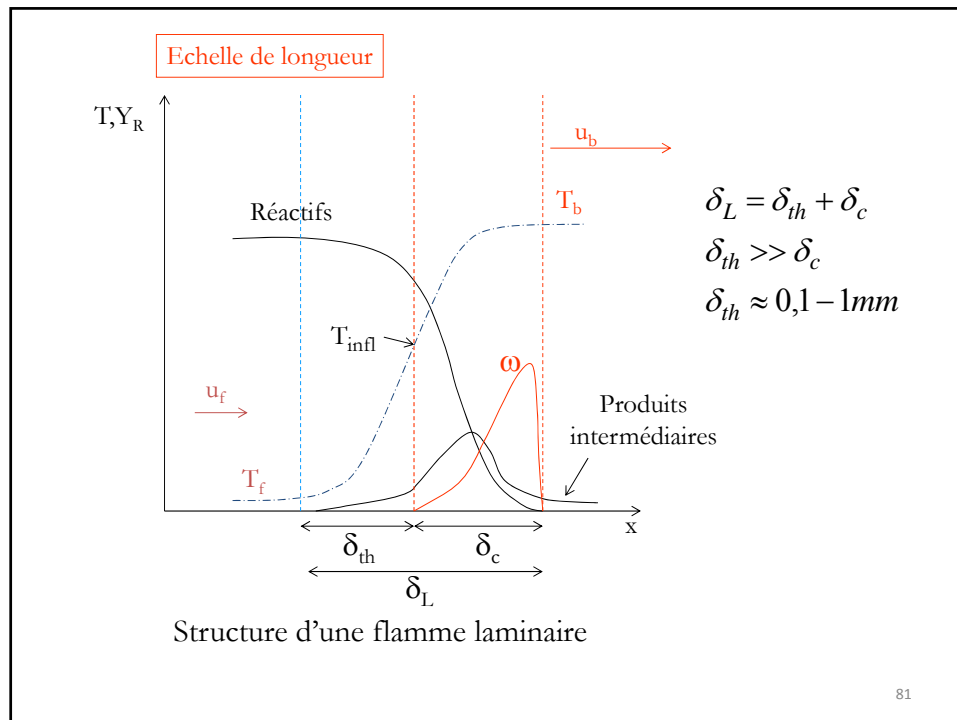


$$\frac{\partial \rho u}{\partial x} = 0$$

$$\frac{\partial \rho u u}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial x} \right) - \frac{\partial p}{\partial x}$$

$$\frac{\partial \rho u Y_p}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho D \frac{\partial Y_p}{\partial x} \right) + \omega_p$$

$$\frac{\partial \rho u c_p T}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) + q \omega_p$$



Echelle de vitesse

$\omega_p = \rho Y_p A e^{-E_a/RT} \quad (kg/m^3/s)$
temps chimique

$\tau_c = (A e^{-E_a/RT})^{-1}$

$$\omega_p = \frac{\rho Y_p}{\tau_c}$$

Continuité : $\rho u = cte$

Dans la zone de préchauffage des gaz frais (pas de combustion) :
 équilibre convection-diffusion

Flamme laminaire plane stationnaire :
 $S_L = u_f$

82

quantité de mouvement

$$\rho u \frac{\partial u}{\partial x} \sim \mu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \implies \rho S_L \frac{S_L}{\delta_L} \sim \mu \frac{S_L}{\delta_L^2} \quad \delta_L \sim \frac{\mu}{\rho S_L} = \frac{\nu}{S_L}$$

fraction massique des produits

$$\rho u \frac{\partial Y_p}{\partial x} \sim \rho D \frac{\partial^2 Y_p}{\partial x^2} \implies \rho \frac{S_L}{\delta_L} \sim \frac{\rho D}{\delta_L^2} \quad \delta_L \sim \frac{D}{S_L}$$

température

$$\rho u c_p \frac{\partial T}{\partial x} \sim \lambda \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \implies \rho S_L c_p \frac{\Delta T}{\delta_L} \sim \lambda \frac{\Delta T}{\delta_L^2} \quad \delta_L \sim \frac{\lambda}{\rho c_p S_L}$$

$$\delta_L \sim \frac{\lambda}{\rho c_p S_L} \sim \frac{D}{S_L} \sim \frac{\nu}{S_L}$$

$$\mathcal{L}e = \frac{S_c}{P_r}$$

83

$$\mathcal{L}e = \frac{\lambda}{\rho c_p D} = 1, \quad P_r = \frac{\mu c_p}{\lambda} = 1, \quad S_c = \frac{\mu}{\rho D} = 1$$

Dans la zone de combustion (voir TD combustion) :

équilibre diffusion – production chimique

fraction massique
des produits :

$$\rho D \frac{\partial^2 Y_p}{\partial x^2} \sim \omega_p \sim \frac{\rho Y_p}{\tau_c} \implies \rho D \frac{Y_p}{\delta_L^2} \sim \frac{\rho Y_p}{\tau_c}$$

$$\frac{D}{\delta_L^2} \sim \frac{1}{\tau_c} \implies \frac{\delta_L^2}{\tau_c} \sim D$$

84

Equation de la température :

$$\lambda \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \sim q \omega_p \sim \frac{\rho Y_p}{\tau_c} q \implies \lambda \frac{\Delta T}{\delta_L^2} \sim \frac{\rho c_p \Delta T}{\tau_c}$$

$$\frac{\lambda}{\delta_L^2} \sim \frac{\rho c_p}{\tau_c} \implies \frac{\delta_L^2}{\tau_c} \sim \frac{\lambda}{\rho c_p}$$

$$\frac{\lambda}{\rho c_p} \sim D \implies \mathcal{Le} = \frac{\lambda}{\rho c_p D} \sim 1$$

85

comme dans la zone thermique :

$$\delta_L \sim \frac{\lambda}{\rho c_p S_L}$$

$$\implies \frac{\lambda}{\delta_L^2} \sim \lambda \left(\frac{\rho c_p S_L}{\lambda} \right)^2 = \frac{(\rho c_p S_L)^2}{\lambda}$$

$$\text{Avec : } \frac{\lambda}{\delta_L^2} \sim \frac{\rho c_p}{\tau_c} \implies \frac{1}{\tau_c} \sim \frac{\rho c_p S_L^2}{\lambda} \quad S_L^2 \sim \frac{\lambda}{\rho c_p \tau_c} \sim \frac{\lambda}{\rho c_p} \tau_c^{-1}$$

$$S_L \sim \sqrt{\frac{\lambda}{\rho c_p} A e^{-E_a/RT}} \sim \sqrt{D A e^{-E_a/RT}} \sim \sqrt{\nu A e^{-E_a/RT}}$$

Echelle de vitesse S_L

86

Vitesse fondamentale en fonction de T et P

Flamme de prémélange caractérisée pour une richesse ϕ par :

une épaisseur : $\delta_L \sim \frac{\lambda}{\rho c_p S_L}$

λ : conductivité thermique
 c_p : chaleur spécifique des gaz frais
 ρ : masse volumique des gaz frais

vitesse fondamentale : $S_L = S_{L,0} \left(\frac{T_f}{T_0} \right)^\alpha \left(\frac{p_f}{p_0} \right)^\beta$

$S_{L,0}$, α et β dépendent de la nature du carburant et de la richesse du mélange

T_f, p_f : température et pression dans les gaz frais

T_0, p_0 : température et pression de référence

$S_{L,0}$: vitesse fondamentale dans les conditions de référence

$$S_T = S_L f\left(\frac{k^{1/2}}{S_L}\right)$$

87

Variable d'avancement :

$$R \rightarrow P + Q \nearrow$$

- $M \ll 1$
- Combustion adiabatique
- isobare
- C_p constant
- $Le = 1$

Equations de bilans
de T et Y_p identiques

Variable d'avancement :

$$c = Y_p = \frac{T - T_r}{T_p - T_r}$$

$c = 0$ GF (R)
 $c = 1$ GB (P)

Taux d'expansion thermique :

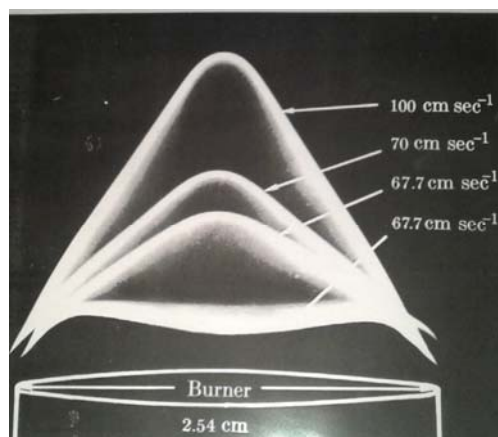
$$\tau = \frac{T_p - T_r}{T_r}$$

Combustion dans l'air
(5~7 selon richesse, carburant), T_r

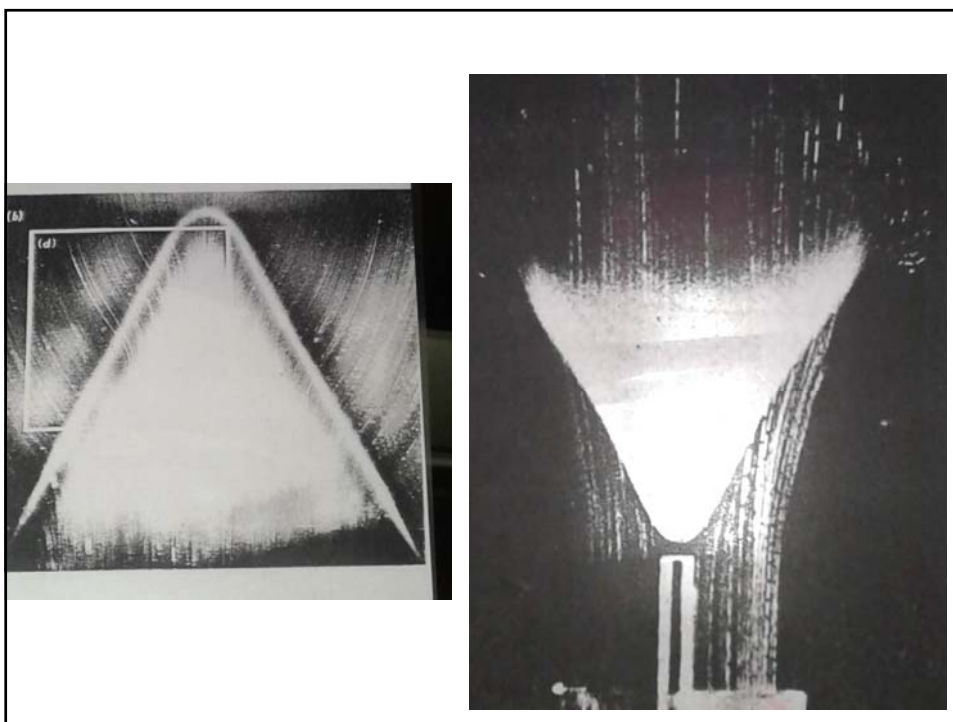
88

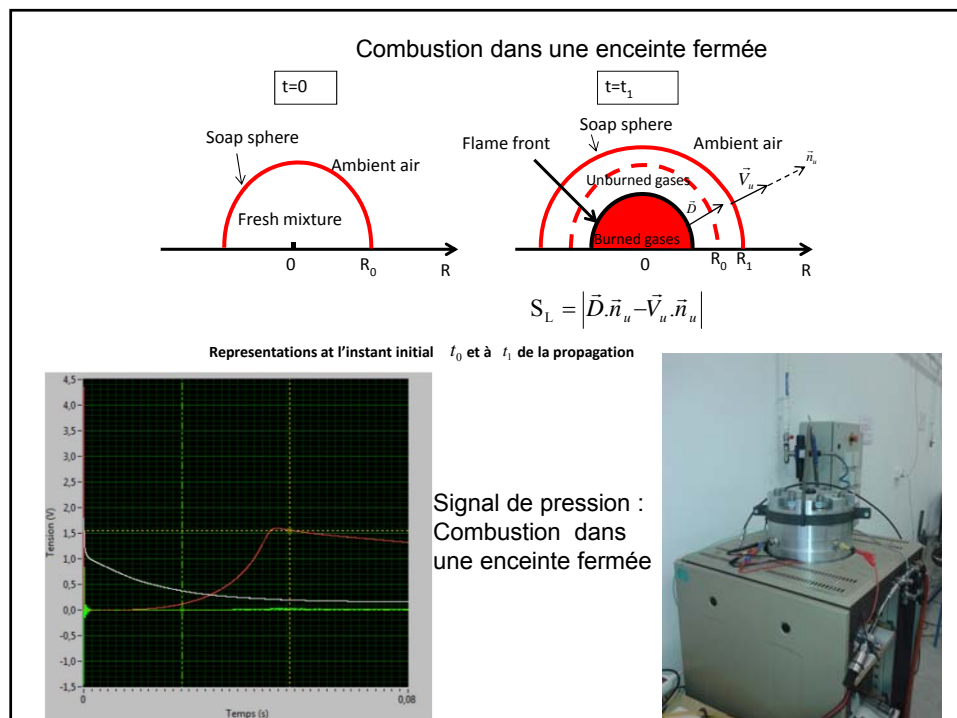
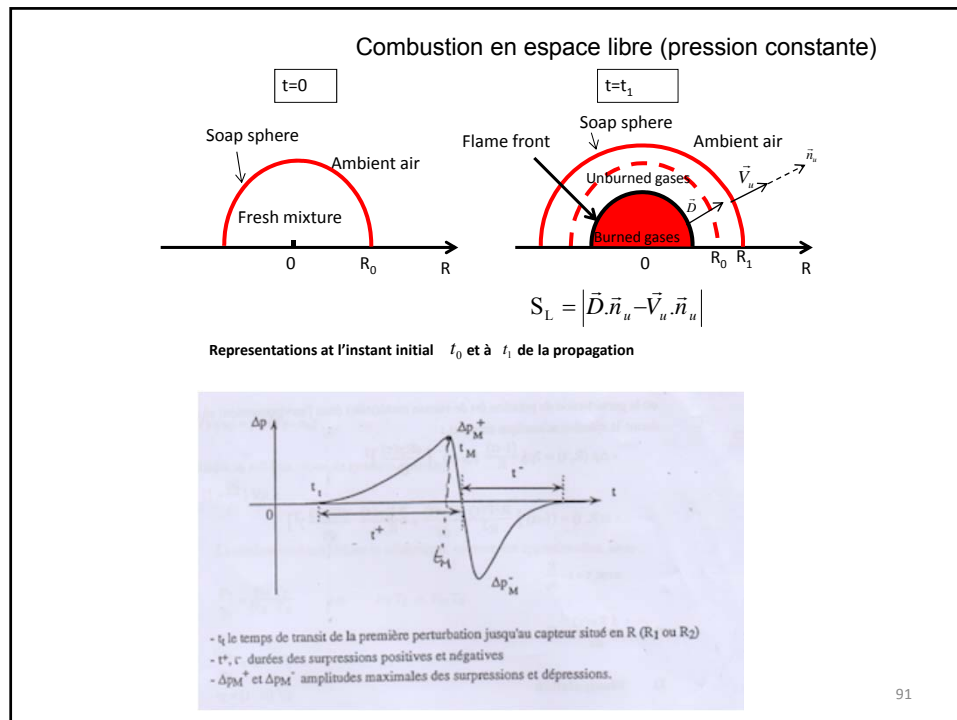


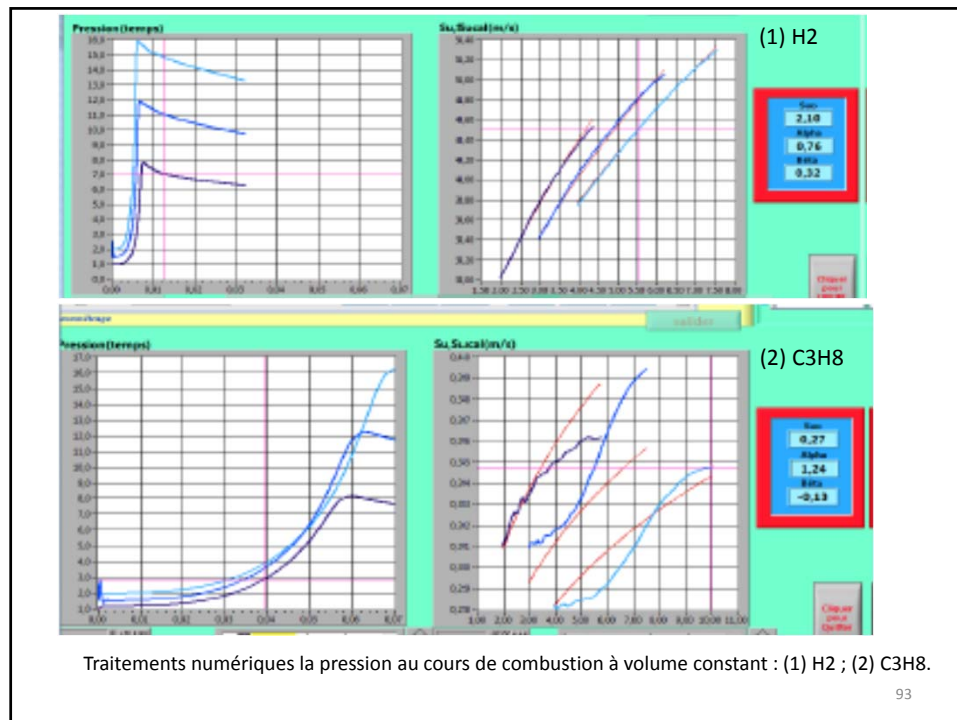
Bec bunsen (pression constante)



89

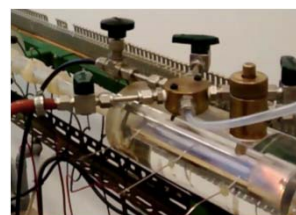






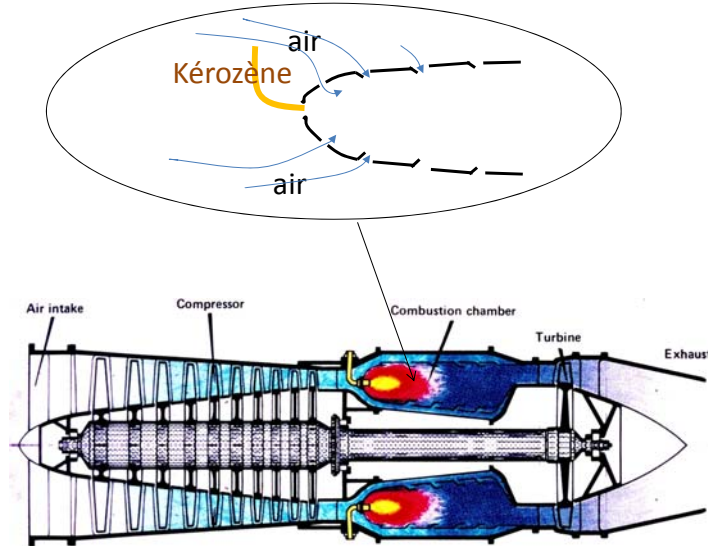
93

Propagation dans un tube



94

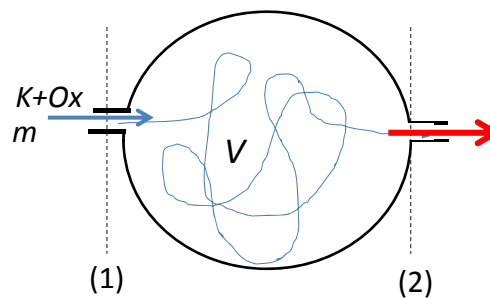
Combustion dans une chambre de combustion d'un turboréacteur



95

Foyer homogène

Définition et conditions d'existence



Hypothèse : le mélange entre gaz frais (flux entrant) et gaz brûlés produits dans le réacteur est suffisamment intense pour que le fluide soit **homogène** dans le volume V

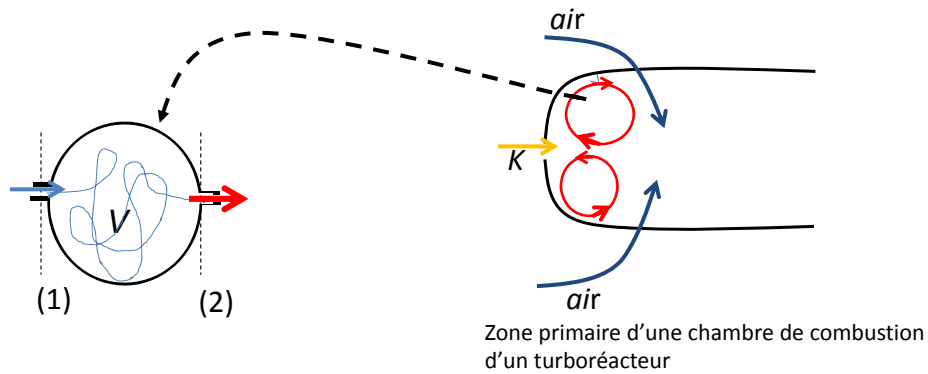
A_1 : section d'entrée (mélange $K + Ox$) (Y_{a1}, T_1)

A_2 : section de sortie (Gaz brûlés P) (Y_{a2}, T_2)

$m = \rho u A_1$: débit

96

Application du réacteur homogène à la zone primaire d'une chambre de combustion



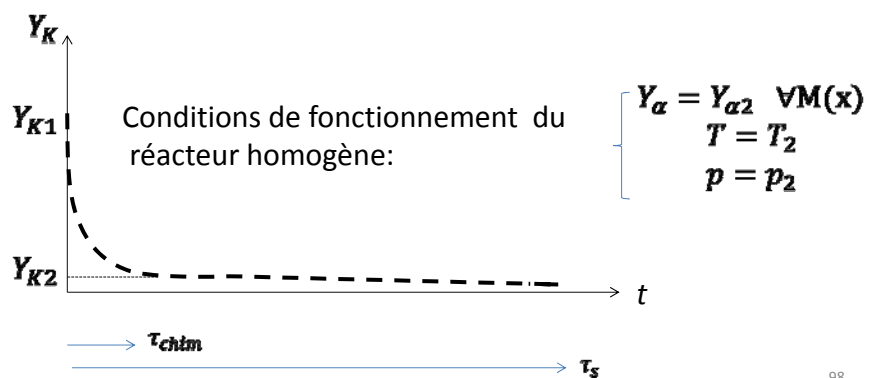
temps caractéristiques du système:

$$\left\{ \begin{array}{l} \tau_m : \text{ temps de mélange} \\ \tau_{chim} : \text{ temps chimique} \\ \tau_s = \frac{\rho V}{\dot{m}} : \text{ temps de séjour} \end{array} \right.$$

97

Condition d'existence du régime de combustion homogène

$$\tau_m \ll \tau_{chim} \ll \tau_s$$



98

Equations du réacteur homogène

- écoulement stationnaire
- Pas de pertes de chaleur à travers les parois du réacteur
- $M_\alpha \ll 1$; $Le_\alpha \approx 1 \quad \forall \alpha$

↓
(équations locales)

$$\begin{aligned} \operatorname{div}(\rho \vec{U} Y_\alpha) + \operatorname{div} \vec{J}_\alpha &= \rho \omega_\alpha \\ \operatorname{div}(\rho \vec{U}) &= 0 \\ h &= \int \bar{C}_p dT + \sum_\alpha Q_\alpha Y_\alpha = \text{cst} \end{aligned}$$

Une intégration sur le volume V conduit à:

$$\begin{aligned} \iint_{A_2} \rho \vec{U} Y_\alpha d\vec{A} - \iint_{A_1} \rho \vec{U} Y_\alpha d\vec{A} &= \iiint_V \rho \omega_\alpha dV \\ \iint_{A_2} \rho \vec{U} d\vec{A} - \iint_{A_1} \rho \vec{U} d\vec{A} &= 0 \\ h_2 &= h_1 \end{aligned}$$

99

Equations du réacteur homogène (2)

$$\begin{aligned} \rho_1 u_1 A_1 &= \rho_2 u_2 A_2 = m \\ m(Y_{\alpha 2} - Y_{\alpha 1}) &= \rho_2 V \omega_\alpha(p_2, T_2, Y_{\alpha 2}) \\ T_2 - T_1 &= -\frac{1}{\bar{C}_p} \sum_\alpha Q_\alpha (Y_{\alpha 2} - Y_{\alpha 1}) \end{aligned}$$

$$\oplus \text{ équation d'état} \quad \rho T \sum_\alpha \frac{Y_\alpha}{M_\alpha} = \rho_1 T_1 \sum_\alpha \frac{Y_{\alpha 1}}{M_\alpha} = \rho_2 T_2 \sum_\alpha \frac{Y_{\alpha 2}}{M_\alpha} = p_2$$

$m, Y_{\alpha 1}$ et T_1 sont les données d'entrée du réacteur

Ou :

$$\begin{aligned} Y_{\alpha 2} - Y_{\alpha 1} &= t_s \omega_\alpha = t_s \sum_{r=1}^R M_\alpha (v_{\alpha r}'' - v_{\alpha r}') \frac{W_{r,2}}{\rho_2} \\ T_2 - T_1 &= -\frac{t_s}{\bar{C}_p} \sum_\alpha Q_\alpha \sum_{r=1}^R M_\alpha (v_{\alpha r}'' - v_{\alpha r}') \frac{W_{r,2}}{\rho_2} \end{aligned}$$

100

Chaleur de réaction associée
À la réaction r :

$$\Delta Q_r = \sum_{\alpha} Q_{\alpha} M_{\alpha} (v_{\alpha r}'' - v_{\alpha r}')$$

$$\longrightarrow \begin{cases} T_2 - T_1 = -\frac{t_s}{\bar{C}_p} \sum_{r=1}^R \Delta Q_r \frac{W_{r,2}}{\rho_2} \\ Y_{\alpha 2} - Y_{\alpha 1} = t_s \sum_{r=1}^R M_{\alpha} (v_{\alpha r}'' - v_{\alpha r}') \frac{W_{r,2}}{\rho_2} \end{cases}$$

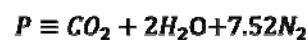
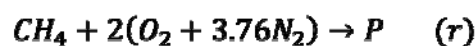
$$W_{r,2} \equiv W_r(p_2, T_2, Y_{\alpha 2})$$

Ce système constitue un système d'équations algébrique non linéaires
Pour déterminer la composition $Y_{\alpha 2}$ et la température T_2 dans le réacteur

101

Cas d'une réaction globale unique

Soit un mélange pauvre combustible CH_4 + air réagissant suivant une réaction globale unique (l'azote N_2 est considéré comme un gaz inerte $Y_{N_2} = \text{cst}$):



Le taux de production associé à la réaction (r) est :

$$W_r = k T^n C_{O_2} C_{CH_4} \exp(-T_a/T)$$

$T_a = E_a/R$ température d'activation

→ Équations pour la composition dans le réacteur $Y_{\alpha 2}$:

$$\begin{cases} Y_{K2} - Y_{K1} = -t_s M_K \frac{W_{r,2}}{\rho_2} \\ Y_{O2,2} - Y_{O2,1} = -2t_s M_{O2} \frac{W_{r,2}}{\rho_2} \\ Y_P = 1 - Y_{CH_4,2} - Y_{O2,2} - Y_{N2} \end{cases}$$

102

→ Équations pour la température dans le réacteur T_2 :

$$T_2 - T_1 = -\frac{t_s}{\bar{C}_p} \Delta Q_r \frac{W_{r,2}}{\rho_2}$$

Solutions du système :

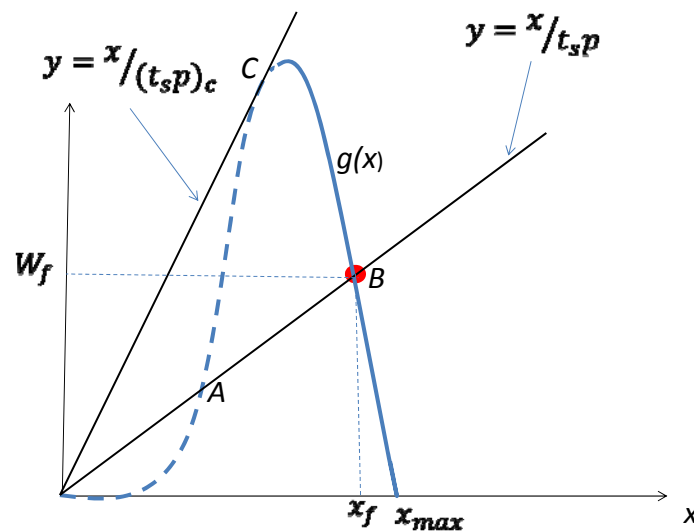
$$x = t_s \frac{W_{r,2}}{\rho_2} \longrightarrow$$

$$\begin{cases} Y_{K2} - Y_{K1} = -M_K x \\ Y_{O2,2} - Y_{O2,1} = -2M_{O2} x \\ T_2 - T_1 = -\frac{1}{\bar{C}_p} \Delta Q_r x \end{cases}$$

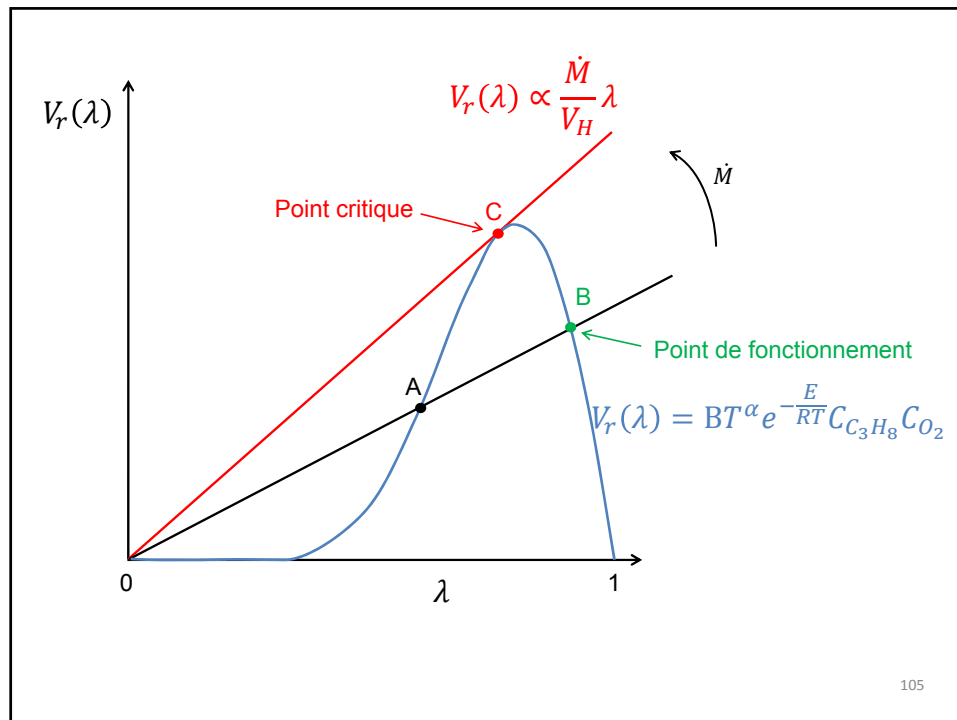
Équation pour x : $x/t_{sp_2} = k' T_2^{n-1} Y_{CH4,2} Y_{O2,2} \exp(-T_a/T_2) \equiv g(x)$

103

Solutions :



104



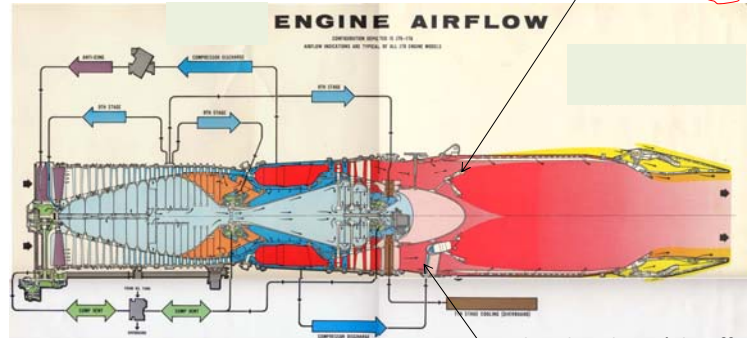
Point de fonctionnement du réacteur homogène :

- $t_s < t_{sc}$ pas de solution (le débit est trop fort ou le volume trop petit)
- $t_s = t_{sc}$ solution limite (le débit est le débit critique pour V donné)
- $t_s > t_{sc}$ \exists une solution stable au point de fonctionnement $x = x_f$

Remarque : si la pression p varie, $g(x)$ reste invariant; il existe donc une limite de fonctionnement dépendant de la pression (via $x/t_s p$)

Applications du réacteur homogène

1- Accroche flamme

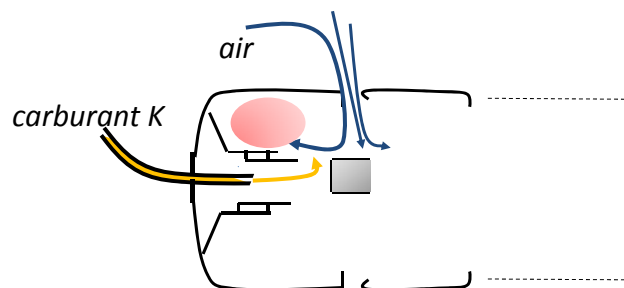


Chambre de « réchauffe »
(post combustion)

Si $t_s > t_{sc}$ l'obstacle stabilise un « noyau de recirculation » à température T_2 . Fixant le point de fonctionnement x_f la condition liant p, d, u_0 est alors : $d/u_0 p = x_f/g$

107

1- Zones primaires des chambres de combustion de turboréacteurs



Foyer tubulaire : couplages de foyers homogènes

108

