

HOCINE MZAD*, MOHAMED EL-GUERRI**

ANALYSE DE LA COMBUSTION DU DÉCANE:
ESTIMATION ENTHALPIQUE DE LA TEMPÉRATURE
DE FIN DE COMBUSTION ISOBAREANALIZA SPALANIA DEKANU.
SZACUNEK ENTALPOWY TEMPERATURY
KOŃCOWEGO ETAPU
SPALANIA IZOBARYCZNEGO

Résumé

Puisque les performances globales du moteur sont fortement dépendantes de la température de fin de combustion, la prédiction de cette température est très importante. Elle devient donc un paramètre déterminant pour la conception et le dimensionnement d'une chambre de combustion. A ce propos, et en vue de concevoir un moteur thermique à combustion interne dont la chambre de combustion serait alimentée d'une part en combustible et d'autre part en air, on se propose d'étudier la température de fin de combustion isobare ainsi que la composition des gaz brûlés en fonction de la richesse du mélange carburé. On adoptera dans nos calculs les richesses variant de $R = 0,5$ à $1,5$ et on prendra le décane ($C_{10}H_{22}$) comme combustible.

Mots clé: décane, combustion, richesse, enthalpie, interpolation, température

Streszczenie

Z uwagi na fakt iż osiągi całkowite silnika zależą ściśle od temperatury końcowego etapu spalania, jej prognozowanie ma ogromne znaczenie. Temperatura ta jest parametrem rozstrzygającym o koncepcji i wymiarowaniu komory spalania. W związku z tym oraz ze względu na koncepcje silnika cieplnego o spalaniu wewnętrznym, którego komora spalania zasilana była by paliwem i powietrzem, proponujemy przeanalizowanie temperatury końcowego etapu spalania izobarycznego oraz składu spalin w zależności od składu mieszanki paliwowej. Zakładamy w naszych obliczeniach skład mieszanki w zakresie od $R = 0,5$ do $1,5$ a za paliwo przyjmujemy dekan ($C_{10}H_{22}$).

Słowa kluczowe: dekan, spalanie, wzbogacanie mieszanki, entalpia, interpolacja, temperatura

* Professeur Hocine Mzad, Département de Génie Mécanique, Université Badji Mokhtar de Annaba, Algérie.

** Magister Mohamed El-Guerri, Département des Sciences et Techniques, Université Ibn Khaldoun de Tiaret, Algérie.

Nomenclature

Symboles latins

| | |
|----------------------|---|
| a | – Nombre de moles de l'air [mol] |
| i | – Nombre de moles de l'azote [mol] |
| $h T, h TP$ | – Enthalpies molaires à T et à T et P [kJ/kmol] |
| $h^o T, h^o TP$ | – Enthalpies molaires sensibles à T à T et P [kJ/kmol] |
| m, n | – Nombres d'atomes du carbone et de l'hydrogène |
| s^o | – Entropie molaire à l'état standard [kJ/(kmol·K)] |
| t | – Nombre de moles de l'eau [mol] |
| u | – Vitesse [m/s] |
| v | – Nombre de moles d'hydrogène [mol] |
| w | – Nombre de moles de constituant donné [mol] |
| x | – Nombre de moles du dioxyde de carbone [mol] |
| y | – Nombre de moles du monoxyde de carbone [mol] |
| z | – Nombre de moles d'oxygène [mol] |
| Di | – Dosage idéal |
| $H^o, H^o T, H^o TP$ | – Enthalpie standard et enthalpies standards à T et à T et P [kJ] |
| $H TP$ | – Enthalpie à T et P [kJ] |
| I | – Constituant donné |
| Kp | – Constante d'équilibre |
| P | – Pression [bar] |
| R | – Richesse |
| R_u | – Constante universelle des gaz parfaits [kJ/(kmol·K)] |
| T | – Température [K] |
| W | – Travail [kJ] |

Symboles grecs

| | |
|--------------------------------|--|
| Δ | – Déterminant de l'équation du second degré |
| ΔE_C | – Variation de l'énergie cinétique [kJ] |
| ΔQ | – Quantité de chaleur de combustion [kJ] |
| $\Delta_f h^o, \Delta_f h^o T$ | – Enthalpies molaires de formation à l'état standard et à T [kJ/kmol] |
| $\Delta_r H^o, \Delta_r H^o T$ | – Enthalpies de réaction à l'état standard et à T [kJ] |
| $\Delta_r g^o$ | – Energie libre molaire (de Gibbs) de réaction à l'état standard [kJ/kmol] |
| $\Delta_r s^o$ | – Entropie molaire de réaction à l'état standard [kJ/kmol] |
| Φ | – Coefficient d'excès d'air |
| Π | – Dynalpie [kJ] |
| α | – Nombre de moles du constituant i dans la réaction [mol] |
| λ | – Degré d'avancement de la réaction |

Exposants et indices

| | |
|---|------------------------|
| * | – État stœchiométrique |
| o | – État standard |

| | |
|--------|---|
| i | – Constituant |
| r, f | – Réaction, formation |
| 1, 2 | – États de la combustion, solutions de l'équation du second degré |
| GE | – Dissociation gaz à l'eau |
| T, P | – Température, pression |

1. Introduction

Pour qu'une combustion ait lieu, le combustible et le comburant doivent être à des proportions bien définies. Pour les combustibles gazeux ou liquides, le dosage de l'air et du combustible est une opération très importante. Ainsi pour le décane, en deçà de 5% et au delà de 15% avec l'air la combustion complète n'est plus assurée. Aussi, pour que la réaction de combustion soit amorcée, une température minimale d'inflammation du mélange doit être atteinte.

Nous passons en revue quelques travaux en relation avec la combustion du décane, et nous faisons appel à quelques ouvrages de référence en combustion pour clarifier certaines notions importantes.

Shen et al. [1] ont étudié l'allumage de composés en *n*-alcane dans un tube à choc chauffé effectuant des expériences à choc réfléchi de (9 à 58) bar et de (786 à 1396) K des mélanges *n*-alcane/air à $\Phi = 0,25, 0,5$ et 1,0. Les délais d'allumage ont été mesurés en utilisant une combinaison à fond de paroi électroniquement excité d'émission OH et des mesures de pression à paroi latérale. Les données trouvées et leurs combinaison avec celles de tube à choc précédent et des mesures de machine rapide à compression montrent que toute différences de réactivité pour C7 et *n*-alcane plus larges est faible, compte tenu des incertitudes expérimentales pour les mélanges *n*-alcane/air avec du carbone commun contenu dans un large éventail de températures (650 à 1400) K et des pressions élevées.

Barths et al. [2], ont séparé entre calculs aérodynamiques et calculs chimiques pour que le modèle instationnaire de flamellet leur permette de décrire les différents processus tels que la formation de polluants comme les NO_x et les suies qui ont lieu dans un moteur diesel à injection directe du type Volkswagen DI 1900. La formation des polluants a été déterminée expérimentalement. Le moteur est alimenté avec du gazole et deux carburants de référence. Un des carburants de référence est le *n*-décane pur, le second est bi-composants formé de 70% de *n*-décane liquide et 30% α -méthyle-naphtalène. Les résultats expérimentaux indiquent un bon NO_x et suies pour les deux carburants de référence pour lesquels des simulations réalisées ont été comparées aux données expérimentales.

Guha [3] a présenté une méthode simple pour calculer les propriétés des produits de combustion. La méthode est générique où les mêmes équations sont appliquées pour les combustibles de n'importe quel rapport air/carburant et température. Les équations sont adaptées pour les applications de calcul manuel et informatique nécessitant une évaluation bien répétitive. Les équations offrent une précision comparable à la méthode la plus élaborée disponible mais à un coût de calcul considérablement réduit.

Moréac et al. [4] ont développé dans le laboratoire un générateur de mécanisme de réaction automatique permettant d'écrire un seul mécanisme cinétique détaillé de l'oxydation et la combustion du *n*-décane et le *n*-heptane. Il montre une bonne prédiction du

temps de retard d'allumage en fonction de la température d'oxydation du *n*-décane de (1,3 à 5,1) bar et le *n*-heptane de (13 à 40) bar pour les différents rapports d'équivalence. Ce travail ne représente pas seulement la validation d'un mécanisme spécifique, mais aussi une validation des taux constants des classes de réactions utilisées pour modéliser l'oxydation des alcanes à basse et haute température.

Kumar [5] a axé ces expériences sur trois réactions globales distinctes de combustion des hydrocarbures pré-mélangés mélanges/oxydant, à savoir la vitesse de flamme laminaire, le taux étendu d'extinction et le retard à l'allumage. L'accent était mis sur les composantes combustibles liquides pratiques des alcanes, notamment le *n*-heptane, l'iso-octane, le *n*-décane et le *n*-dodécane en plus de l'éthylène qui est l'un des principales clés intermédiaires de l'oxydation des hydrocarbures supérieurs. Les résultats de température d'auto-inflammation sont pertinents aux nouveaux concepts de moteur à combustion, dont certains tentent de parvenir à une auto-inflammation contrôlée.

Horning [6] a étudié l'auto-inflammation du propane, *n*-butane, *n*-heptane, *n*-décane et l'éthylène dans la région de choc réfléchi d'un tube à choc sur la gamme de (1250 à 1750) K et (0,1 à 0,6) bar, pour des mélanges de (2 à 20) % d'oxygène et un rapport d'équivalence de 0,5 à 2,0. Les corrélations présentées indiquent la sensibilité du temps d'allumage dans lequel les données stœchiométriques sont corrélées dans une expression unique. La comparaison directe à d'autres études de temps d'allumage valide davantage ces corrélations.

Crochet [7] a présenté une revue chronologique détaillée de 1990 à 2008 des travaux réalisés sur le *n*-décane. Il a étudié la cinétique d'oxydation, d'auto-inflammation et de combustion en milieu pauvre et ultra-pauvre de trois hydrocarbures types représentatifs du comportement des carburants gazoles pour automobiles dont le *n*-décane à haute pression (3,4 à 23,2) bar et basse température (600 à 950) K. Une base exhaustive de données thermocinétiques expérimentales et théoriques a été élaborée. Les résultats obtenus avec le *n*-décane ont ensuite été reproduits numériquement. L'effet de la recirculation des gaz brûlés qui a lieu en moteur HCCI a été également pris en compte afin d'observer les répercussions sur les délais d'auto-inflammation.

Dans un article précédent [8] sur la combustion du kérosène $C_{10}H_{22}$ nous avons étudié en détails l'influence de la richesse, à différentes proportions de mélanges combustible/air, sur la composition finale des gaz brûlés dans le but de réduire les émissions. Ce travail, qui est donc la continuation de l'étude précédente, vise à montrer la dépendance étroite de la température de fin de combustion par rapport à la richesse du mélange préparé et la composition des gaz brûlés en utilisant une méthode de calcul analytique simple.

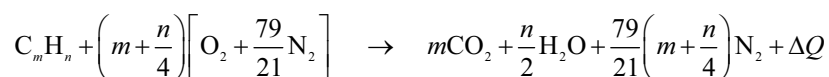
2. Combustion du décane

2.1. Réaction de combustion

La détermination de la température finale de combustion nécessite un bilan énergétique, qui se présente selon le cas.

La réaction globale est couramment mise sous la forme d'une équation chimique avec la prise en compte de la composition initiale du combustible.

Dans le cas d'un mélange stoechiométrique composé d'air sec et d'hydrocarbure C_mH_n , on peut écrire



avec ΔQ appelée quantité de chaleur de combustion identifiant la variation d'enthalpie.

La résolution simplifiée (teneur en gaz résiduels négligée et hypothèse de combustion idéale) de cette équation passe par l'équilibre de chacun de ses membres en termes de bilan carbone, hydrogène, oxygène et azote.

2.2. Dosage idéal

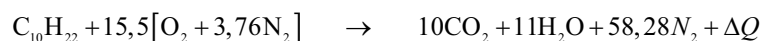
Le dosage est défini comme étant le rapport des masses du carburant au comburant mises en jeu

$$Di = R / \Phi$$

C'est-à-dire

$$Di = \frac{R(\sum C_mH_n)}{\Phi[\sum(O_2 + 3,76N_2)]}$$

D'après la référence [9], l'équation de combustion du décane s'écrit



Sachant que: $R = 1$, $\Phi = 15,5 \Rightarrow Di \cong 1/15$.

2.3. Propriétés du décane

Le décane, connu aussi sous le nom de *n*-décane ou kérosène $C_{10}H_{22}$, est un composé de la famille des alcanes ou des séries de paraffines hydrocarbonés, il compte 75 isomères qui sont tous des liquides inflammables. Comme les autres alcanes il est non polaire et donc ne se dissout pas dans les liquides polaires comme l'eau.

Les propriétés thermodynamiques du décane sont données au tableau 1. En plus, son poids molaire $M = 142,28$ kg/kmol (C : 84,42%, H : 5,59%) et son pouvoir calorifique inférieur moyen $PCI = 44240$ kJ/kg.

Tableau 1

Propriétés thermodynamiques du décane [11]

| $\Delta_f h^\circ$ [kJ/kmol] | $\Delta_f g^\circ$ [kJ/kmol] | s° [kJ/kmol·K] | Δc_p° [kJ/kmol·K] |
|------------------------------|------------------------------|-----------------------|--------------------------------|
| -249700 | 34434 | 545,8 | 233,1 |

2.4. Composition de l'air sec

L'air est considéré dans notre article comme comburant pour réaliser la combustion, il se trouve dans l'atmosphère gazeuse terrestre et se compose principalement de deux éléments: l'azote et l'oxygène. Le premier représente environ 79% de l'air que nous respirons, le reste étant l'oxygène pour 21% et une dizaine d'éléments gazeux en très petites quantités représentant environ 1% [1].

2.5. Hypothèses sur l'étude du cycle thermodynamique

Plusieurs approches sont possibles pour évaluer les différentes grandeurs du cycle thermodynamique. Elles reposent sur des approximations plus ou moins exagérées du cycle (P, V) pour permettre de simplifier les calculs. Le cycle mixte est donc le modèle le plus réaliste qui permet d'obtenir de meilleurs résultats.

Dans notre cas on suppose que la combustion se fait à volume constant jusqu'à une certaine pression maximale puis se déroule à pression constante. Cette pression maximale devient donc une donnée du problème. Des contraintes techniques (résistance des matériaux, étanchéité ...) limitent cette pression maximale de combustion.

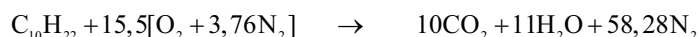
3. Composition des gaz brûlés à l'état standard

La composition des gaz brûlés de la combustion du kérosène $C_{10}H_{22}$ dans les différents cas de richesse (stricte, pauvre et riche) a déjà fait l'objet d'une étude précédente [8] où, à l'état standard, les produits de combustion se composent de: CO_2 , CO , H_2O , H_2 , N_2 et O_2 .



Le bilan de la réaction permet d'avoir quatre équations à six inconnus et la résolution du système d'équations associé en considérant les différents cas de mélange a donné :

1^{er} cas – mélange strict ($R = 1$): dans ce cas tous le carbone (C) et l'hydrogène (H) sont oxydés sans excès d'oxygène, ce qui implique l'absence de CO , H_2 et O_2 , c'est-à-dire $y^* = v^* = z^* = 0$, soit

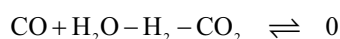


2^{ième} cas – mélange pauvre ($R < 1$): pas de CO et H_2 c.à.d. $y^* = v^* = 0$, le bilan permet d'établir le tableau 2

Tableau 2

| Fractions molaires pour un mélange pauvre | | | | | |
|---|--------|-------|-------|-------|-------|
| R | 0,5 | 0,6 | 0,7 | 0,8 | 0,9 |
| z^* | 15,50 | 10,33 | 6,64 | 3,88 | 1,72 |
| i^* | 116,56 | 97,13 | 83,26 | 72,85 | 64,76 |

3^{ème} cas – mélange riche ($R > 1$): absence d'oxygène c.à.d. $z^* = 0$, nous obtenons quatre équations et cinq inconnus auxquelles on ajoute une cinquième équation qui est celle du gaz à l'eau



Sachant que

$$Kp = \frac{y^* \cdot t^*}{x^* \cdot v^*} = 10^{-6} \approx 0,0 \Rightarrow y^* = 0 \text{ ou } t^* = 0$$

- Pour $y^* = 0$ et les valeurs de $R = 1,1$ à $1,5$ on doit avoir t^* et v^* positifs, c.à.d. $t^* > 0 \Rightarrow R < 1,55$ et $v^* > 0 \Rightarrow R > 1$, d'où $1 < R < 1,55$; ce qui répond à notre cas. Pour des valeurs choisies de R supérieure à 1 et inférieure à 1,55 on obtient le tableau 3.

Tableau 3

Fractions molaires pour un mélange riche ($y^* = 0$)

| R | 1,1 | 1,2 | 1,3 | 1,4 | 1,5 |
|-------|-------|-------|-------|-------|-------|
| t^* | 8,18 | 5,83 | 3,85 | 2,14 | 0,67 |
| v^* | 2,82 | 5,17 | 7,15 | 8,86 | 10,33 |
| i^* | 52,98 | 48,57 | 44,83 | 41,63 | 38,85 |

- Pour $t^* = 0$, avec $1 < R \leq 1,5$ d'où $x^* > 0 \Rightarrow R < 3,1$ et $y^* > 0 \Rightarrow R > 1,55$. Par conséquent: $1,55 < R < 3,1$, ce qui ne répond pas à notre cas. Donc on considère seulement $y^* = 0$ et on exclut le cas où $t^* = 0$.

4. Enthalpie standard de réaction

Rappelons que l'enthalpie d'un corps pur ne peut être calculée de façon absolue car elle dépend de l'énergie interne qui n'est pas calculable [10]. Néanmoins, des tables d'enthalpies molaires standards ont été établies afin de pouvoir calculer rapidement une enthalpie standard de réaction à partir des valeurs de ces enthalpies molaires.

$$\Delta_r H^\circ |^T = \sum_i \alpha_i' \cdot \Delta_f h_i^\circ |^T$$

Cela suppose de définir une échelle arbitraire d'enthalpie molaire en définissant un zéro arbitraire d'enthalpie. C'est pour éviter cet inconvénient qu'a été définie l'enthalpie standard de formation à la température T notée $\Delta_f h^\circ |^T$ dont les valeurs pour chaque corps pur sont tabulées à la température de référence de 298 K (25°C) et résumées au tableau 4.

L'enthalpie standard de formation à T d'un composé chimique est la différence des enthalpies mises en jeu lors de la formation d'une môle de ce composé à partir des corps

simples (purs) pris dans l'état standard et ceux stables à la température considérée T . Elle correspond à l'enthalpie standard de réaction $\Delta_r H^0|_T$ de la réaction de formation du corps pur à partir des corps purs simples correspondants, à la température T .

De la loi de Hess, pour une réaction chimique

$$\sum_i w_i \cdot I_i \rightleftharpoons 0 \Rightarrow \Delta_r H^0|_T = \sum_i w_i \cdot \Delta_f h_i^0|_T$$

à $T = T^0 \Rightarrow \Delta_r H^0 = \sum_i w_i \cdot \Delta_f h_i^0$ et pour $T^0 = 198 \text{ K}$

$$\Delta_r H^0 = x^* \Delta_f h_{\text{CO}_2}^0 + y^* \Delta_f h_{\text{CO}}^0 + t^* \Delta_f h_{\text{H}_2\text{O}}^0 - \Delta_f h_{\text{C}_{10}\text{H}_{22}}^0$$

Tableau 4

Propriétés thermodynamiques des produits de dissociation [11]

| Espèce | CO ₂ | CO | H ₂ O | H ₂ | N ₂ | O ₂ |
|--------------------------|-----------------|---------|------------------|----------------|----------------|----------------|
| $\Delta_f h^0$ [kJ/kmol] | -393520 | -110530 | -241830 | 0 | 0 | 0 |
| s^0 [kJ/kmol·K] | 213,79 | 197,66 | 188,84 | 130,68 | 191,51 | 205,04 |

Sachant que pour les gaz diatomiques $\Delta_f h_i^0 \cong 0$, alors:

1^{er} cas: pour le mélange strict on sait que $y^* = v^* = z^* = 0$, $x^* = 10$ et $t^* = 11$

$$\Rightarrow \Delta_r H^0 = 10\Delta_f h_{\text{CO}_2}^0 + 11\Delta_f h_{\text{H}_2\text{O}}^0 - \Delta_f h_{\text{C}_{10}\text{H}_{22}}^0$$

$$\Rightarrow \Delta_r H^0 = 10(-393,52) + 11(-241,83) - (-249,70) = -6345,63 \text{ kJ}$$

2^{ième} cas: pour le mélange pauvre ($R < 1$) on sait que $y^* = v^* = 0$, $x^* = 10$ et $t^* = 11$

$$\Rightarrow \Delta_r H^0 = 10\Delta_f h_{\text{CO}_2}^0 + 11\Delta_f h_{\text{H}_2\text{O}}^0 - \Delta_f h_{\text{C}_{10}\text{H}_{22}}^0$$

On obtient le même résultat que pour le mélange strict.

3^{ième} cas: pour le mélange riche ($R > 1$) on sait que $y^* = z^* = 0$, $x^* = 10$ et $t^* = 31/R - 20$

$$\Rightarrow \Delta_r H^0 = 10\Delta_f h_{\text{CO}_2}^0 + (31/R - 20)\Delta_f h_{\text{H}_2\text{O}}^0 - \Delta_f h_{\text{C}_{10}\text{H}_{22}}^0$$

Pour différentes valeurs de la richesse on obtient le tableau 5.

Tableau 5

Enthalpie de réaction à l'état standard

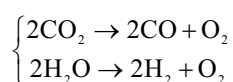
| R | 1,1 | 1,2 | 1,3 | 1,4 | 1,5 |
|---------------------|----------|----------|----------|----------|----------|
| $\Delta_r H^0$ [kJ] | -5664,11 | -5096,18 | -4615,62 | -4203,71 | -3846,72 |

5. Composition des gaz brûlés à température et pression données

Il faut indiquer qu'à une haute température les molécules telles que le CO_2 et le H_2O se dissocient; cette température, qui est celle qui provoque la première cassure moléculaire, correspond à la chaleur de dissociation dégagée par la combustion en ce moment.



Les réactions de dissociation du CO_2 et du H_2O sont



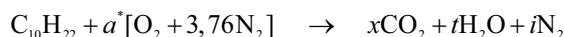
On en déduit alors, que le H_2 , CO et le O_2 présents dans la réaction en haut, proviennent de la dissociation ci-dessus, néanmoins on retrouve toujours du CO_2 et du H_2O dans les produits de la réaction vu que la réaction de dissociation est incomplète.

Bilan

$$\begin{aligned} \text{C} : 10 &= x + y, \\ \text{H} : 22 &= 2t + 2v, \\ \text{O} : 2a &= 2x + y + t + 2z, \\ \text{N} : 3,76a &= i. \end{aligned}$$

On a six inconnus et quatre équations. Traitons les trois cas possibles suivants :

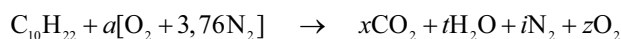
1^{er} cas – mélange strict ($R = 1$): $y = v = z = 0$



Bilan

$$\begin{aligned} \text{C} : 10 &= x && \Rightarrow x = 10, \\ \text{H} : 22 &= 2t && \Rightarrow t = 11, \\ \text{O} : 2a^* &= 2x + t && \Rightarrow a^* = 15,5 \\ \text{N} : 2 \cdot 3,76a^* &= 2i && \Rightarrow i = 58,28. \end{aligned}$$

2^{ième} cas – mélange pauvre ($R < 1$): $y = v = 0$

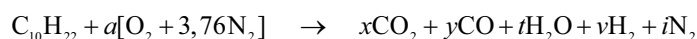


Bilan

$$\begin{aligned} \text{C} : 10 &= x && \Rightarrow x = 10, \\ \text{H} : 22 &= 2t && \Rightarrow t = 11, \\ \text{O} : 2a &= 2x + t + 2z && \Rightarrow z = 2a - 31 \\ \text{N} : 2 \cdot 3,76a &= 2i && \Rightarrow i = 3,76a. \end{aligned}$$

Sachant que $R = a^*/a \Rightarrow z = 31/R - 31$ et $i = 58,28/R$, on obtient les mêmes résultats que l'état standard.

3^{ième} cas – mélange riche ($R > 1$): pas d'oxygène $z = 0$



42

$$\begin{aligned} \text{Bilan} \quad \text{C} : 10 = x + y &\Rightarrow y = 10 - x, \\ \text{H} : 22 = 2t + 2v &\Rightarrow t = 11 - v, \\ \text{O} : 2a = 2x + y + t &\Rightarrow v = x + 21 - 2a, \\ \text{N} : 2 \cdot 3,76a = 2i &\Rightarrow i = 3,76a, \end{aligned}$$

et comme $a = a^*/R$, le système devient

$$\begin{aligned} y = 10 - x &\Rightarrow y = 10 - x, \\ t = 2a^*/R - x - 10 &\Rightarrow t = 31/R - x - 10, \\ v = x + 21 - 2a^*/R &\Rightarrow v = x + 21 - 31/R, \\ i = 3,76a^*/R &\Rightarrow i = 58,28/R. \end{aligned}$$

On remarque qu'on a quatre équations et cinq inconnus, on ajoute une autre équation

$$Kp = \frac{y \cdot t}{x \cdot v} = \frac{(10 - x)(31/R - x - 10)}{x(x + 21 - 31/R)}$$

$$\Rightarrow (Kp - 1)x^2 + (21Kp - 31Kp/R + 31/R)x - 10(31/R - 10) = 0$$

qui a pour déterminant

$$\Delta = (21Kp - 31Kp/R + 31/R)^2 + 40(Kp - 1)(31/R - 10)$$

Les solutions sont

$$x_{1,2} = \frac{-(21Kp - 31Kp/R + 31/R) \pm \sqrt{\Delta}}{2(Kp - 1)}$$

D'après la référence [9], la constante d'équilibre est donnée par

$$Kp = e^{\frac{\Delta_r g^\circ}{R_u T}}$$

$$\Delta_r g^\circ = \Delta_r h^\circ - T \cdot \Delta_r s^\circ$$

$$\Delta_r h^\circ = \sum_i \Delta_f h_i^\circ (\text{produits}) - \sum_i \Delta_f h_i^\circ (\text{réactifs})$$

$$\Delta_r s^\circ = \sum_i s_i^\circ (\text{produits}) - \sum_i s_i^\circ (\text{réactifs})$$

La connaissance de l'enthalpie et de l'entropie standards de formation des constituants entrant en jeu dans la dissociation, avec un choix judicieux de la température, on peut déterminer Kp . Une fois la constante d'équilibre obtenue, on peut donc calculer le déterminant Δ (tableau 6) puis déterminer les fractions molaires pour la réaction de dissociation en commençant par x (solution de l'équation) pour chaque valeur de R , ensuite les autres fractions molaires. On résume les résultats dans le tableau 7.

Tableau 6

Valeurs du déterminant en fonction de T , Kp et R

| T [K] | Kp | Δ | | | | |
|---------|-------|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|
| | | $R = 1,1$ | $R = 1,2$ | $R = 1,3$ | $R = 1,4$ | $R = 1,5$ |
| 1000 | 1,11 | 487,99 | 488,17 | 488,42 | 488,71 | 489,02 |
| 1200 | 2,53 | 1213,59 | 1154,63 | 1124,95 | 1114,23 | 1115,95 |
| 1400 | 4,56 | 2612,70 | 2271,13 | 2091,51 | 2017,37 | 2012,71 |
| 1600 | 7,10 | 4957,12 | 3935,64 | 3391,96 | 3159,88 | 3133,41 |
| 1800 | 10,01 | 8468,80 | 6218,32 | 5014,15 | 4492,77 | 4422,28 |
| 2000 | 13,19 | 13285,33 | 9153,06 | 6935,72 | 5968,44 | 5826,99 |

Tableau 7

Fractions molaires en fonction de la richesse et de la température

| R | T [K] | x | y | t | v | i |
|-----|---------|-------|-------|--------|-------|-------|
| 1,1 | 1000 | 8,595 | 1,405 | 9,587 | 1,413 | 52,98 |
| | 1200 | 8,110 | 1,891 | 10,072 | 0,928 | |
| | 1400 | 7,816 | 2,184 | 10,366 | 0,635 | |
| | 1600 | 7,640 | 2,360 | 10,542 | 0,459 | |
| | 1800 | 7,531 | 2,469 | 10,651 | 0,349 | |
| | 2000 | 7,459 | 2,541 | 10,723 | 0,277 | |
| 1,2 | 1000 | 7,439 | 2,560 | 8,394 | 2,606 | 48,57 |
| | 1200 | 6,656 | 3,345 | 9,178 | 1,822 | |
| | 1400 | 6,157 | 3,843 | 9,676 | 1,324 | |
| | 1600 | 5,837 | 4,163 | 9,996 | 1,004 | |
| | 1800 | 5,626 | 4,374 | 10,208 | 0,793 | |
| | 2000 | 5,481 | 4,519 | 10,353 | 0,647 | |
| 1,3 | 1000 | 6,472 | 3,528 | 7,375 | 3,626 | 44,83 |
| | 1200 | 5,518 | 4,482 | 8,328 | 2,672 | |
| | 1400 | 4,893 | 5,107 | 8,953 | 2,047 | |
| | 1600 | 4,475 | 5,525 | 9,371 | 1,629 | |
| | 1800 | 4,186 | 5,814 | 9,660 | 1,340 | |
| | 2000 | 3,979 | 6,021 | 9,867 | 1,133 | |
| 1,4 | 1000 | 5,650 | 4,350 | 6,493 | 4,507 | 41,63 |
| | 1200 | 4,614 | 5,386 | 7,529 | 3,472 | |
| | 1400 | 3,927 | 6,073 | 8,216 | 2,784 | |
| | 1600 | 3,458 | 6,543 | 8,685 | 2,315 | |
| | 1800 | 3,125 | 6,876 | 9,018 | 1,982 | |
| | 2000 | 2,880 | 7,120 | 9,263 | 1,737 | |
| 1,5 | 1000 | 4,944 | 5,056 | 5,723 | 5,277 | 38,85 |
| | 1200 | 3,885 | 6,116 | 6,782 | 4,218 | |
| | 1400 | 3,182 | 6,818 | 7,485 | 3,515 | |
| | 1600 | 2,700 | 7,300 | 7,967 | 3,033 | |
| | 1800 | 2,357 | 7,643 | 8,319 | 2,691 | |
| | 2000 | 2,104 | 7,896 | 8,563 | 2,437 | |

6. Enthalpie de réaction du mélange (à T et P)

Rappelons quelques notions de thermodynamique

$$H|^{TP} = \sum_i x_i \cdot h_i|^{TP} \quad \text{et} \quad H^\circ = \sum_i x_i^* \cdot h_i^\circ$$

L'enthalpie sensible est définie comme étant

$$H^\circ|^{TP} = H|^{TP} - H^\circ$$

$$\Rightarrow H^\circ|^{TP} = \sum_i x_i h_i|^{TP} - \sum_i x_i^* h_i^\circ = \sum_i x_i h_i|^{TP} + \sum_i x_i^* h_i|^T - \sum_i x_i^* h_i|^T - \sum_i x_i^* h_i^\circ$$

$$\Rightarrow H^\circ|^{TP} = \sum_i x_i^* (h_i|^T - h_i^\circ) + \sum_i (x_i - x_i^*) h_i|^T$$

On introduit le degré d'avancement de la réaction

$$\lambda_r = (x_i - x_i^*) / w_i^r$$

Dans le cas d'une multitude de réactions

$$(x_i - x_i^*) = \sum_r w_i^r \cdot \lambda_r$$

D'où

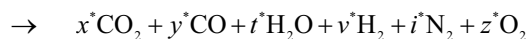
$$H^\circ|^{TP} = \sum_i x_i^* (h_i|^T - h_i^\circ) + \sum_i \left(\sum_r w_i^r \cdot \lambda_r \right) h_i|^T$$

$$\Rightarrow H^\circ|^{TP} = \sum_i x_i^* (h_i|^T - h_i^\circ) + \sum_r \left(\sum_i w_i^r \cdot h_i|^T \right) \lambda_r$$

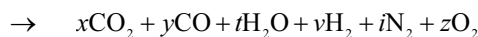
$$\Rightarrow H^\circ|^{TP} = \sum_i x_i^* \cdot h_i^\circ|^T + \sum_r \lambda_r \cdot \Delta_r h|^T$$

λ_r dépend de la nature du mélange et de l'enthalpie de réaction $\Delta_r h|^T$ dont la composition est tabulée [11].

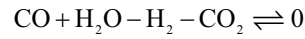
A l'état standard



et à (T, P)



L'équation d'équilibre du gaz à l'eau étant



$$\lambda_r = \frac{x - x^*}{-1} = \frac{x - m}{-1} \quad \text{d'où} \quad \lambda_r = m - x$$

comme $x^* = m = 10$ pour tous les cas du mélange (strict, pauvre et riche), $\lambda_r = 10 - x$. Soit

$$H^o|^T = x^* h_{\text{CO}_2}^o|^T + t^* h_{\text{H}_2\text{O}}^o|^T + v^* h_{\text{H}_2}^o|^T + z^* h_{\text{O}_2}^o|^T + i^* h_{\text{N}_2}^o|^T + (10 - x) \Delta h_{\text{GE}}^o$$

7. Température de fin de combustion isobare

Introduisons la notion de dynalpie entre deux états 1 et 2 d'une transformation thermodynamique

$$\Pi_1^2 = \Pi_2 - \Pi_1 = Q - W,$$

$$\Pi = H + u^2 / 2$$

Pour une transformation adiabatique $Q = 0$, une transformation isobare $P_2 \cong P_1$ et $W = 0$, par conséquent

$$H_2|^T_{P_2} + u_2^2 / 2 = H_1|^T_{P_1} + u_1^2 / 2$$

$$H_i|^TP = H_i^o|^TP + H_i^o$$

$$\Rightarrow H_1|^T_{P_1} = \sum w'_i \cdot h_i|^T_{P_1} \quad \text{et} \quad H_2|^T_{P_2} = \sum w''_i \cdot h_i|^T_{P_2}$$

$$\Rightarrow H_2^o|^T_{P_2} = -\Delta_r H^o + H_1^o|^T_{P_1} + (u_1^2 - u_2^2) / 2$$

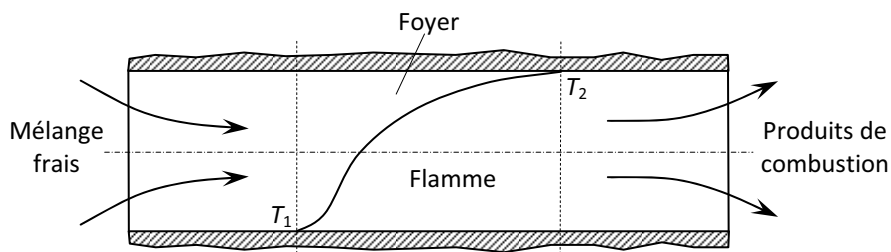


Fig. 1. Schématisation d'un foyer à section constante

Rys. 1. Schemat pieca o stałym przekroju

L'état (1) est celui de référence $H_1^{\circ}|^{T_1} = 0$ où on suppose que $\Delta E_C = \Delta u^2 / 2 \cong 0$, alors:
 $H_2^{\circ}|^{T_2} = -\Delta_r H^{\circ}$ (voir schéma de la figure 2).

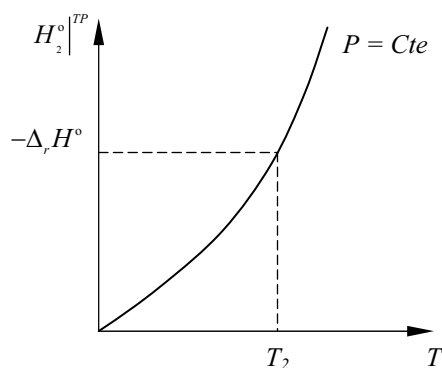


Fig. 2. Détermination graphique de l'enthalpie de réaction

Rys. 2. Graficzne przedstawienie entalpii reakcji

1^{er} cas (mélange strict): rappelons que $y^* = v^* = z^* = 0$, $x^* = 10$, $t^* = 11$ et $i^* = 58,28$ ainsi que $\Delta_r H^{\circ} = -6345,63$ kJ, alors

$$H_2^{\circ}|^T = 10h_{\text{CO}_2}^{\circ}|^T + 11h_{\text{H}_2\text{O}}^{\circ}|^T + 58,28h_{\text{N}_2}^{\circ}|^T + (10-x)\Delta h_{\text{GE}}|^T = -\Delta_r H^{\circ}$$

Pour différentes températures on obtient le tableau 8.

Notons que pour le mélange strict $\lambda_r = 0$, or

$$\lambda_r = \frac{x_i - x_i^*}{-1} = 0$$

$$\Rightarrow x - x^* = 0, \text{ d'où}$$

$$H_2^{\circ}|^T = 10h_{\text{CO}_2}^{\circ}|^T + 11h_{\text{H}_2\text{O}}^{\circ}|^T + 58,28h_{\text{N}_2}^{\circ}|^T = -\Delta_r H^{\circ}$$

Puisque les valeurs de $h_i^{\circ}|^T$ sont tabulées [9] et $H_2^{\circ}|^T = -\Delta_r H^{\circ} = 6345,63$ kJ qui se situe, d'après le tableau 8, entre (6308,56 et 6975,16) kJ, on en déduit que la température T_2 est comprise entre 2400 K et 2600 K et on peut l'obtenir par l'interpolation ci-dessous

$$\frac{H_{2600} - H_{2400}}{2600 - 2400} = \frac{-\Delta_r H^{\circ} - H_{2400}}{T_2 - 2400} \quad \text{ou aussi} \quad \frac{H_{2600} - H_{2400}}{2600 - 2400} = \frac{H_{2600} + \Delta_r H^{\circ}}{2600 - T_2}$$

pour notre cas on a

$$T_2 = \frac{6345,63 - 6308,56}{6975,16 - 6308,56}(2600 - 2400) + 2400 \Rightarrow T_2 = 2411,12 \text{ K}$$

2^{ième} cas (mélange pauvre): on a $x^* = x = 10$, $t^o = 11$, $z^* = 31/R - 31$ et $i^* = 58,28/R$

$$\text{alors: } H_2^o \Big| ^T = 10 h_{\text{CO}_2}^o \Big| ^T + 11 h_{\text{H}_2\text{O}}^o \Big| ^T + (31/R - 31) h_{\text{O}_2}^o \Big| ^T + (58,28/R) h_{\text{N}_2}^o \Big| ^T = -\Delta_r H^o$$

$$\text{avec: } \Delta_r H^o = -6345,63 \text{ kJ}$$

$$\text{a) } R = 0,5: H_2^o \Big| ^T = 10 h_{\text{CO}_2}^o \Big| ^T + 11 h_{\text{H}_2\text{O}}^o \Big| ^T + 31 h_{\text{O}_2}^o \Big| ^T + 116,56 h_{\text{N}_2}^o \Big| ^T$$

De cette équation, on résume nos résultats (tableau 9) afin d'estimer T_2

$$T_2 = \frac{6345,63 - 6255,64}{7513,30 - 6255,64}(1600 - 1400) + 1400 \Rightarrow T_2 = 1414,31 \text{ K}$$

$$\text{b) } R = 0,7: H_2^o \Big| ^T = 10 h_{\text{CO}_2}^o \Big| ^T + 11 h_{\text{H}_2\text{O}}^o \Big| ^T + 13,29 h_{\text{O}_2}^o \Big| ^T + 83,26 h_{\text{N}_2}^o \Big| ^T$$

De même que précédemment, les résultats sont portés dans le tableau 10, soit

$$T_2 = \frac{6345,63 - 6247,16}{7174,80 - 6247,16}(2000 - 1800) + 1800 \Rightarrow T_2 = 1821,23 \text{ K}$$

$$\text{c) } R = 0,9: H_2^o \Big| ^T = 10 h_{\text{CO}_2}^o \Big| ^T + 11 h_{\text{H}_2\text{O}}^o \Big| ^T + 3,44 h_{\text{O}_2}^o \Big| ^T + 64,76 h_{\text{N}_2}^o \Big| ^T$$

Cette équation conduit au tableau 11, d'où

$$T_2 = \frac{6345,63 - 6283,27}{7022,50 - 6283,27}(2400 - 2200) + 2200 \Rightarrow T_2 = 2216,87 \text{ K}$$

3^{ième} cas (mélange riche): $x = 10$, $t = 31/R - 20$, $v = 31 - 31/R$, $i = 58,28/R$ et $y = z = 0$,

$$H_2^o \Big| ^T = 10 h_{\text{CO}_2}^o \Big| ^T + \left(\frac{31}{R} - 20 \right) h_{\text{H}_2\text{O}}^o \Big| ^T + \left(31 - \frac{31}{R} \right) h_{\text{H}_2}^o \Big| ^T + \left(\frac{58,28}{R} \right) h_{\text{N}_2}^o \Big| ^T + (10 - x) \Delta h_{\text{GE}} \Big| ^T$$

$$H_2^o \Big| ^T = -\Delta_r H^o$$

a) $R = 1,1$: dans ce cas on a $\Delta_r H^o = -5664,11 \text{ kJ}$

$$H_2^o \Big| ^T = 10 h_{\text{CO}_2}^o \Big| ^T + 8,18 h_{\text{H}_2\text{O}}^o \Big| ^T + 2,82 h_{\text{H}_2}^o \Big| ^T + 52,98 h_{\text{N}_2}^o \Big| ^T + (10 - x) \Delta h_{\text{GE}} \Big| ^T$$

$H_2^o \Big| ^T = 5664,11 \text{ kJ}$, l'interpolation (tableau 12) nous conduit à l'estimation de T_2

$$T_2 = \frac{5664,11 - 5241,55}{5919,27 - 5241,55}(2400 - 2200) + 2200 \Rightarrow T_2 = 2337,46 \text{ K}$$

b) $R = 1,3$: dans ce cas on a $\Delta_r H^\circ = -4615,62 \text{ kJ}$

$$H_2^\circ \Big|_T = 10 h_{\text{CO}_2}^\circ \Big|_T + 3,85 h_{\text{H}_2\text{O}}^\circ \Big|_T + 7,15 h_{\text{H}_2}^\circ \Big|_T + 44,83 h_{\text{N}_2}^\circ \Big|_T + (10-x) \Delta h_{GE} \Big|_T$$

$$H_2^\circ \Big|_T = 4615,62 \text{ kJ}, \text{ d'où le tableau 13 et l'estimation de } T_2$$

$$T_2 = \frac{4615,62 - 4089,69}{4624,46 - 4089,69} (2200 - 2000) + 2000 \Rightarrow T_2 = 2196,69 \text{ K}$$

c) $R = 1,5$: dans ce cas on a $\Delta_r H^\circ = -3846,72 \text{ kJ}$

$$H_2^\circ \Big|_T = 10 h_{\text{CO}_2}^\circ \Big|_T + 0,67 h_{\text{H}_2\text{O}}^\circ \Big|_T + 10,33 h_{\text{H}_2}^\circ \Big|_T + 38,85 h_{\text{N}_2}^\circ \Big|_T + (10-x) \Delta h_{GE} \Big|_T$$

$$H_2^\circ \Big|_T = 3846,72 \text{ kJ}, \text{ du tableau 14 on déduit } T_2 \text{ qui est proche de } 2000 \text{ K, soit}$$

$$T_2 = \frac{3846,72 - 3691,00}{4171,60 - 3691,00} (2200 - 2000) + 2000 \Rightarrow T_2 = 2064,80 \text{ K}$$

* Les unités adoptées dans le tableau 8 sont valables pour les tableaux 9 à 14.

Tableau 8

Enthalpie H° [kJ] de fin de combustion stœchiométrique fonction de la température

| T [K] | $h_{\text{CO}_2}^\circ \Big _T$ [kJ/kmol] | $h_{\text{H}_2\text{O}}^\circ \Big _T$ [kJ/kmol] | $h_{\text{N}_2}^\circ \Big _T$ [kJ/kmol] | $H_2^\circ \Big _T$ [kJ] |
|---------|---|--|--|--------------------------|
| 2000 | 91420 | 72805 | 56130 | 4986,31 |
| 2200 | 103562 | 83160 | 63360 | 5643,00 |
| 2400 | 115798 | 93944 | 70645 | 6308,56 |
| 2600 | 128107 | 104524 | 77974 | 6975,16 |
| 2800 | 140474 | 115472 | 85338 | 7648,43 |
| 3000 | 152891 | 126563 | 92730 | 8325,41 |

Tableau 9

Enthalpie H° [kJ] de fin de combustion pauvre ($R = 0,5$) fonction de la température

| T | $h_{\text{CO}_2}^\circ \Big _T$ | $h_{\text{H}_2\text{O}}^\circ \Big _T$ | $h_{\text{O}_2}^\circ \Big _T$ | $h_{\text{N}_2}^\circ \Big _T$ | $H_2^\circ \Big _T$ |
|------|---------------------------------|--|--------------------------------|--------------------------------|---------------------|
| 1000 | 33425 | 25993 | 22721 | 21468 | 3826,83 |
| 1200 | 44488 | 34518 | 29775 | 28118 | 5025,04 |
| 1400 | 55882 | 43520 | 36955 | 34939 | 6255,64 |
| 1600 | 67538 | 52939 | 44253 | 41899 | 7513,30 |
| 1800 | 79339 | 62717 | 51660 | 48971 | 8792,80 |
| 2000 | 91420 | 72805 | 59169 | 56130 | 10091,81 |

Tableau 10

Enthalpie H^0 [kJ] de fin de combustion pauvre ($R = 0,7$) fonction de la température

| T | $h_{\text{CO}_2}^0 \Big _T$ | $h_{\text{H}_2\text{O}}^0 \Big _T$ | $h_{\text{O}_2}^0 \Big _T$ | $h_{\text{N}_2}^0 \Big _T$ | $H_2^0 \Big _T$ |
|------|-----------------------------|------------------------------------|----------------------------|----------------------------|-----------------|
| 1200 | 44488 | 34518 | 29775 | 28118 | 3561,39 |
| 1400 | 55882 | 43520 | 36955 | 34939 | 4437,69 |
| 1600 | 67538 | 52939 | 44253 | 41899 | 5334,34 |
| 1800 | 79339 | 62717 | 51660 | 48971 | 6247,16 |
| 2000 | 91420 | 72805 | 59169 | 56130 | 7174,80 |
| 2000 | 103562 | 83160 | 66773 | 63360 | 8113,15 |

Tableau 11

Enthalpie H^0 [kJ] de fin de combustion pauvre ($R = 0,9$) fonction de la température

| T | $h_{\text{CO}_2}^0 \Big _T$ | $h_{\text{H}_2\text{O}}^0 \Big _T$ | $h_{\text{O}_2}^0 \Big _T$ | $h_{\text{N}_2}^0 \Big _T$ | $H_2^0 \Big _T$ |
|------|-----------------------------|------------------------------------|----------------------------|----------------------------|-----------------|
| 1400 | 55882 | 43520 | 36955 | 34939 | 3427,32 |
| 1600 | 67538 | 52939 | 44253 | 41899 | 4123,32 |
| 1800 | 79339 | 62717 | 51660 | 48971 | 4832,35 |
| 2000 | 91420 | 72805 | 59169 | 56130 | 5553,58 |
| 2200 | 103562 | 83160 | 66773 | 63360 | 6283,27 |
| 2400 | 115798 | 93944 | 74467 | 70645 | 7022,50 |

Tableau 12

Enthalpie H^0 [kJ] de fin de combustion riche ($R = 1,1$) fonction de la température

| T | $h_{\text{CO}_2}^0 \Big _T$ | $h_{\text{H}_2\text{O}}^0 \Big _T$ | $h_{\text{H}_2}^0 \Big _T$ | $h_{\text{N}_2}^0 \Big _T$ | x | $\Delta h_{GE} \Big _T$ | $H_2^0 \Big _T$ |
|------|-----------------------------|------------------------------------|----------------------------|----------------------------|-------|-------------------------|-----------------|
| 1400 | 55882 | 43520 | 33092 | 34939 | 7,816 | 30,973 | 2859,27 |
| 1600 | 67538 | 52939 | 39562 | 41899 | 7,640 | 29,303 | 3439,86 |
| 1800 | 79339 | 62717 | 46191 | 48971 | 7,531 | 27,713 | 4031,23 |
| 2000 | 91420 | 72805 | 52968 | 56130 | 7,459 | 26,223 | 4632,95 |
| 2200 | 103556 | 83160 | 59882 | 63360 | 7,385 | 24,796 | 5241,55 |
| 2400 | 115798 | 93744 | 66925 | 70645 | 7,312 | 23,424 | 5856,37 |

Tableau 13

Enthalpie H^0 [kJ] de fin de combustion riche ($R = 1,3$) fonction de la température

| T | $h_{\text{CO}_2}^0 \Big _T$ | $h_{\text{H}_2\text{O}}^0 \Big _T$ | $h_{\text{H}_2}^0 \Big _T$ | $h_{\text{N}_2}^0 \Big _T$ | x | $\Delta h_{GE} \Big _T$ | $H_2^0 \Big _T$ |
|------|-----------------------------|------------------------------------|----------------------------|----------------------------|-------|-------------------------|-----------------|
| 1400 | 55882 | 43520 | 33092 | 34939 | 4,893 | 30,973 | 2529,45 |
| 1600 | 67538 | 52939 | 39562 | 41899 | 4,475 | 29,303 | 3040,56 |
| 1800 | 79339 | 62717 | 46191 | 48971 | 4,186 | 27,713 | 3560,65 |
| 2000 | 91420 | 72805 | 52968 | 56130 | 3,979 | 26,223 | 4089,69 |
| 2200 | 103556 | 83160 | 59882 | 63360 | 3,826 | 24,796 | 4624,46 |
| 2400 | 115798 | 93744 | 66925 | 70645 | 3,709 | 23,424 | 5164,57 |

Enthalpie H^0 [kJ] de fin de combustion riche ($R = 1,5$) fonction de la température

| T | $h_{\text{CO}_2}^0 T$ | $h_{\text{H}_2\text{O}}^0 T$ | $h_{\text{H}_2}^0 T$ | $h_{\text{N}_2}^0 T$ | x | $\Delta h_{GE} T$ | $H_2^0 T$ |
|------|-----------------------|------------------------------|----------------------|----------------------|-------|-------------------|-----------|
| 1400 | 55882 | 43520 | 33092 | 34939 | 3,182 | 30,973 | 2287,41 |
| 1600 | 67538 | 52939 | 39562 | 41899 | 2,700 | 29,303 | 2747,52 |
| 1800 | 79339 | 62717 | 46191 | 48971 | 2,357 | 27,713 | 3215,30 |
| 2000 | 91420 | 72805 | 52968 | 56130 | 2,104 | 26,223 | 3691,00 |
| 2200 | 103556 | 83160 | 59882 | 63360 | 1,911 | 24,796 | 4171,60 |
| 2400 | 115798 | 93744 | 66925 | 70645 | 1,760 | 23,424 | 4656,88 |

8. Analyse et discussion des résultats

La composition des gaz brûlés de la combustion du décane avec l'air est déterminée aux richesses stricte, pauvre et riche à l'état standard. Elle se compose de CO_2 , CO , H_2O , H_2 , N_2 et O_2 . Dans la réaction du mélange strict, tout le carbone et l'hydrogène sont oxydés sans excès d'oxygène, ce qui implique l'absence de CO , H_2 et O_2 . Pour le mélange pauvre il n'y a ni CO ni H_2 , mais les fractions molaires des produits sont fonction de la richesse. Le mélange riche est sans oxygène et la réaction du gaz à l'eau intervient alors en considérant l'absence soit du CO soit du H_2O . S'il n'y a pas de CO et pour R allant de 1,1 à 1,5 on trouve que pour $\text{H}_2\text{O} > 0$, $R < 1,55$ et pour $\text{H}_2 > 0$, $R > 1$ d'où $1 < R < 1,55$, ce qui vérifie notre cas. Pour des valeurs de R entre 1 et 1,55 on obtient les fractions molaires correspondant à ces richesses. Le cas de l'absence de H_2O est rejeté car il n'est pas vérifié.

L'enthalpie standard de réaction est ensuite déterminée pour les trois mélanges. Pour les mélanges strict et pauvre elle a la même valeur qui est de $-6345,63$ kJ, tandis que pour le mélange riche elle dépend de la richesse.

Dans la composition des gaz brûlés à température et pression données, on constate que le H_2 , le CO et l' O_2 proviennent de la dissociation du CO_2 et du H_2O , sachant que ces derniers sont toujours présents dans les produits de combustion car la réaction de dissociation reste incomplète.

Pour le mélange strict, l'équation enthalpique de la combustion à une température donnée dépend uniquement des enthalpies standards tabulées des différents constituants à cette température. A partir de l'enthalpie de réaction qui est égale à l'enthalpie standard de fin de combustion mais de signe négatif avec $H_2^0|T = 6345,63$ kJ, on peut déterminer la température par interpolation qui donne une valeur maximale de 2411,12 K.

L'équation enthalpique de la combustion à une température donnée pour le mélange pauvre, dépend de la richesse R et des enthalpies standards tabulées des différents constituants à cette température. L'enthalpie de réaction est alors indépendante de la richesse et vaut $-6345,63$ kJ, ce qui permet l'estimation de la température par interpolation. On obtient pour des richesses allant de 0,7 à 0,9 des températures de (1414,31 à 2216,87) K et on constate que la température croît avec la richesse et reste inférieure à celle du mélange strict.

Enfin, similairement pour le mélange riche, l'équation enthalpique de la combustion à une température donnée dépend des enthalpies standards tabulées et de la richesse. Sachant que l'enthalpie de réaction est fonction de la richesse, on peut déterminer les

températures correspondantes par interpolation. Ce qui donne, à des richesses allant de 1,1 à 1,5, les enthalpies finales entre (5664,11 et 3846,72) kJ dans un intervalle de températures de (2337,46 à 2064,80) K. On remarque dans ces conditions que la température diminue avec l'augmentation de la richesse en dessous de celle du mélange strict mais comparativement supérieure à celle du mélange pauvre.

9. Conclusions

Une analyse de combustion du décane avec l'air à des proportions du mélange strict, pauvre et riche a été effectuée pour la détermination de la composition des gaz brûlés. Les enthalpies de réaction ont été calculées pour différent cas de richesse à la base des enthalpies standards de formations des espèces mises en jeu.

L'enthalpie de réaction a permis d'estimer par interpolation la température de fin de combustion isobare. Cette température qui croît avec l'augmentation de la richesse pour un mélange pauvre, atteint une valeur maximale en mélange strict puis décroît quand la richesse continue à augmenter au delà de $R = 1$.

La température initiale des gaz frais a un impact sur l'enthalpie du mélange qui a une incidence sur le processus de combustion. La richesse et l'enthalpie de réaction sont primordiales pour la détermination de la température de fin de combustion.

Le réglage de la richesse du mélange combustible est donc un moyen pour contrôler le rendement et les émissions polluantes d'un moteur. Un mélange pauvre est un facteur de bon rendement, mais sa richesse est limitée inférieurement par l'apparition de problèmes de combustion. Le fonctionnement en mélange pauvre réduit les émissions en oxydes d'azote et engendre des émissions d'hydrocarbures imbrûlés où le monoxyde de carbone est favorisé, ce qui accroît largement la pollution. Il n'est pas possible de réduire la richesse indéfiniment car cela se répercute sur la qualité de la combustion, sachant que le taux maximum des NO_x est atteint au voisinage de la stœchiométrie aux températures élevées et disparaît aux plus faibles richesses. Le démarrage à froid nécessite une richesse élevée mais l'excès de carburant durant le fonctionnement d'un moteur n'avantage pas son rendement qui diminue pour un mélange riche lorsque la richesse croît.

La combustion du décane parvient à des températures de fin de combustion assez élevées, ce qui le rend comme carburant proche de la composition du diesel à des performances assez semblables, chose qui le positionne donc comme l'un des carburants de substitution pour des applications urbaines. Le décane est connu pour sa faible production de suie car c'est probablement dû au fait qu'il ne contient pas de composés aromatiques qui sont importants en tant que précurseurs pour la formation de suie.

Références

- [1] Shen H.P.S., Steinberg J., Vanderover J., Oehlschlaeger M.A., *A Shock Tube Study of the Ignition of n-Heptane, n-Decane, n-Dodecane, and n-Tetradecane at Elevated Pressures*, Energy & Fuels, Vol. 23, 2009, 2482-2489.
- [2] Barths H., Pitsch H., Peters N., *3D Simulation of DI Diesel Combustion and Pollutant Formation Using a Two-Component Reference Fuel*, Oil & Gas Science and Technology – Rev. IFP, Vol. 54, No. 2, 1999, 233-244.
- [3] Guha A., *An efficient generic method for calculating the properties of combustion products*, Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part A, Journal of Power and Energy, Vol. 215, Number 3, 2001, 375-387.
- [4] Moréac G., Blurock E.S., Mauss F., *Automatic generation of a detailed mechanism for the oxidation of n-decane*, Combustion Science and Technology, Vol. 178, Issue 10 & 11, Taylor & Francis 2006, 2025-2038.
- [5] Kumar K., *Global combustion responses of practical hydrocarbon fuels: n-heptane, iso-octane, n-decane, n-dodecane and ethylene*, PHD Thesis, Department of Mech. and Aerospace Engineering, Case Western Reserve University, 2007.
- [6] Horning D.C., *A study of the high-temperature auto-ignition and thermal decomposition of hydrocarbons*, Researches Report No TSD-135, Air Force Office of Scientific Research, High-Temperature Gasdynamics Laboratory, Department of Mechanical Engineering, Stanford University, 2001.
- [7] Crochet M., *Adéquation moteurs propres-carburants en combustion homogène, Etude expérimentale en machine à compression rapide et modélisation de carburants modèles types gazoles en milieu ultra-pauvre*, Thèse de Doctorat en Chimie, Université des Sciences et Technologies de Lille, 2008.
- [8] Mzad H., El-guerri M., *Evolution de la composition des gaz brûlés lors de la combustion du kérosène C₁₀H₂₂*, Technical Transactions (Mechanics series), Vol. 106, No. 12(3-M), Wydawnictwo Politechniki Krakowskiej, Kraków 2009, 59-69.
- [9] Turns S.R., *An introduction to combustion – Concepts and applications*, McGraw-Hill Series in Mechanical Engineering, Second Edition, 2000.
- [10] Williams F.A., *Combustion Theory – The Fundamental Theory of Chemically Reacting Flow Systems*, The Benjamin/Cummings Publishing Company Inc., Second Edition, 1985.
- [11] National Institute of Standards and Technology (NIST), accès: 10/12/2010, <http://srdata.nist.gov/gateway/gateway>.