

**REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET
POPULAIRE**

**Ministère de l'Enseignement Supérieur
Et de la Recherche Scientifique**

**CENTRE UNIVERSITAIRE d'EL-OUED
INSTITUT DES SCIENCES ET TECHNOLOGIE**

**Mémoire de fin d'étude
Pour l'obtention du diplôme de**

LICENCE ACADEMIQUE

Domaine: sciences et techniques

Filière : Génie mécanique

Spécialité : mécanique énergétique

Thème

Étude de la combustion dans une chambre
fermée: Calcul des concentrations des produits
de combustion à l'équilibre

Soutenue le 30/06/ 2010

Présenté par :

♦ **CHERIEF BELGACEM**
♦ **HENKA LAZOUZI**

Rapporteur :

M^m. MAHFOUDHI NADJIBA

Session: 2009/2010

Dédicace

Je dédie ce mémoire

A mes parents.

En guise de reconnaissance et de gratitude pour les
sacrifices qu'ils ont fait.

A mes sœurs et frères.

A qui je dois tout l'amour, avec tous mes vœux de les voir
réussir dans leurs vies.

lazouzi

Dédicace

Je dédie ce mémoire

**A mon père et ma mère pour leur soutien tout
ou long de mes études.**

A mes sœurs et frères.

A mes grande mères.

A tous mes oncles, tantes, cousins et cousines.

**A tous les étudiants de 3^{ème} année mécanique
énergétique.**

BELGACEM

Sommaire

CHAPITRE 01: Introduction générale

1.1. Introduction	1
1.2. Objectifs du travail	2
1.3. Organisation du mémoire	3

CHAPITRE 02: Généralité sur la combustion

2.1. Définition de la combustion	4
2.2. Le Combustible	5
2.3. Composition des combustibles solides, liquides et gazeux	6
2.4. Le Comburant	7
2.4.1. Principaux comburants	7
2.4.2. Composition de l'air atmosphérique	8
2.5. Produits de combustion	9
2.6. Pouvoir calorifique supérieur et pouvoir calorifique inférieur	10
2.7. Type de combustion	11
2.7.1. Combustion rapide	11
2.7.2. Combustion lente	11
2.7.3. Combustion complète	12
2.7.4. Combustion incomplète	12
2.7.5. Combustion turbulente	13
1.8. Stœchiométrie d'une réaction	13
2.8.1. Combustion stœchiométrique	14
2.8.2. Combustion non stœchiométrique	14

CHAPITRE 03: Modèle de calcul

3.1. Composition du bois	15
3.2. Combustion du bois	16
3.2.1. Combustion stœchiométrique du bois	16
3.2.1 .Combustion non stœchiométrique du bois	16
3.3. Composition des produits finaux de la combustion	17
3.3.1. Equilibre de réaction	17
3.4.1 Calcul des constantes d'équilibre	20
3.4.2. Température des produits finaux de la combustion	20
3.5. Méthodes numériques utilisées	23
3.5.1. Méthode de résolution de système d'équations non linéaire	23

CHAPITRE 04: Résultats de la simulation

4.1. Calcul du cas stœchiométrique	25
4.2. Calcul des autres cas avec ou sans excès d'air	25

Conclusion	27
-------------------	----

NOMENCLATURE

m_i : la masse de l'élément i

n_i : le nombre de mole du l'élément i

n_t : le nombre de mole total

PM_i : le poids moléculaire de l'élément i

U : l'énergie de l'interne

W : le travail

Q : la quantité de chaleur

H : l'enthalpie

ΔH_R : variation de l'enthalpie de réaction

S : L'entropie

G : fonction de Gibbs.

P : la pression du système

P_i : les pressions partielles

P_0 : une pression de référence (généralement la pression atmosphérique)

V : Volume

T : température

T_F : température finale

K_P : le constante d'équilibre chimique

x_i : la fraction molaire de la substance i .

R : constante universelle des gaz

C_p : la capacité calorifique

L_v : la chaleur latente de vaporisation

PC : Pouvoir Calorifique

PCI : Pouvoir Calorifique Inférieur

PCS : Pouvoir Calorifique supérieur

a : coefficient d'excès d'air

INTRODUCTION

La combustion appartient à un groupe des processus d'oxydation constitués par les réactions chimiques naturelles. Lorsque le processus d'oxydation est suffisamment rapide pour que le dégagement de la chaleur ne puisse être évacué vers l'extérieur des parois du système, la température au sein de la réaction s'élève dans des proportions importantes et ce processus est nommé combustion.

Lors d'une combustion confinée avec défaut d'oxygène, les produits de combustion sont composés essentiellement d'oxyde de carbone. Par manque d'oxygène, la combustion s'éteint même si parfois il subsiste des braises. Les caractéristiques de l'oxyde de carbone sont une grande toxicité et un pouvoir calorifique qui n'est pas négligeable.

L'existence d'oxyde de carbone dans les produits de combustion dans ces conditions, peut mener à l'apparition d'un phénomène appelé « retour de flamme », qui se produit parfois pour un incendie confiné à l'intérieur d'une chambre fermée.

OBJECTIFS DU TRAVAIL

Cette étude vise à apporter une compréhension primaire au phénomène de combustion, à travers l'étude de la combustion du bois.

Dans ce contexte, le présent travail permet de :

- Comprendre la chimie de la combustion ;
- Elaborer un programme qui permet de calculer les concentrations des produits de combustion ainsi que la température de combustion, en utilisant les méthodes numériques adéquates à ce genre de problème;
- Analyser les résultats dans le but de déterminer les concentrations dominantes selon la valeur du coefficient d'excès d'air.

ORGANISATION DU MEMOIRE

Le travail présenté, est organisé de la façon suivante :

Le premier chapitre, est une introduction générale qui présente les objectifs du travail et l'organisation du mémoire.

Le deuxième chapitre, consacré à une recherche bibliographique sur la chimie de la combustion.

Le troisième chapitre est axé sur la présentation de la composition du bois et la combustion de ce combustible.

Le quatrième chapitre, présente la discussion des résultats de calcul basé sur le modèle choisi.

En fin l'ensemble ce termine par une conclusion

2.1. Définition de la combustion [1]:

La combustion est une réaction exothermique complexe entre un combustible et un comburant (air, oxygène pur...). Le combustible est oxydé avec en général un dégagement de chaleur et de lumière.

Trois facteurs doivent être réunis pour que la combustion puisse avoir lieu : un combustible, un comburant et de l'énergie.

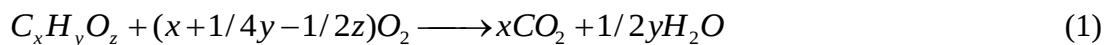
On définit ainsi classiquement le triangle du feu :



Figure. 1: Triangle du feu

La complexité du système réactif réside dans le fait que la combustion ne se déroule pas en une seule étape amenant aux produits finaux (typiquement le dioxyde de carbone et l'eau).

En réalité, de nombreux composés intermédiaires entrent en jeu, comme le monoxyde de carbone, des aldéhydes, des cétones, des alcènes et des espèces oxygénées. L'équation générale présentée ci-dessous montre uniquement la réaction globale mais ne contient aucune information sur les différentes étapes guidant réellement la transformation des réactifs en produits :



Combustible + Comburant → Produits de Combustion + Chaleur

Gaz Air → CO₂, H₂O, N₂, ...

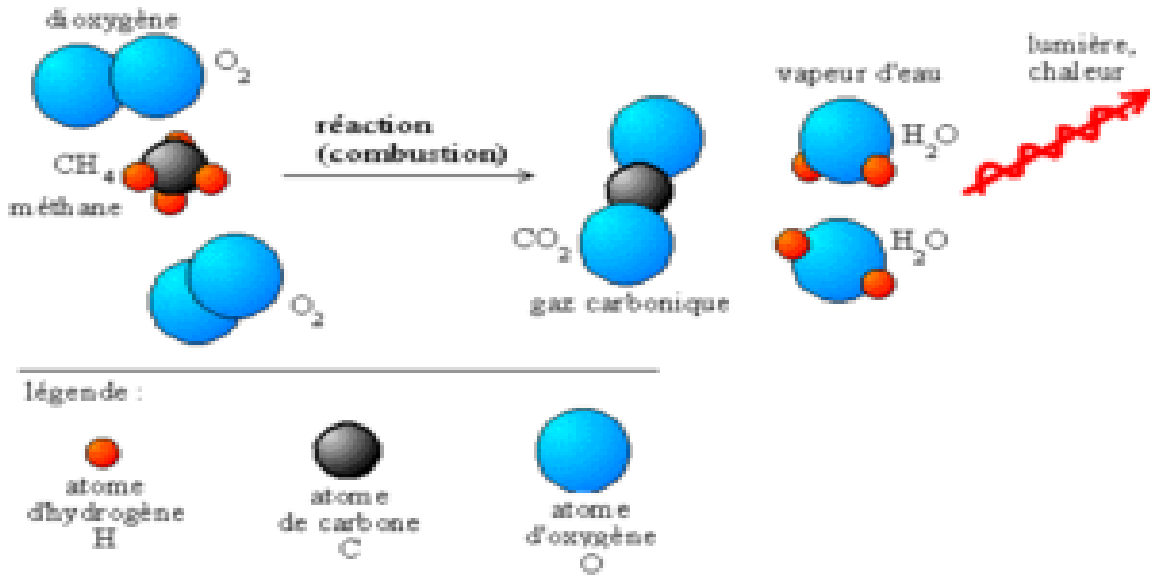


Figure. 2: La réaction chimique de combustion du méthane

Les réactions de combustion, comme toutes les réactions chimiques, se font sans variation de masse de chacun des éléments. Les équations chimiques qui décrivent ces réactions doivent donc satisfaire les données de cette contrainte. À titre d'exemple, les réactions de combustion du carbone et du méthane sont respectivement :



On distingue dans une telle réaction, les réactifs, qui subissent la réaction, que l'on sépare en combustible, qui est l'agent réducteur, et comburant, qui est le corps contenant l'agent oxydant, le plus fréquemment l'air.

2.2. Le Combustible [2]:

Les combustibles peuvent être de provenance et de nature très variées, ils contiennent en quantités variables des éléments utiles : du carbone et de l'hydrogène et des éléments neutres ou mêmes néfastes : de l'oxygène, de l'azote, du soufre, des minéraux (qui se transforment en cendres).

Pour calculer la composition de leurs fumées, il est nécessaire de connaître leur composition chimique.

Le combustible peut être :

- un solide formant des braises (bois, papier, carton, tissu, PVC, ...)

- un liquide ou solide liquéfiable (essence, gazole, huile, kérosène, polyéthylène, polystyrène, ...) ;
- un gaz (butane, propane, méthane, dihydrogène, ...) ;

2.3. Composition des combustibles solides, liquides et gazeux [3]:

C'est à partir de la composition élémentaire du combustible que l'on calcule le pouvoir comburivore, le pouvoir fumigène.

Le pouvoir comburivore est la quantité d'air strictement nécessaire à la combustion stœchiométrique de l'unité de quantité de combustible.

Le pouvoir fumigène est la quantité de fumées issues de la combustion stœchiométrique de l'unité de quantité de combustible.

a) combustibles solides

On connaît les proportions en poids:

(E%) teneur en eau exprimée sur combustible brut

(K%) teneur en cendres exprimée sur combustible sec

(C%) teneur en carbone exprimée sur combustible pur

(H%) teneur en hydrogène exprimée sur combustible pur

(S%) teneur en soufre exprimée sur combustible pur

(O%) teneur en oxygène exprimée sur combustible pur

(N%) teneur en azote exprimée sur combustible pur

Nous exprimons les teneurs en carbone, hydrogène, soufre, oxygène, azote sur combustible brut soit :

$$C\% = (C\%) \frac{100 - E\%}{100} \frac{100 - k\%}{100} \quad (1.1)$$

$$H\% = (H\%) \frac{100 - E\%}{100} \frac{100 - k\%}{100} \quad (1.2)$$

$$S\% = (S\%) \frac{100 - E\%}{100} \frac{100 - k\%}{100} \quad (1.3)$$

$$O\% = (O\%) \frac{100 - E\%}{100} \frac{100 - k\%}{100} \quad (1.4)$$

$$N\% = (N\%) \frac{100 - E\%}{100} \frac{100 - k\%}{100} \quad (1.5)$$

b) Combustibles liquides

La teneur en eau et la teneur en cendres sont négligeables. On pourra utiliser directement les teneurs $C\%$, $H\%$, $S\%$, $O\%$, $N\%$ sur combustible pur

c) Combustibles gazeux

Pour les combustibles gazeux, dont on élimine facilement les composés soufrés, les fractions volumiques ou molaires donnent directement accès à la stoechiométrie et l'établissement de la formule ci-dessus normée à l'atome de carbone est immédiat. Ainsi, un combustible gazeux de composition $[H_2]$, $[CO]$, $[CO_2]$, $[H_2O]$, $[N]$

2.4. Comburant [4]:

Un comburant est le corps qui provoque et entretient la combustion du combustible ; le plus souvent, le comburant est constitué par l'oxygène présent dans l'air ambiant ; la réaction de combustion est alors une oxydation ; mais il existe de multiples autres comburants (halogènes, soufre, phosphore). Dans la pratique, l'oxygène peut se trouver soit à l'état pur, soit en mélange avec d'autres gaz.

Dans la plupart des cas, le comburant est l'oxygène de l'air ambiant (environ 21 % d'oxygène 79 % d'azote). Pour que l'air soit un comburant efficace, il faut qu'il contienne plus de 15 % d'oxygène.

2.4.1. Principaux comburants [5]:

- Oxygène O_2
- Ozone O_3
- Eau oxygénée H_2O_2
- Halogène : Fluor, Chlore, Brome, Iode
- Hypochlorite et autre hypohalogène
- Chlorite, chlorate, perchlorate, et autres composé oxydé d'halogènes
- Acide nitrique
- Dioxyde d'azote (NO_2)
- Oxyde métallique (notamment oxydes de fer ou de cuivre)
- Potassium iodates

- Octasoufre (S_8)
- Salpêtre (nitrate de potassium)

2.4.2. Composition de l'air atmosphérique :

La composition moyenne en volume de l'air atmosphérique sec est la suivante:

Oxygène : 20,8%

Azote : 78,2%

Argon : 0,93%

Hydrogène, Hélium, Néon

Krypton, Xénon, Ozone: Traces

Gaz carbonique : 0,03%

Pour les calculs relatifs à la combustion, nous considérerons que la proportion en volume est de 20,8% d'oxygène pour le complément en azote soit 79,2%.

La proportion en poids est alors:

L'oxygène :

$$\frac{32 \times 20,8}{22,4} = 29,7$$

L'azote :

$$\frac{28 \times 79,2}{22,4} = 99$$

32 et 28 étant respectivement les masses molaires de l'oxygène et de l'azote.

Exprimée en "pour cent" la proportion en poids d'oxygène et d'azote est la suivante:

L'oxygène :

$$\frac{29,7}{29,7 + 99} \times 100 = 23\%$$

L'azote :

$$\frac{99}{29,7 + 99} \times 100 = 77\%$$

2.5. Produits de combustion [6]:

La combustion conduit à la formation de résidus solides et gazeux. Les résidus solides sont constitués par :

- les cendres que l'on recueille dans les foyers sous forme pulvérulente ou à l'état de mâchefers.
- le carbone imbrûlé que l'on trouve dans les cendres ou les mâchefers
- les particules de fine granulométrie qui se trouvent en suspension dans les fumées et qui constituent les suies.

Les résidus gazeux ou fumées comprennent essentiellement l'azote amené par le comburant ainsi que les gaz issus de la combustion du carbone, de l'hydrogène, du soufre. La composition des fumées dépend du combustible brûlé ainsi que du type de combustion réalisée.

On considère :

- la combustion stoechiométrique ou neutre dans laquelle les fumées contiennent CO_2 , H_2O , N_2 éventuellement SO_2 , pas d'imbrûlés gazeux ni d'oxygène libre. C'est une combustion complète sans excès ni défaut d'air qui conduit au rendement de combustion maximum. Pour des raisons techniques (température trop élevée entraînant des dissociations, temps de contact trop faible entre l'oxygène et le combustible), on réalise rarement dans la pratique industrielle ce genre de combustion. Elle joue cependant un rôle capital car elle sert de base à l'étude de toutes les autres combustions.
- la combustion oxydante dans laquelle les fumées contiennent CO_2 , H_2O , SO_2 , SO_3 , N_2 et de l'oxygène libre. C'est une combustion complète avec un excès d'air. Par rapport à la combustion neutre, le rendement de combustion est diminué par augmentation des pertes par chaleur sensible des fumées.
- la combustion réductrice où l'on trouve dans les fumées CO_2 , H_2O , SO_2 , N_2 , des imbrûlés gazeux comme CO et parfois H_2 , pas d'oxygène libre. C'est une combustion

incomplète par défaut d'air. La présence d'imbrûlés gazeux diminue le rendement de combustion.

- la combustion mixte dans laquelle les fumées contiennent CO_2 , H_2O , N_2 , SO_2 , SO_3 , de l'oxygène libre et des imbrûlés comme CO et H_2 .

C'est un cas particulièrement défavorable. La présence d'imbrûlés et d'oxygène libre est dû à plusieurs facteurs :

- a) température trop élevée qui entraîne des dissociations
- b) mauvaise pulvérisation d'un combustible liquide (brûleurs en mauvais état, pré chauffage insuffisant d'un fuel lourd)
- c) combustible solide ou mélange de combustibles solides qui libèrent des cendres trop fusibles;
- d) foyer trop froid
- e) turbulence insuffisante au foyer
- f) chambre de combustion mal dimensionnée où la flamme ne peut pas se développer normalement.

On distingue:

- Les combustions mi-oxydantes où l'air est en excès.
- Les combustions mi-réductrices où l'air est en défaut.

2.6. Pouvoir calorifique supérieur et pouvoir calorifique inférieur [7]:

Pour apprécier un combustible comme fournisseur de chaleur, la quantité de chaleur dégagée lors de la combustion d'une unité quantitative ou volumique est importante :

Le pouvoir calorifique supérieur PCS est la quantité de chaleur dégagée par la combustion complète de 1 m³ de gaz naturel, lorsque les produits de la combustion sont refroidis à la température de départ (température de référence 25° C) et que l'eau issue de la combustion est à l'état liquide.

Le pouvoir calorifique inférieur PCI est la quantité de chaleur dégagée par la combustion complète de 1 m³ de gaz naturel, lorsque les produits de la combustion sont refroidis à la température de départ (25° C) et que l'eau issue de la combustion est à l'état gazeux ou de vapeur.

En phase gazeuse. Par l'analyse on obtient la composition chimique du combustible. Au moyen d'un calorimètre on mesure en continu le pouvoir calorifique supérieur PCS. A partir de la

composition du gaz on calcule le pouvoir calorifique supérieur PCS que l'on compare avec les valeurs du calorimètre. Les valeurs mesurées et calculées doivent concorder très précisément. Le pouvoir calorifique inférieur PCI est également calculé à partir de la composition du gaz.

La différence entre le PCI et le PCS est la chaleur latente de vaporisation de l'eau (L_v) multipliée par la quantité de vapeur produite (m), qui vaut à peu-près $2\,250\text{ kJ}\cdot\text{kg}^{-1}$ (cette dernière valeur dépend de la pression et de la température).

On a la relation :

$$\text{PCS} = \text{PCI} + m \cdot L_v. \quad (1.6)$$

Le tableau ci-dessous représente quelques valeurs du PCI, PCS en kW h :

Tableau 1.1: Pouvoir calorifique inférieur et supérieur de quelque combustibles

Désignation	PCI	PCS
Fioul domestique	12 kWh/kg	12,8 kWh/kg
Gaz Naturel	10,2 kWh/m ³	11,3 kWh/m ³
Propane	25,479 kWh/m ³	27,589 kWh/m ³
Butane	34,33 kWh/m ³	37,22 kWh/m ³
Bois	5,11 kWh/kg	5,46 kWh/kg

2.7. Type de combustion [8]:

2.7.1. Combustion rapide :

La combustion rapide est une forme de combustion au cours de laquelle de grandes quantités de chaleur et d'énergie sous forme de lumière sont relâchées, donnant naissance au feu. Elle est utilisée dans certaines machines telles que les moteurs à combustion interne.

2.7.2. Combustion lente

La combustion lente est une réaction se réalisant à des températures peu élevées. On peut citer le cas de la respiration cellulaire : cette lenteur due à des enzymes spécifiques permettent d'augmenter les réactions d'oxydoréduction et ainsi d'obtenir un très bon rendement par récupération d'une grande partie de l'énergie.

2.7.3. Combustion complète :

Lors d'une combustion complète, le réactif réagira avec le comburant jusqu'à former des produits qui ne pourront plus être oxydés, c'est-à-dire que ces produits ne peuvent plus réagir avec le comburant: les produits ont atteint un degré de stabilité qu'une réaction de combustion ne peut modifier. Dans le cas d'un hydrocarbure réagissant avec le dioxygène, les produits de combustion sont le dioxyde de carbone et de l'eau. Il existe pour chaque élément un produit de combustion stable, ainsi une combustion complète fournit les mêmes produits de réactions quels que soient les réactifs.

Une combustion complète permet d'obtenir la quantité maximale d'énergie disponible par une substance et cette énergie est définie comme étant le pouvoir calorifique.

2.7.4. Combustion incomplète:

La combustion incomplète a lieu quand il n'y a pas assez de comburant pour permettre la réaction complète du combustible ou lorsque le temps de contact à une température rendant la combustion possible est trop faible. Elle produit donc des résidus de combustion, sous forme de cendres qui génèrent des fumées, dont certains composés sont très toxiques pour l'homme et pour l'environnement tel que le monoxyde de carbone (gaz mortel), des particules de carbone pur (suie, goudron, cendres), des oxydes d'azote, des hydrocarbures (cancérigènes tels le benzène, ou fortement toxiques tels les HAP), des composés organiques volatiles.

La réaction de combustion est habituellement incomplète et seul un contrôle des conditions permet d'obtenir une combustion complète, telle que la combustion en présence d'un excès d'oxygène à haute température.

En cas de combustion incomplète, il est possible de traiter les fumées une seconde fois pour réduire les imbrûlés comme dans le cas des moteurs d'automobiles où les pots d'échappement et les filtre à particule permettent une seconde combustion à plus faible température grâce à des catalyseurs.

2.7.5. Combustion turbulente :

La combustion turbulente est une combustion caractérisée par des flux de chaleur. Elle est souvent utilisée dans l'industrie (par exemple , les turbines à gaz, les moteurs diesel...) car la chaleur facilite l'opération de mélange entre le combustible et l'oxydant.

1.8. Stœchiométrie d'une réaction [9]:

Stœchiométrie est un mot composé en 1846, à partir de la racine grecque stœkheion qui signifie élément, et de métrie, la mesure. La stœchiométrie étudie au cours d'une réaction chimique les proportions suivant lesquelles les réactifs se combinent, et les produits se forment. Pour être plus clair, prenons l'exemple illustré par l'animation. ci-dessous au cours de cette réaction chimique, la combustion du méthane, on constate que seule la forme des molécules est modifiée, et que les atomes qui composent les molécules ne font que de se lier différemment à d'autres atomes. L'équation bilan de cette réaction s'écrit de la façon suivante :

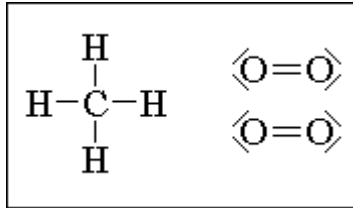
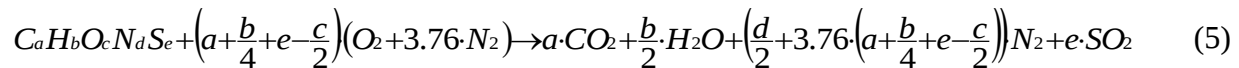


Figure. 3: la formulation chimique de la molécule de Méthane

La stœchiométrie permet de fixer une règle pour rendre compte de la conservation du nombre d'atomes au cours d'une réaction chimique.

La réaction de combustion d'un combustible dont la formule générale est $C_a H_b O_c N_d S_e$ dans air est:



L'air est constitué de 21% d' O_2 et de 79% de N_2 d'où :

$$\text{Air} = (O_2 + (0.79/0.21) N_2) = (O_2 + 3.76 N_2)$$

2.8.1. Combustion stœchiométrique [10]:

la combustion stœchiométrique appelée combustion neutre, est une combustion complète sans excès ni défaut d'air. C'est une combustion idéale dans laquelle les fumées ne contiennent que CO_2, H_2O, N_2, SO_2

Le pouvoir comburivore, le pouvoir fumigène, la teneur en CO_2 des fumées caractérise cette combustion.

Exemple : $C + 2 O_2 \longrightarrow CO_2 + O_2$ il y a trop d'oxygène (6)

$2 C + O_2 \longrightarrow CO_2 + C$ il y a trop de carbone (7)

2.8.2. Combustion non stœchiométrique :

Si lors d'une combustion on utilise une quantité d'air supérieur à la valeur stœchiométrique, on dit que cette combustion est non-stœchiométrique, ou oxydante.

Les conditions non-stœchiométriques sont des conditions qui consistent à mélanger les réactifs en ne respectant pas les proportions indiquées dans l'équation équilibrée.

3.1. Composition du bois [11]:

La composition chimique des combustibles solides est très complexe et pratiquement impossible à déterminer. Le tableau 3.1 représente l'analyse élémentaire du bois.

Tableau 3.1: La Composition en% de masse du bios.

Espèces	Composition en% de masse
<i>C</i>	51.01
<i>H</i>	6.06
Soufre combustible	/
<i>N</i>	42.26
<i>O</i>	0.67

Pour calculer la formule chimique de bois on procède comme suit :

$$\text{C: } n_C = \frac{m_C}{PM_C} = \frac{0.5101g}{12 \frac{g}{mole}} = 0.0425 \text{ moles}$$

$$\text{H: } n_H = \frac{m_H}{PM_H} = \frac{0.0606g}{1 \frac{g}{mole}} = 0.0606 \text{ moles}$$

$$\text{O: } n_O = \frac{m_O}{PM_O} = \frac{0.4226g}{16 \frac{g}{mole}} = 0.0264 \text{ moles}$$

$$\text{N: } n_N = \frac{m_N}{PM_N} = \frac{0.0067g}{14 \frac{g}{mole}} = 0.0004 \text{ moles}$$

Où :

m_i : est la masse de l'élément i .

PM_i : est le poids moléculaire de l'élément i .

Le nombre de mole de l'Azote est négligeable devant celui du Carbone, de l'Hydrogène, et de l'oxygène.

La formule chimique du bois est: $C_{0.0425}H_{0.0606}O_{0.0264}$

L'analyse centésimale du bois permet de définir la formule chimique suivante valable pour la plupart des références qui utilisent le bois comme combustible [12]:

$$\left. \begin{array}{l} n_C = 0.0425 \longrightarrow n_C = 1 \\ n_H = 0.0606 \longrightarrow n_H = \end{array} \right\} \Rightarrow n_H = 1.44$$

$$\left. \begin{array}{l} n_C = 0.0425 \longrightarrow n_C = 1 \\ n_O = 0.0264 \longrightarrow n_O = \end{array} \right\} \Rightarrow n_O = 0.66$$

La formule chimique finale : $C H_{1.44} O_{0.66}$

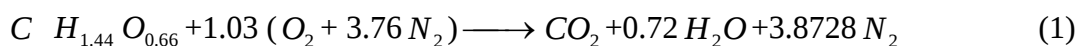
3.2. Combustion du bois :

3.2.1. Combustion stoechiométrique du bois :

La combustion complète du bois se développe en 4 phases successives :

- phase d'évaporation de l'eau du bois au cours de laquelle quelques composés volatils peuvent être entrainés,
- dès 200°C, le bois subit une décomposition conduisant à un dégagement gazeux des matières volatiles et à un résidu charbonneux,
- les matières volatiles brûlent en flamme de diffusion,
- le résidu charbonneux (braise) s'oxyde par une réaction surfacique.

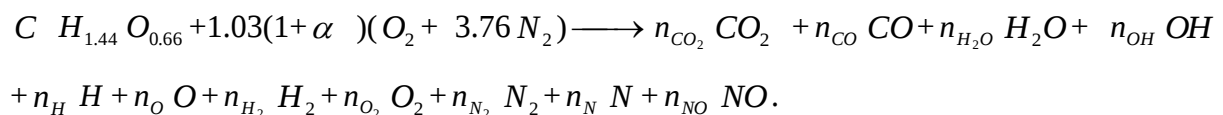
la réaction de Combustion stoechiométriques d'un bois est :



3.2.1 .Combustion non stoechiométrique du bois:

La combustion incomplète du bois est appelée gazéification, elle produit des gaz combustibles : oxyde de carbone, hydrogène ou totalement oxydés : gaz carbonique.

la réaction de Combustion non stoechiométriques d'un bois est :



3.3. Composition des produits finaux de la combustion :

2.3.1. Equilibre de réaction

Si le système a suffisamment de temps pour réagir, les espèces présentes et résultantes réagiront entre elles jusqu'à atteindre un équilibre qui se caractérise pour une coexistence déterminée des différentes espèces. Pour prédire les concentrations de ces espèces en l'équilibre, il est possible d'utiliser différents algorithmes:

- algorithme de la minimisation d'énergie libre de Gibbs.
- algorithme des constantes d'équilibre.

Mais, les deux algorithmes ont la même base. Une réaction chimique réversible en équilibre, l'énergie libre de réaction est zéro.

La condition d'équilibre pour un système chimique peut être obtenue à partir du premier.

Le premier principe s'applique à toutes les évolutions réversibles:

Le premier principe de thermodynamique s'écrit comme suit:

$$dU = \delta Q - PdV \quad (3.1)$$

$$\delta Q = dU + PdV \quad (3.2)$$

$$TdS = dU + PdV \quad (3.3)$$

L'enthalpie libre (G , fonction de Gibbs) est donné par :

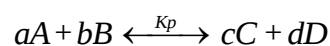
$$dG = d(U + PV - TS) = dU + PdV + VdP - TdS - SdT \quad (3.4)$$

$$dG = VdP - SdT \quad (3.5)$$

Pour une évolution isotherme $dT = 0$

$$G - G^0 = nRT \ln P \quad (3.6)$$

Soit la réaction chimique suivante :



En appliquant la formule pour le système des réactifs et des produits.

$$\Delta G = G_C + G_D - G_A - G_B \quad (3.7)$$

$$\Delta G = \Delta G_0 + RT \ln P_D + RT \ln P_C - RT \ln P_A - RT \ln P_B \quad (3.8)$$

$$\Delta G = \Delta G_0 + RT \ln \frac{P_C^c \cdot P_D^d}{P_A^a \cdot P_B^b} \quad (3.9)$$

Pour l'équilibre thermodynamique $\Delta G = 0$.

$$Kp = e^{-\Delta G^0 / RT} = f(T) \quad (3.10)$$

Cette équation démontre la dépendance de la constante d'équilibre avec la température.

$$kp = \frac{P_C^c \cdot P_D^d}{P_A^a \cdot P_B^b} \quad (3.11)$$

kp : le constante d'équilibre chimique [12, 13]

Pour l'élément i se déduire de la relation : $P_i = x_i \cdot \frac{P}{P_0}$

Où :

P_i : Les pressions partielles

P : la pression du système

P_0 : une pression de référence (généralement la pression atmosphérique)

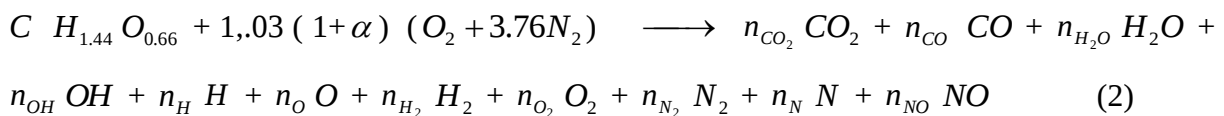
x_i est la fraction molaire de la substance i : $x_i = \frac{n_i}{n_t}$

n_i : le nombre de mole de l'espèce i

n_t : le nombre de mole total.

3.4. Modèle de calcul :

La réaction globale de la combustion du bois :



Les principaux produits des réactions de combustion sont : CO_2 , H_2O , O_2 , N_2 , CO , H_2 , H , N , O , OH , NO

Pour établir la condition d'équilibre à une température T et une pression p de combustion concrète, il est nécessaire d'avoir le même nombre d'équations que le nombre des produits finaux.

Le système d'équations est formé pour quatre bilans de moles pour un mole de bois et pour sept équations d'équilibre.

Le bilan molaire des éléments principales (C , H , O , N) est comme suit:

$$1\text{-Bilan molaire du carbone : } n_{CO_2} + n_{CO} = 1 \quad (3.12)$$

$$2\text{-Bilan molaire du hydrogène : } 2.n_{H_2O} + n_{OH} + n_H + 2.n_{H_2} = 1,44 \quad (3.13)$$

3-Bilan molaire du oxygène :

$$2.n_{CO_2} + n_{CO} + n_{H_2O} + n_{OH} + n_O + 2.n_{O_2} + n_{NO} = 0,66 + 2,06(1+\alpha) \quad (3.14)$$

$$4\text{-Bilan molaire de l'azote : } 2.n_{N_2} + n_N + n_{NO} = 7,7456(1+\alpha) \quad (3.15)$$

Les réactions de formation des différentes espèces sont:



$$K_{p1} = (n_H^2 / n_{H_2O}).(P / n_t) \quad (3.16)$$



$$K_{p2} = (n_O^2 / n_{O_2}).(P / n_t) \quad (3.17)$$



$$K_{p3} = (n_N^2 / n_{N_2}).(P / n_t) \quad (3.18)$$



$$K_{p4} = (n_{NO}^2 / (n_{N_2} . n_{O_2})) \quad (3.19)$$



$$K_{p5} = (n_{CO}^2 . n_{O_2} / n_{CO_2}^2).(P / n_t) \quad (3.20)$$



$$K_{p6} = (n_{H_2}^2 . n_{O_2} / n_{H_2O}^2).(P / n_t) \quad (3.21)$$



$$K_{p7} = (n_{OH}^2 . n_{H_2} / n_{H_2O}^2).(P / n_t) \quad (3.22)$$

P : la pression totale du système en atmosphère,

La pression de référence est de : 0,1MPa

Le système obtenu est non linéaire

3.4.1 calcul de la constante d'équilibre :

La constante d'équilibre Kp est fonction de la température et elle représente la constante correspondante à la réaction de fonction de formation d'une mole de la substance à partir des éléments qui la forment dans son état de référence. Elle est définie dans des tables [13]. Elle se calcule avec la relation :

$$\text{Log}(Kp_{\text{réaction}}) = c.\text{Log}(Kp_{f,C}) + d.\text{Log}(Kp_{f,D}) - a.\text{Log}(Kp_{f,A}) - b.\text{Log}(Kp_{f,B}) \quad (3.23)$$

Par conséquent, les constantes d'équilibre se calcul à partir des équations suivante :

$$\text{Log}(Kp_1) = 2.\text{Log}(Kp_{f,H}) - \text{Log}(Kp_{f,H_2}) \quad (3.24)$$

$$\text{Log}(Kp_2) = 2.\text{Log}(Kp_{f,O}) - \text{Log}(Kp_{f,O_2}) \quad (3.25)$$

$$\text{Log}(Kp_3) = 2.\text{Log}(Kp_{f,N}) - \text{Log}(Kp_{f,N_2}) \quad (3.26)$$

$$\text{Log}(Kp_4) = 2.\text{Log}(Kp_{f,NO}) - \text{Log}(Kp_{f,N_2}) - \text{Log}(Kp_{f,O_2}) \quad (3.27)$$

$$\text{Log}(Kp_5) = 2.\text{Log}(Kp_{f,CO}) - \text{Log}(Kp_{f,O_2}) - \text{Log}(Kp_{f,CO_2}) \quad (3.28)$$

$$\text{Log}(Kp_6) = 2.\text{Log}(Kp_{f,H_2}) - \text{Log}(Kp_{f,O_2}) - \text{Log}(Kp_{f,H_2O}) \quad (3.29)$$

$$\text{Log}(Kp_7) = 2.\text{Log}(Kp_{f,OH}) - \text{Log}(Kp_{f,H_2}) - \text{Log}(Kp_{f,H_2O}) \quad (3.30)$$

3.4.2. Température des produits finaux de la combustion :

Dans l'étude de la combustion, il est nécessaire de considérer les processus de transfert de chaleur entre le système et son milieu.

Si en pratique, dans la combustion, il y a transfert d'énergie vers le milieu. La combustion adiabatique, sans transfert de chaleur, s'utilise comme processus idéal de référence.

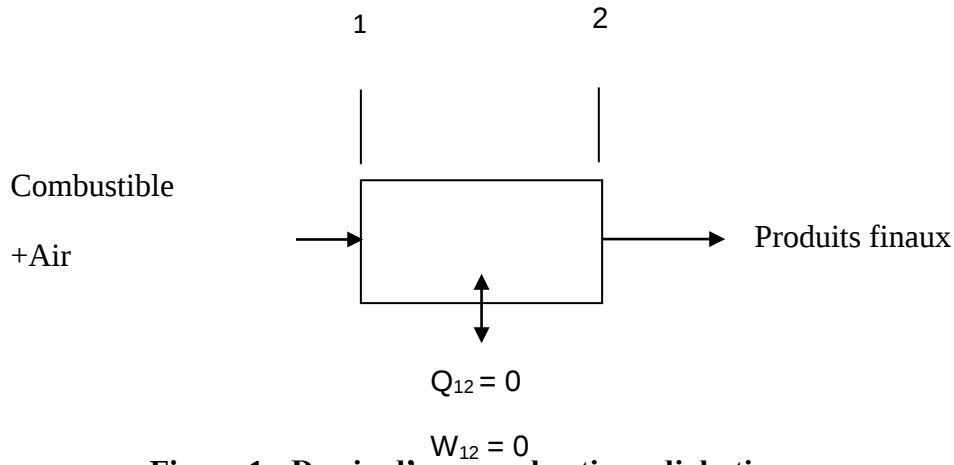


Figure 1 : Dessin d'une combustion adiabatique

Il n'y a pas de transfert de chaleur avec le milieu, ni échange de travail, ni variation de l'énergie cinétique, l'application du premier principe de la thermodynamique indique que ce processus sera isoenthalpique, l'énergie dégagée sert à augmenter l'enthalpie des produits. Le processus est isoenthalpique.

$$H_{\text{réactif (combustible)}} = H_{\text{produit}} \quad (3.31)$$

L'application du 1^{er} principe de la thermodynamique $\Delta H_R = 0$

$$\Delta H_R = -H_{\text{réactif}} + H_{\text{produit}} = -\Delta H_R^\circ + \Delta H_{\text{produit}} = 0 \quad (3.32)$$

ΔH_R : variation de l'enthalpie de réaction.

$$\Delta H_R^\circ = PCI_{\text{bois}} \quad (3.33)$$

$$\Delta H_{\text{produit}} = \sum_{\text{produit}} n_i [h(T_{\text{ad}}) - h_0] = \sum_{\text{produit}} n_i \int_{T_0}^T Cp(T) dT \quad (3.34)$$

$$\Delta H_R = -PCI_{\text{bois}} + \sum_{i=11} n_i \int_{T_0}^T Cp_i(T) dT = 0 \quad (3.35)$$

La pouvoir calorifique réel du bois PCI se déduit du pouvoir calorifique supérieur P_{CS} en tenant compte du taux d'humidité H (%) du bois.

$$P_{cr} \left(\frac{KJ}{Kg \text{ de bois sec}} \right) = (P_{cs} (KJ / Kg) - 4000) \cdot (1 - 0,012 \cdot H) \quad (3.36)$$

Le bois des meubles étant sec : $H = 0$, alors $P_{cr} = 16310 \text{ kJ / kg}$.

La quantité de chaleur dégagée par la combustion du bois augmente la température de chaleur de gaz, composant les produits de combustion.

La capacité calorifique à pression constante d'un gaz, se met sous la forme suivante en fonction de la température :

$$Cp = R(a_0 + a_1T + a_2T^2 + a_3T^3 + a_4T^4) \quad (3.37)$$

Où :

R est la constante des gaz universelle : $R = 8314 \text{ J/mole.K}$

La valeur des constantes a_0 , a_1 , a_2 , a_3 , a_4 sont présentées dans le tableau ci-dessous [12] :

Tableau 3.1: Coefficients de la capacité calorifique.

	a_0	a_1	a_2	a_3	a_4
CO	3.0484859	1.3517281e-3	-7.8579405e-7	7.8853644e-11	-4.6980746e-15
CO₂	4.6365111	2.7414569e-3	-9.9589759e-7	1.6038666e-10	-9.1619857e-15
H	2.5	0	0	0	0
H₂	2.9328305	8.2659802e-4	-1.4640057e-7	1.5409851e-11	-6.8879615e-16
H₂O	2.6770389	2.9731816e-3	-7.7376889e-7	9.4433514e-11	-7.2689991e-15
N₂	2.9525407	1.3968838e-3	-4.9262577e-7	7.8600091e-11	-4.6074978e-15
NO	3.2607123	1.1910114e-3	-4.2912265e-7	6.9448146e-11	-4.0329568e-15
N	2.4159429	1.7489065e-4	-1.1902369e-7	3.0226244e-11	-2.0360983e-15
O	2.5436370	-2.7316249e-5	-4.1902952e-9	4.9548185e-12	-4.7955369e-16
O₂	3.6609608	6.5636552e-4	-1.4114949e-7	2.0579766e-11	-1.2991325e-15
OH	2.8386461	1.1072559e-3	-2.9391498e-7	4.2052425e-11	-2.4216909e-15

La température du mélange de gaz nécessite de calculer l'intégrale suivante :

$$\sum_{\text{produit}} n_i \int_{T_0}^T Cp(T) dT - PCI_{\text{bois}} = 0 \quad (3.38)$$

$$\int_{T_0}^T (n_{\text{CO}} Cp_{\text{CO}} + n_{\text{CO}_2} Cp_{\text{CO}_2} + n_{\text{H}} Cp_{\text{H}} + n_{\text{H}_2} Cp_{\text{H}_2} + n_{\text{H}_2\text{O}} Cp_{\text{H}_2\text{O}} + n_{\text{N}_2} Cp_{\text{N}_2} + n_{\text{NO}} Cp_{\text{NO}} + n_{\text{N}} Cp_{\text{N}} + n_{\text{O}} Cp_{\text{O}} + n_{\text{O}_2} Cp_{\text{O}_2} + n_{\text{OH}} Cp_{\text{OH}}) dT = Pcr.m_{\text{bois}} \quad (3.39)$$

Qui se met sous la forme:

$$AT^5 + B.T^4 + C.T^3 + D.T^2 + E.T + F = 0 \quad (3.40)$$

Où les coefficients A, B, C, D, E et F sont :

$$A = \sum_{produits} \frac{n_i \cdot a_{5i}}{5}$$

$$B = \sum_{produits} \frac{n_i \cdot a_{4i}}{4}$$

$$C = \sum_{produits} \frac{n_i \cdot a_{3i}}{3}$$

$$D = \sum_{produits} \frac{n_i \cdot a_{2i}}{2}$$

$$E = \sum_{produits} n_i \cdot a_{1i}$$

$$F = -\frac{PCR \cdot m_{bois}}{R} - n_i \cdot \sum_{produits} \left(a_{1i} \cdot T_0 + \frac{a_{2i}}{2} \cdot T_0^2 + \frac{a_{3i}}{3} \cdot T_0^3 + \frac{a_{4i}}{4} \cdot T_0^4 + \frac{a_{5i}}{5} \cdot T_0^5 \right)$$

La température de référence $T_0 = 298 \text{ K}$

C'est un polynôme du cinquième ordre en T avec 5 solutions dont une seule est cohérente. Le calcul est effectué sur ordinateur en recherchant quelle est la valeur de la température qui résout l'équation avec une précision suffisante.

3.5 Méthodes numériques utilisées:

3.5.1. Méthode de résolution de système d'équations non linéaire

Parmi les méthodes de résolution des systèmes non linéaire, notre choix s'est porté sur la méthode de Newton Raphson pour sa convergence quadratique.

➤ Méthode Newton Raphson : [14-15]

Sous sa forme monodimensionnel, la méthode de Newton Raphson, est le procédé le plus utilisé pour résoudre une équation $\ll f(x) = 0 \gg$

Basée sur le développement en série de Taylor, autour d'un estimé $x^{(n)}$, proche de la solution de $\ll f(x) = 0 \gg$, la forme finale de la solution de cette dernière, est donnée par la formule :

$$x^{(n+1)} = x^{(n)} - \frac{f(x^{(n)})}{f'(x^{(n)})}$$

Où :

f' : La dérivée de f par rapport à x (f doit être continue et continûment dérivable)

Comme la méthode est itérative , on doit répéter , le procède jusqu'à la convergence .

Pour la résolution d'un système d'équations, sous la forme suivante :

$$f_1(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0$$

$$f_2(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0$$

.....

$$f_n(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0$$

Où f_i sont les fonctions non linéaires des variables $x_1, x_2, \dots, x_n$.

Sous la forme multidimensionnelle de la méthode, le système s'écrit sous la forme suivante :

$$F(X) = 0$$

Où :

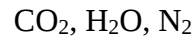
$$X = [x_1, x_2, \dots, x_n]^t$$

0 : le vecteur nul

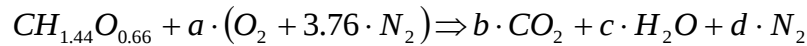
F : l'opérateur non linéaire, défini par l'ensemble $(f_1, f_2, \dots, f_n)$.

4.1. Calcul du cas stoechiométrique :

Dans ce cas, seulement il y a trois produits de combustion:



La forme de la réaction stœchiométrique de la combustion d'un kg du bois est:



Pour calculer les inconnues a, b, c, d, il est nécessaire d'utiliser un système d'équations avec les bilans molaires.

1.- Bilan molaire du carbone:

$$b = 1$$

2.- Bilan molaire de l'hydrogène:

$$2 \cdot c = 1.44$$

3.- Bilan molaire de l'oxygéné:

$$0.66 + 2 \cdot a = 2 \cdot b + c$$

4.- Bilan molaire de l'azote:

Les solutions sont:

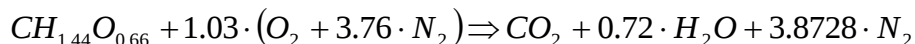
$$a = 1.03$$

$$b = 1$$

$$c = 0.72$$

$$d = 3.8728$$

La réaction s'écrit:



Pour calculer la température:

$$PCR \cdot m_{\text{bois}} = \int_{T_0}^T R \cdot [n_{\text{CO}_2} \cdot c_{P_{\text{CO}_2}} + n_{\text{H}_2\text{O}} \cdot c_{P_{\text{H}_2\text{O}}} + n_{\text{N}_2} \cdot c_{P_{\text{N}_2}}] \cdot dT$$

Cette équation est un polynôme de cinquième ordre, l'unique solution possible est 2124.8°K.

4.2. Calcul des autres cas avec ou sans excès d'air :

Un programme sous MATLAB est utilisé pour simuler le calcul du nombre de moles et calculer la température finale du mélange.

Les résultats trouvés pour les différents cas (plus ou moins % d'excès d'air) sont présentés dans le tableau ci-dessous :

Tableau 4.1: Nombres de mole des différents espèces formant les produits de combustion pour de différentes valeurs de coefficient d'excès d'air, avec la température de combustion

	-30%	-10%	STOECH.	+10%	+30%	+50%
T_F	2620.17	2264.66	2124.8	2009.4	1813.98	1660.27
n_{CO2}	0.4410	0.7975	1	0.9883	0.9986	0.9998
n_{CO}	0.5589	0.2025	0	1.1701e-2	1.3740e-3	2.1752e-4
n_{H2O}	0.5737	0.6810	0.72	0.7135	0.7103	0.7131
n_{OH}	3.8535e-2	1.2041e-2	0	9.2360e-3	0.0184	1.3782e-2
n_H	3.053e-2	3.4387e-3	0	1.9105e-4	2.4990e-5	2.5543e-6
n_O	6.6514e-3	8.8579e-4	0	6.0386e-4	2.3006e-4	7.2625e-5
n_{H2}	0.1117	3.1277e-2	0	1.8096e-3	4.1452e-4	5.1670e-5
n_{O2}	1.3941e-2	8.0872e-3	0	0.1024	0.2981	0.5098
n_{N2}	2.7039	3.4823	3.8728	4.2430	5.0267	5.8031
n_N	5.6612e-6	3.0019e-6	0	3.9430e-4	1.4033e-3	6.0074e-4
n_{NO}	1.4138e-2	6.3898e-3	0	0.0136	1.4160e-2	1.1612e-2
n_t	4.4931	5.2254	5.5928	6.0847	7.0698	8.0481

Lorsque l'oxygène est en déficit, il y a peu d'oxygène excédentaire dans les produits de combustion. Par contre, à mesure qu'il y a excès d'air, il y a aussi excès d'oxygène dans les produits de la combustion.

L'air est formé pour 79% de N₂ et 21% d' O₂, logiquement s'il y a plus excès d'air, il y a plus de N₂.

Dans les cas où il y a moins d'air comme réactif, alors il y a peu d'Oxygène pour réagir et former du CO₂, alors l'Oxygène réagit pour former du CO.

Conclusion

Le travail courant, présente une simulation numérique basée sur l'étude de la combustion du bois dans le cas stoechiométrique et non stoechiométrique.

Cette étude a permis le calcul des nombres de moles des différents espèces constituant les produits de combustion, ainsi que la température finale de ces produits.

Pour réaliser ces calculs, un programme sous MATLAB a été élaboré, et des méthodes numériques ont été utilisés pour résoudre les différents problèmes.

En perspective, l'étude de la cinétique chimique des principaux espèce polluante tel que le CO_2 , CO , NO, ainsi que le phénomène de réinflammation sera bénéfique.

Bibliographie

- [1]: Frédéric Buda, Mécanismes Cinétiques pour l'Amélioration de la Sécurité des Procédés d'Oxydation des Hydrocarbures, Doctorat en Génie des Procédés, Institut national polytechnique de lorraine, 29 mars 2006.
- [2]: Christian Guilié, Cours de combustion, Novembre 2006.
- [3]: www.ensa-agadir.ac.ma/.../Combustion.htm.
- [4]: www.cusstr.ch/repository.
- [5]: www.dictionnaire.sensagent.com/comburant.
- [6]: www.ensa-agadir.ac.ma./Combustion.
- [7]: www.gas-naturelle.ch/fileadmin/authors.
- [8]: P. Arquès, Inflammation combustion- pollution, Ed. Masson, Paris, 1992, pp.109- 123.
- [9]: chimie.scola.ac-paris.fr/stoech_gene .
- [10]: P. Arquès, La combustion, Inflammation-combustion-Pollution. Application, Ed. Ellipses, Paris, 2004, pp. 67-128, 143-173.
- [11]: J.A.Caton, Illustration of the use of an instructional version of thermodynamic cycle simulation for a commercial automotive spark-ignition engine, Internal Journal of Mechanical Engineering Education, vol.30 No.4, January 2001,pp.284-297.
- [12]: M.Boumahahrat, A.Gaurdin, Méthodes Numériques appliquées , Avec nombreux problèmes résolus en fortran 77,Ed.OPU Alger,1993,pp.368-417,489-563.
- [13]: Chase et Al , JANAF Thermochemical Table, J. Phis. chem, Ref. Data, Vol.14, No.1, 1987.
- [14]: C. Guilpin, Manuel de calcul numérique appliqué, Ed. EDP Sciences, 1999, pp. 51-59,195-199.

[15]: Mostapha LAKRIB, Cour d'analyse numérique, Office de Publications Universitaire, 2005, pp. 23, 240.

Remerciement

ON REMERCIE TOUT D'ABORD NOTRE ENSEIGNANTE
M^M. MAHDOUDI DE NOUS AVOIR ENCADRÉ ET GUIDÉ
PENDANT LA RÉALISATION DE CE TRAVAIL.

ON TIENT À REMERCIER LES MEMBRES DE JURY D'AVOIR
ACCEPTÉ DE JUGER CE TRAVAIL.

NOUS ADRESSONS TOUTE NOTRE GRATITUDE ENVERS
TOUT CEUX QUI NOUS ONT AIDÉS À RÉALISER CETTE
RECHERCHE DE PRÈS OU DE LOIN.

باسم الله الرحمن الرحيم

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET
POPULAIRE

Ministère de l'Enseignement Supérieur
Et de la Recherche Scientifique

CENTRE UNIVERSITAIRE d' EL-OUED
INSTITUT DES SCIENCES ET TECHNOLOGIE

Mémoire de fin d'étude
Pour l'obtention du diplôme de

LICENCE ACADEMIQUE

Domaine: sciences et techniques

Filière : Génie mécanique

Spécialité : mécanique énergétique

Thème

Étude de la combustion dans une chambre
fermée: Calcul des concentrations des
produits de combustion à l'équilibre

Présenté par :

♦ *CHERIEF BELGACEM*

♦ *HENKA LAZOUZI*

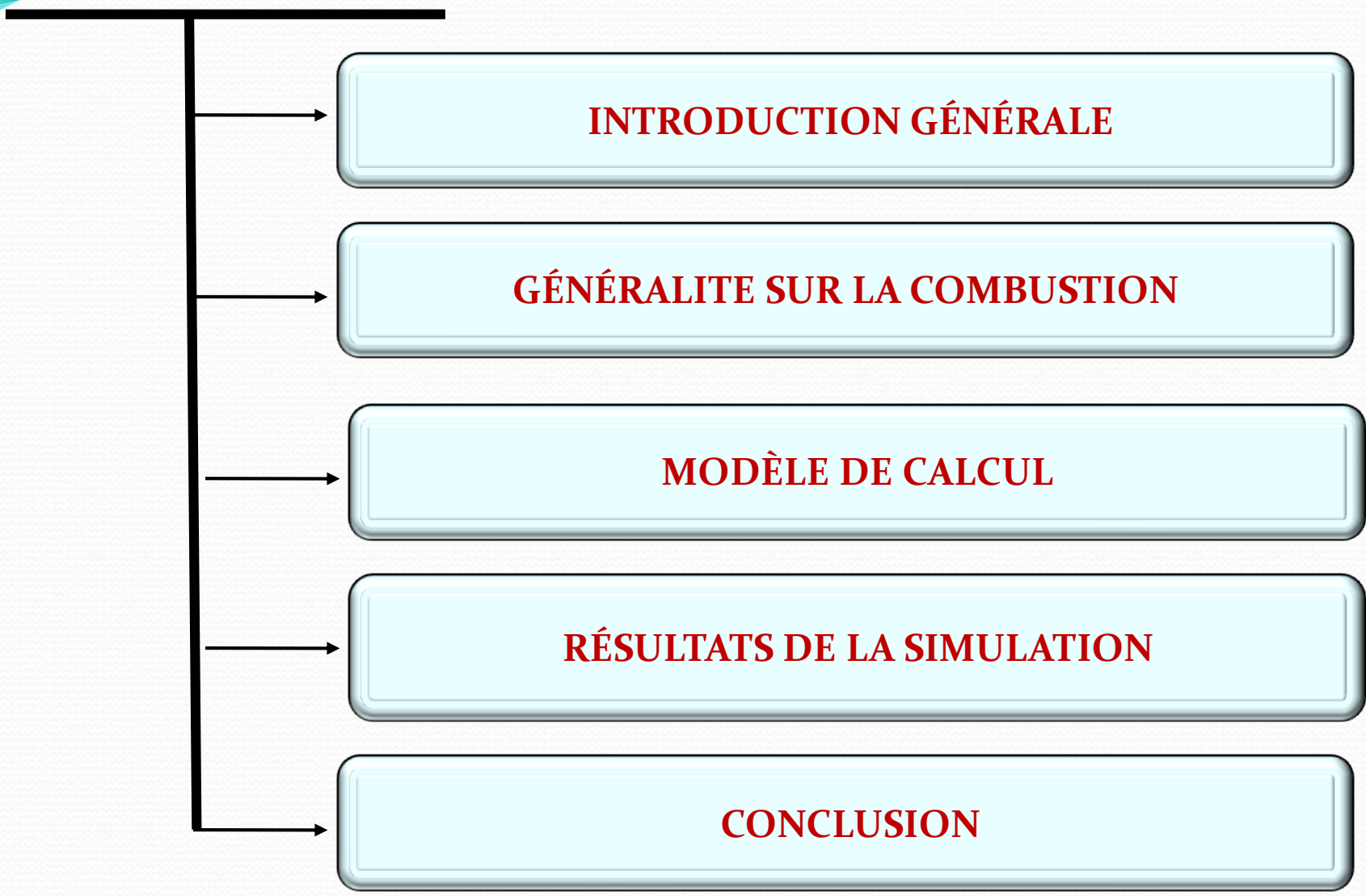
Soutenue le 30/06/ 2010

Encadré par :

M^m. MAHFOUDHI NADJIBA

Session: 2009/2010

Plan de travail



```
graph LR; A[Plan de travail] --> B[INTRODUCTION GÉNÉRALE]; A --> C[GÉNÉRALITE SUR LA COMBUSTION]; A --> D[MODÈLE DE CALCUL]; A --> E[RÉSULTATS DE LA SIMULATION]; A --> F[CONCLUSION];
```

INTRODUCTION GÉNÉRALE

GÉNÉRALITE SUR LA COMBUSTION

MODÈLE DE CALCUL

RÉSULTATS DE LA SIMULATION

CONCLUSION

INTRODUCTION

La combustion appartient à un groupe des processus d'oxydation constitués par les réactions chimiques naturelles lorsque le processus d'oxydation est suffisamment rapide pour que le dégagement de la chaleur ne puisse être évacué vers l'extérieur des parois du système.

Lors d'une combustion confinée avec défaut d'oxygène, les produits de combustion sont composés essentiellement d'oxyde de carbone. Les caractéristiques de l'oxyde de carbone sont une grande toxicité et un pouvoir calorifique qui n'est pas négligeable.

L'existence d'oxyde de carbone dans les produits de combustion dans ces conditions, peut mener à l'apparition d'un phénomène appelé « retour de flamme », qui se produit parfois pour un incendie confiné à l'intérieur d'une chambre fermée.

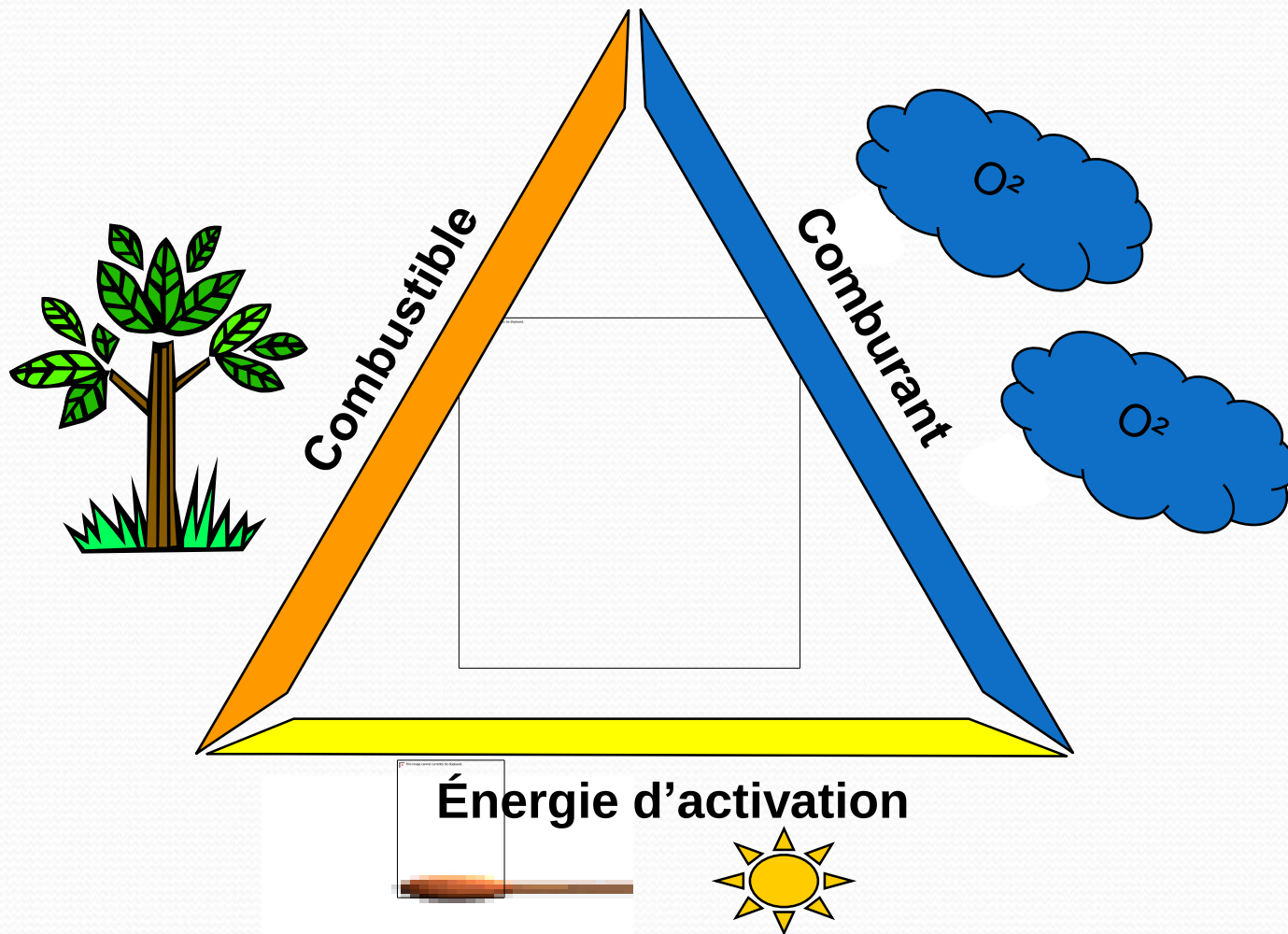
GENERALITE SUR LA COMBUSTION

La combustion est une réaction exothermique complexe entre un combustible et un comburant (air, oxygène pur...). Le combustible est oxydé avec en général un dégagement de chaleur et de lumière.

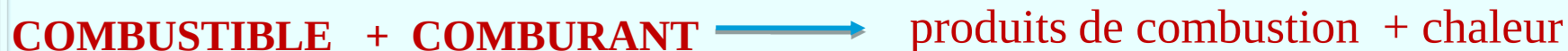
Trois facteurs doivent être réunis pour que la combustion puisse avoir lieu : un combustible, un comburant et de l'énergie.

On définit ainsi classiquement le triangle du feu :

Le triangle du feu



L'équation générale présentée ci-dessous montre uniquement la réaction globale mais ne contient aucune information sur les différentes étapes guidant réellement la transformation des réactifs en produits :



TYPE DE COMBUSTIBLE

CLASSES

EXEMPLE

A

Solides formant des braises

Bois

Papier

Certains plastiques

B

Liquides et solides liquéfiables

Hydrocarbures

Acétone

Alcools

Solvants

Graisses, huiles, peintures ...

C

Gaz

Propane

Butane

Gaz naturel

D

Métal

Fer

Aluminium, de magnésium

Sodium

Les produits de combustion (fumées) sont constitués de :

Principalement :

Dioxyde de carbone : CO_2

Anhydride sulfureux : SO_2

Vapeur d'eau : H_2O

Azote : N_2

Eventuellement :

dioxygène : O_2

Monoxyde de carbone: CO

NO_x : NO , NO_2

Hydrogène libre: H_2

MODEL DE CALCUL

Le combustible choisi pour notre étude est le bois. Le tableau 1 représente l'analyse élémentaire du bois.

Tableau 1: La Composition en% de masse du bios.

Espèces	Composition en% de masse
C	51.01
H	6.06
Soufre combustible	/
N	42.26
O	0.67

Pour calculer la formule chimique de bois on procède
comme suit :

C:
$$n_C = \frac{m_C}{PM_C} = \frac{0.5101g}{12 \frac{g}{mole}} = 0.0425 moles$$

H:
$$n_H = \frac{m_H}{PM_H} = \frac{0.0606g}{1 \frac{g}{mole}} = 0.0606 moles$$

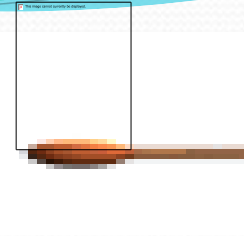
O:
$$n_O = \frac{m_O}{PM_O} = \frac{0.4226g}{16 \frac{g}{mole}} = 0.0264 moles$$

N
$$n_N = \frac{m_N}{PM_N} = \frac{0.0067g}{14 \frac{g}{mole}} = 0.0004 \text{ moles}$$

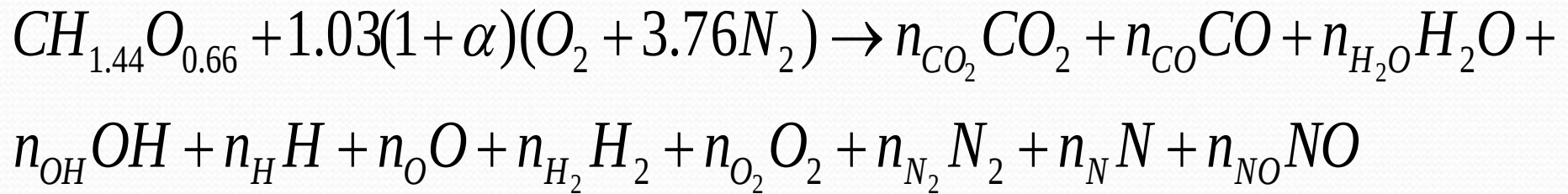
La formule chimique finale :



Combustion du bois



La réaction globale de la combustion du bois :



Les principaux produits de les réactions de combustion sont : CO_2 , H_2O , O_2 , N_2 , CO , H_2 , H , N , O , OH , NO

Pour établir la condition d'équilibre à une température T et une pression p de combustion concrète, il est nécessaire d'avoir le même nombre d'équations que le nombre des produits finaux.

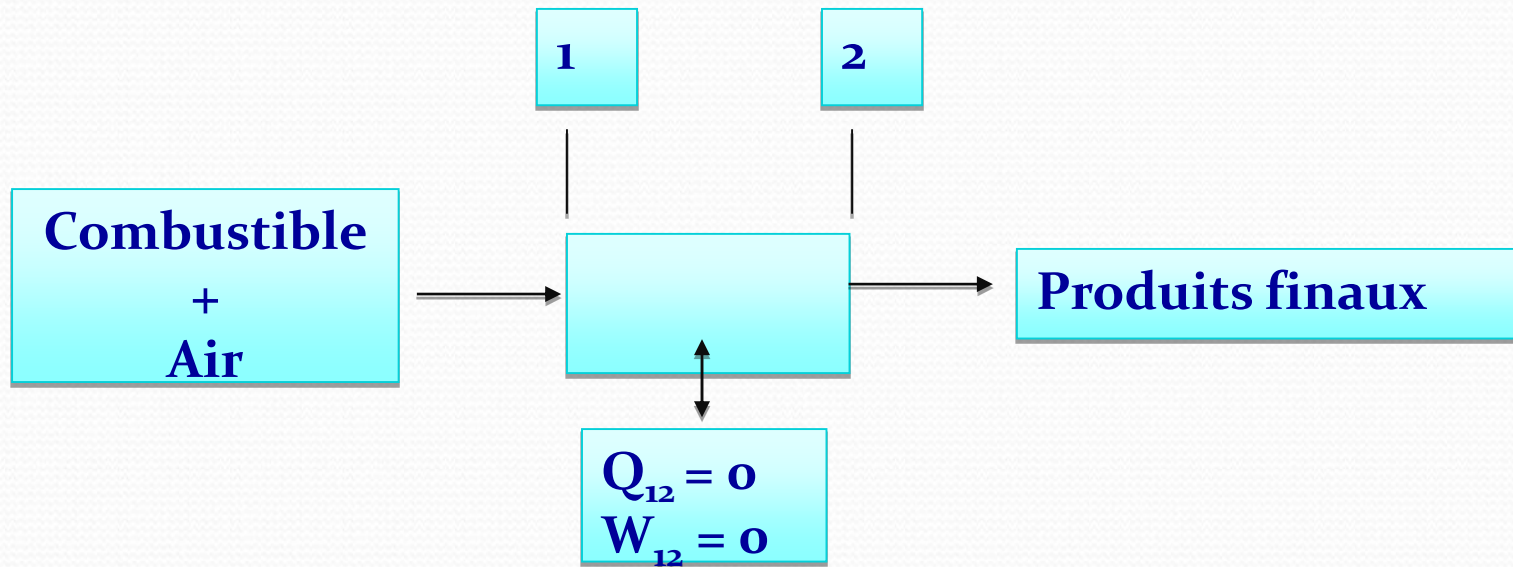
Le système d'équations est formé par quatre bilans de moles pour une mole de bois et par sept équations d'équilibre.

Température des produits finaux de la combustion :

Si en pratique, dans la combustion, il y a transfert d'énergie vers le milieu.

La combustion adiabatique, sans transfert de chaleur, s'utilise comme processus idéal de référence.

Dessin d'une combustion adiabatique:



l'application du premier principe de la thermodynamique indique que ce processus sera isoenthalpique, l'énergie dégagée sert à augmenter l'enthalpie des produits

$$H_{\text{réactif}} = H_{\text{produit}}$$

(combustible)

$$\Delta H_R = H_{\text{produit}} - H_{\text{réactif}} = 0$$

ΔH_R : variation de l'enthalpie de réaction.

$$\Delta H_{\text{Produit}} = \sum_{\text{produit}} n_i [h(T_{ad}) - h_0] = \sum_{\text{produit}} n_i \int_{T_0}^T C_p(T) dT$$

$$\Delta H_R = -PCI_{\text{bois}} + \sum_{i=11} n_i \int_{T_0}^T C_{p_i}(T) dT = 0$$

La température du mélange de gaz nécessite de calculer l'intégrale suivante :

$$\sum_{\text{produit}} n_i \int_{T_0}^T C_p(T) dT - PCI_{\text{bois}} = 0$$

Qui se met sous la forme:

$$AT^5 + B.T^4 + C.T^3 + D.T^2 + E.T + F = 0$$

C'est un polynôme du cinquième ordre en T avec 5 solutions dont une seule est cohérente. Le calcul est effectué sur ordinateur en recherchant quelle est la valeur de la température qui résout l'équation avec une précision suffisante.

RESULTATS DE LA SIMULATION

Les résultats trouvés pour les différents cas (plus ou moins % d'excès d'air) sont présentés dans le tableau ci-dessous :



Tableau 2: Nombres de mole des différents espèces formant les produits de combustion pour de différentes valeurs de coefficient d'excès d'air, avec la température de combustion

	-30%	-10%	STOECH.	+10%	+30%	+50%
T_F	2620.17	2264.66	2124.8	2009.4	1813.98	1660.27
n_{CO_2}	0.4410	0.7975	1	0.9883	0.9986	0.9998
n_{CO}	0.5589	0.2025	0	1.1701e-2	1.3740e-3	2.1752e-4
n_{H_2O}	0.5737	0.6810	0.72	0.7135	0.7103	0.7131
n_{OH}	3.8535e-2	1.2041e-2	0	9.2360e-3	0.0184	1.3782e-2
n_H	3.053e-2	3.4387e-3	0	1.9105e-4	2.4990e-5	2.5543e-6
n_O	6.6514e-3	8.8579e-4	0	6.0386e-4	2.3006e-4	7.2625e-5
n_{H_2}	0.1117	3.1277e-2	0	1.8096e-3	4.1452e-4	5.1670e-5
n_{O_2}	1.3941e-2	8.0872e-3	0	0.1024	0.2981	0.5098
n_{N_2}	2.7039	3.4823	3.8728	4.2430	5.0267	5.8031
n_N	5.6612e-6	3.0019e-6	0	3.9430e-4	1.4033e-3	6.0074e-4
n_{NO}	1.4138e-2	6.3898e-3	0	0.0136	1.4160e-2	1.1612e-2
n_t	4.4931	5.2254	5.5928	6.0847	7.0698	8.0481

lorsque l'oxygène est en déficit, il y a peu d'oxygène excédentaire dans les produits de combustion. Par contre, à mesure qu'il y a excès d'air, il y a aussi excès d'oxygène dans les produits de la combustion.

L'air est formé pour 79% de N_2 et 21% d' O_2 , logiquement s'il y a plus d'excès d'air, il y a plus de N_2 .

Dans les cas où il y a moins d'air comme réactif, alors il y a peu d'Oxygène pour réagir et former du CO_2 , alors l'Oxygène réagit pour former du CO.

CONCLUSION

Le travail courant, présente une simulation numérique basée sur l'étude de la combustion du bois dans le cas stoechiométrique et non stoechiométrique.

Cette étude a permis le calcul des nombres de moles des différents espèces constituant les produits de combustion, ainsi que la température finale de ces produits.

Pour réaliser ces calculs, un programme sous MATLAB a été élaboré, et des méthodes numériques ont été utilisés pour résoudre les différents problèmes.

En perspective, l'étude de la cinétique chimique des principaux espèce polluante tel que le CO_2 , CO , NO, ainsi que le phénomène de réinflammation sera bénéfique.

remerciement



MERCI POUR VOTRE ATTENTION