

# Simulation et optimisation énergétique de la combustion isobare des hydrocarbures saturés $C_nH_{2n+2}$ , par deux approches de résolution

S. Kherris<sup>1\*</sup>, M. Makhoulf, O. Sebbane<sup>2</sup> et R. Chadouli

<sup>1</sup> Laboratoire des Matériaux et des Systèmes Réactifs,  
Université Djilali Liabès, B.P. 89, Sidi Bel Abbès, Algérie

<sup>2</sup> Laboratoire des Matériaux et Energies Renouvelables,  
Université Abou Bakr Belkaïd, B.P. 230, Tlemcen, Algérie

(reçu le 10 Février 2010 – accepté le 25 Mars 2010)

**Résumé** – L'importance de ce travail portera sur l'élaboration d'un programme pour la simulation de la combustion isobare et adiabatique des hydrocarbures saturés  $C_nH_{2n+2}$ . Deux méthodes illustrent le calcul de la combustion, la première est fondée sur l'annulation des affinités des réactions chimiques considérées au sein des produits de combustion, quant à la deuxième, elle est basée sur le calcul des constantes d'équilibre. Dans cette étude, les produits de la combustion comprennent essentiellement 12 éléments:  $CO_2$ ,  $H_2O$ ,  $O_2$ ,  $N_2$ ,  $CO$ ,  $H_2$ ,  $OH$ ,  $NO$ ,  $H$ ,  $O$ ,  $NO_2$  et  $N$ . Les résultats obtenus restent des valeurs approchées. La première méthode et la deuxième donnent des résultats quantitatifs conformes à la réalité quel que soit la richesse du mélange.

**Abstract** - The importance of this work will relate to developing a program for simulation of adiabatic and isobar combustion of the saturated hydrocarbons  $C_nH_{2n+2}$ . Two methods illustrate the combustion calculation, the first is based on the cancellation of the chemical affinity reactions considered in combustion products, the second, it is based on the calculation of constants equilibrium. In this study, combustion products include/understand primarily 12 elements:  $CO_2$ ,  $H_2O$ ,  $O_2$ ,  $N_2$ ,  $CO$ ,  $H_2$ ,  $OH$ ,  $NO$ ,  $H$ ,  $O$ ,  $NO_2$  and  $N$ . The results obtained are approximate values. The first and the second method give quantitative results in conformity with reality some is the richness of the mixture.

**Mots clés:** Combustion - Affinité chimique – Hydrocarbures - Constante d'équilibre.

## 1. INTRODUCTION

Il y a des millénaires, l'homme acquérait 'l'art du feu'. Ce n'est qu'au cours de l'essor industriel du 19<sup>ème</sup> siècle que la combustion vive commençait à être valablement utilisée dans des machines pour répondre aux besoins énergétiques.

De notre jour, la combustion occupe une place prépondérante pour satisfaire aux besoins énormes de notre monde économique, dans des domaines aussi divers que:

- La production d'énergie électrique;
- Le chauffage des locaux;
- L'élaboration des matériaux de combustion;
- La sidérurgie;
- Les transports terrestres, aériens, cosmiques;
- La production des hydrocarbures à partir du pétrole brut dans les raffineries.

La problématique de ce travail se compose de trois parties:

---

\* kherris\_sahraoui@yahoo.fr

- Le choix des produits, vue l'influence relative de chaque réaction d'équilibre, c'est une difficulté de chimie;
- Les pertes de charges et de chaleur, ainsi que la nature des substances entre en jeu, mais ils seront négligés, vue la complexité du calcul.
- La troisième difficulté est mathématique, la non linéarité des équations et la dépendance des variables entre-elles, pose aussi un problème.

## 2. POTENTIEL CHIMIQUE

Le potentiel chimique est la variation des fonctions thermodynamiques par rapport à la variation de la masse des constituants.

$$\mu_i = \left( \frac{\partial U}{\partial m_i} \right)_{s,v,m_j} = \left( \frac{\partial H}{\partial m_i} \right)_{s,p,m_j} = \left( \frac{\partial F}{\partial m_i} \right)_{t,v,m_j} = \left( \frac{\partial G}{\partial m_i} \right)_{t,p,m_j} \quad (1)$$

Il est souvent commode de définir la composition d'un mélange par le nombre de moles  $n_i$  des composants. Les dérivées partielles à introduire sont alors:

$$\left( \frac{\partial U}{\partial n_i} \right)_{s,v,n_j} = \left( \frac{\partial H}{\partial n_i} \right)_{s,p,n_j} = \left( \frac{\partial F}{\partial n_i} \right)_{t,v,n_j} = \left( \frac{\partial G}{\partial n_i} \right)_{t,p,n_j} \quad (2)$$

### 2.1 Degré d'avancement d'une réaction

Considérons une phase déterminée d'un système homogène et supposons qu'une réaction chimique soit susceptible de s'y produire.

Au cours d'une telle réaction, certains corps disparaissent, d'autres apparaissent et les variations des nombres de moles des corps sont liées par l'équation stœchiométrique de la réaction.

Par exemple pour la réaction d'équation



Le degré d'avancement élémentaire de la réaction est:

$$d\lambda_r = \frac{dn_A}{\nu_A} = \frac{dn_B}{\nu_B} = \frac{dn_C}{\nu_C} = \frac{dn_D}{\nu_D} = \frac{dn_i}{\nu_i} \quad (4)$$

Où les  $\nu_i$  sont les coefficients stœchiométriques négatifs pour les corps réagissant, positifs pour les produits de la réaction.

### 2.2 Affinité des réactions chimiques

Par définition, la quantité  $[-\sum_i \tilde{\mu}_i \nu_i^r]$  est appelée affinité chimique (introduite en 1922 de Donder) de la réaction chimique  $r$ .

$$A_{ff} = -\sum_i \tilde{\mu}_i \nu_i^r \quad (5)$$

### 2.3 Constante d'équilibre

Soit la réaction d'équilibre R sous la forme générale suivante:



avec:  $(v_i, i=1 \dots n, \quad w_i, i=1 \dots m)$  sont les coefficients stœchiométriques;  
 $(A_i, i=1 \dots n; \quad B_i, i=1 \dots m)$  constituants chimiques.

On définit la constante d'équilibre K :

$$K = \frac{\prod_1^m P_{B_i}^{w_i}}{\prod_1^n P_{A_i}^{v_i}} \quad (7)$$

Avec:  $(P_{B_i}, P_{A_i})$  les pressions partielles des constituants  $B_i$  et  $A_i$  respectivement.  
 L'équation (7) devient:

$$K = \frac{\prod_1^m \left( \frac{n_{B_i} R T}{V} \right)^{w_i}}{\prod_1^n \left( \frac{n_{A_i} R T}{V} \right)^{v_i}} = \frac{\left( \frac{R T}{V} \right)^{\sum_1^m w_i} \prod_1^m n_{B_i}^{w_i}}{\left( \frac{R T}{V} \right)^{\sum_1^n v_i} \prod_1^n n_{A_i}^{v_i}} \quad (8)$$

$$\text{On a: } P_T V = n_T R \cdot T \quad (9)$$

$$\text{Avec: } P_T = \sum_1^m P_{B_i} + \sum_1^n P_{A_i} \quad (10)$$

$$n_T = \sum_1^m n_{B_i} + \sum_1^n n_{A_i} \quad (11)$$

Et donc:

$$\left( \frac{R T}{V} \right) = \left( \frac{P}{n_T} \right) \quad (12)$$

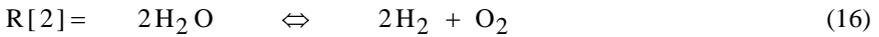
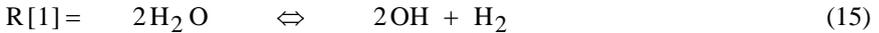
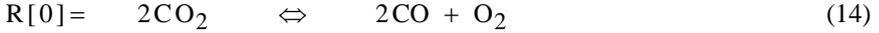
$$K = \left( \frac{P}{n_T} \right)^{\sum_1^m w_i - \sum_1^n v_i} \cdot \left( \frac{\prod_1^m n_{B_i}^{w_i}}{\prod_1^n n_{A_i}^{v_i}} \right) \quad (13)$$

### 3. CALCUL DE LA COMPOSITION CHIMIQUE D'UN MELANGE GAZEUX

Deux méthodes illustrent le calcul de la composition. La première est fondée sur l'annulation des affinités des réactions chimiques considérées au sein des produits de combustion, quant à la deuxième, elle est basée sur le calcul des constantes d'équilibre.

Considérons le cas d'un hydrocarbure de formule  $C_nH_m$  dont la combustion est effectuée dans l'air sous pression constante ; les produits de la combustion comprennent essentiellement du :  $CO_2$ ,  $H_2O$ ,  $O_2$ ,  $N_2$ ,  $CO$ ,  $H_2$ ,  $OH$ ,  $NO$ ,  $H$ ,  $O$ ,  $NO_2$ ,  $N$ .

A haute température, le mélange sera le siège des réactions d'équilibre:



### 4. RESULTATS DE SIMULATION

#### 4.1 Variation de la composition des produits de combustion en fonction de la richesse

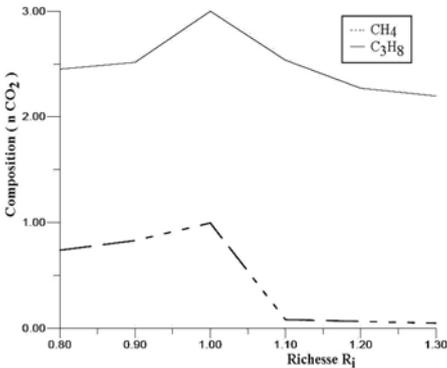


Fig. 1: Variation de la composition de  $CO_2$  en fonction de la richesse

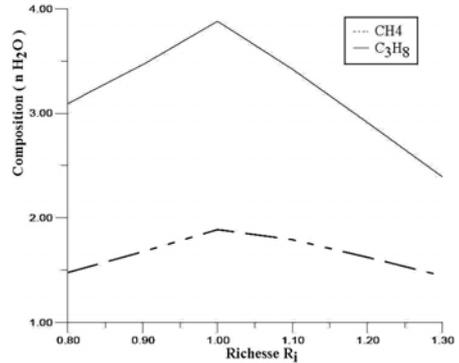


Fig. 2: Variation de la composition de  $H_2O$  en fonction de la richesse

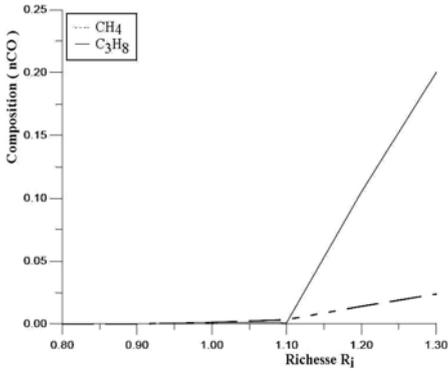


Fig. 3: Variation de la composition de CO en fonction de la richesse

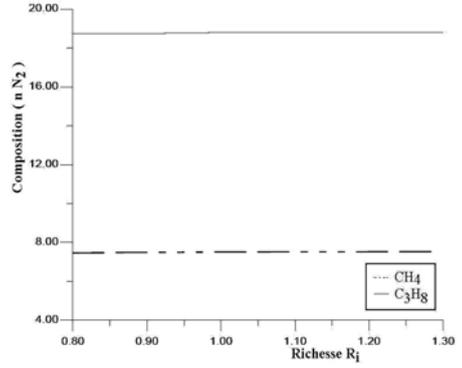


Fig. 4: Variation de la composition de N<sub>2</sub> en fonction de la richesse

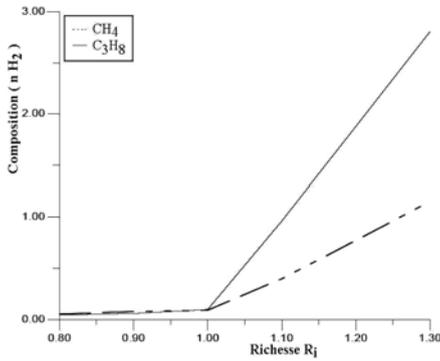


Fig. 5: Variation de la composition de H<sub>2</sub> en fonction de la richesse

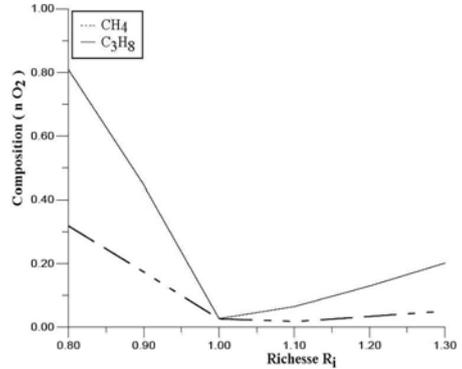


Fig. 6: Variation de la composition de O<sub>2</sub> en fonction de la richesse

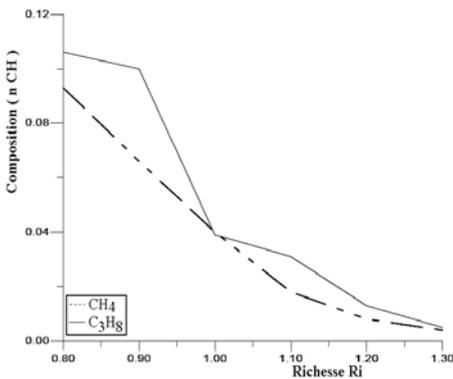


Fig. 7: Variation de la composition de CH en fonction de la richesse

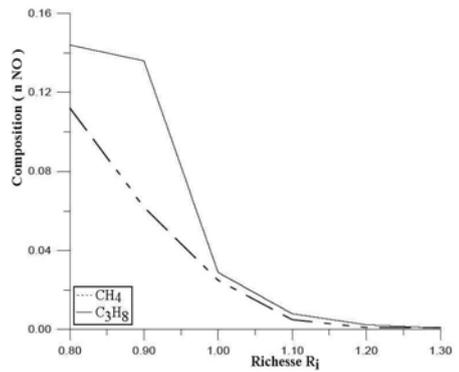


Fig. 8: Variation de la composition de NO en fonction de la richesse

Les figures 1-8 représentent la variation de la composition des produits de combustion isobare du méthane et du propane, à savoir:  $\text{CO}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{CO}$ ,  $\text{N}_2$ ,  $\text{O}_2$ ,  $\text{H}_2$ ,  $\text{OH}$  et  $\text{NO}$ .

Deux cas sont à distinguer:

### 1<sup>er</sup> Cas: $R_i < 1$

On constate, qu'en milieu pauvre, la quantité de  $\text{O}_2$  produit est inversement proportionnelle à la richesse ceci est dû à la quantité d'air excédante.

L'excès de comburant diminue nettement l'intensité des réactions d'équilibres (dissociation).

D'autre part, il implique la décroissance du nombre de moles des gaz  $\text{CO}_2$  et  $\text{H}_2\text{O}$ .

Aussi, on note que la proportion négligeable du  $\text{CO}$ ,  $\text{OH}$ ,  $\text{NO}$  et  $\text{H}_2$ , est le résultat de l'activité trop faible des réactions d'équilibres.

### 2<sup>ème</sup> Cas: $R_i > 1$

Dans ce cas, on a un défaut d'air, l'oxygène disponible étant insuffisant, ce qui explique sa quantité négligeable. Cette dernière est produite par les réactions d'équilibres (dissociation), devenues très vives à cause du manque de comburant.

Cette vivacité des réactions d'équilibres dissocie un nombre important des molécules du  $\text{CO}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ , en  $\text{CO}$ , ce qui explique la décroissance des premières et l'augmentation des dernières.

## 4.2. Variation de la température de flamme adiabatique en fonction de la richesse

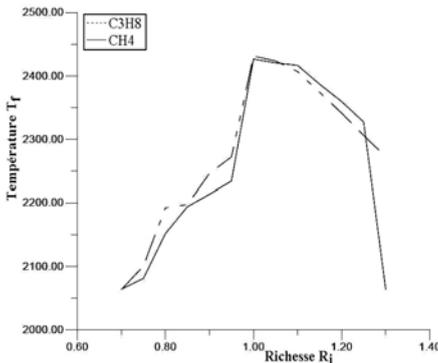


Fig. 9: Variation de la température de flamme adiabatique (1<sup>ère</sup> méthode)

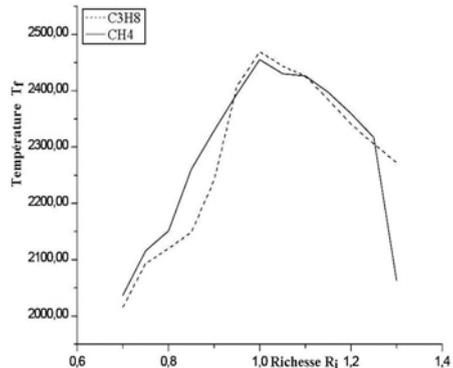


Fig. 10: Variation de la température de flamme adiabatique (2<sup>ème</sup> méthode)

Les figures 9 et 10 représentent la variation de la température de fin de combustion du méthane et du propane en fonction de la composition initiale des gaz frais.

- On remarque que pour les deux méthodes les courbes présentent un maximum au voisinage du mélange stœchiométrique, cette constatation se rencontre chez la plupart des hydrocarbures.

- En milieu pauvre ( $R_i < 1$ ), la décroissance de  $T_f$  s'explique comme nous l'avons vu précédemment, par l'augmentation de la quantité (nombre de moles) des produits gazeux au sein desquels va se dissiper l'enthalpie initiale.
- En milieu riche ( $R_i > 1$ ), la décroissance de  $T_f$ , quand la richesse augmente est due à l'activité importante et accrue des réactions d'équilibres, dont le caractère endothermique arrive à l'emporter sur l'échauffement des produits formés.

## 5. CONCLUSION

Notre étude est une initiation aux calculs par ordinateur des paramètres d'un phénomène physico-chimique très complexe qui est la combustion.

Dans le temps qui nous a été alloué, on n'a pas pu tenir compte de tous les phénomènes influents sur le déroulement de la combustion, d'où l'utilisation de certaines hypothèses simplificatrices pour nous faciliter la tâche.

Les résultats obtenus restent des valeurs approchées. Les deux méthodes donnent des résultats quantitatifs conformes à la réalité quelque soit la richesse du mélange.

La comparaison des deux figures 9 et 10 montre que les résultats obtenus par la méthode des constantes d'équilibres sont très proches de ceux calculés par la première méthode pour les mélanges pauvres et riches. L'écart relatif maximal de deux valeurs correspondantes ne dépasse pas les 6 % pour le méthane et reste inférieur à 4 % pour le propane.

Notre programme peut calculer à la demande en plus de la température de flamme et de la composition, d'autres paramètres tels que: les chaleurs spécifiques, l'enthalpie, l'entropie et l'enthalpie libre.

## NOMENCLATURE

U : Energie libre, J	$\mu$ : Potentiel chimique, J/mole
S : Entropie, J/K	$\nu$ : Coefficient stœchiométrique, mole
H : Enthalpie, J	$x_i$ : Fraction molaire
G : Enthalpie libre, J	$H_m$ : Enthalpie de mélange, J
F : Energie libre, J	$d\lambda_r$ : Degré d'avancement, mole
K : Constante thermodynamique d'équilibre	$C_{p_f}$ : Chaleur massique, à pression constante, des gaz frais, J/K.kg
$M_f$ : Masse molaire des gaz frais, kg/mole	$A_{ff}$ : Affinité des réactions chimiques, J/mole
$H_f$ : Enthalpie de formation, J/kg.mole	R : Constante des gaz parfaits, J/mole.K
P : Pression, atm	G : Grandeur molaire/mole, %

## REFERENCES

- [1] A. Carrere, '*Thermodynamique Générale et Applications*', Edition Ensae, 1994.
- [2] E. Perthuis, '*La Combustion Industrielle*', Edition Technip, 213 p. Publications de l'Institut Français du Pétrole, 1983.

- [3] R. Borghi et M. Champion, '*Modélisation et Théorie des Flammes*', Edition Technip, 402 p., Publications de l'Institut Français du Pétrole, 2000.
- [4] C.D. Rakoupoulos, D.T. Hountatlas et G.N. Taklis, '*Etude de Combustion et de Formation de Polluants par un Modèle Multizones dans un Moteur Diesel Rapide Thermiquement Isolé*', Entropie, N°190, (1995).
- [5] G. Bruhat et A. Kastler, '*Thermodynamique*', 6<sup>ème</sup> Edition, Masson.
- [6] R. Borghi et M. Champion, '*Modélisation et Théorie des Flammes*', Edition Masson, 2002.
- [7] J.M. Michael and N.S. Howard, '*Fundamentals of Engineering Thermodynamics*', 3<sup>th</sup> Edition, John Wiley & Sons, Inc.
- [8] R. Paul et S. Jean-Robert, '*Thermodynamique, Physique et Chimique*', Ellipses, Edition Marketing SA, 1998.
- [9] A. Asnoun, '*Simulation de la Combustion Interne: Modélisation et Expérimentation*', Thèse de Doctorat, Université de Paris, France, 1997.
- [10] G. Renaud, '*Diagrammes Thermodynamiques, Mélanges humides et Combustion*', Edition ENSMP, 2003.
- [11] A. Gourdin et M. Boumahrat, '*Méthodes Numériques Appliquées*', Technique et Documentation, Edition Lavoisier, 1988.