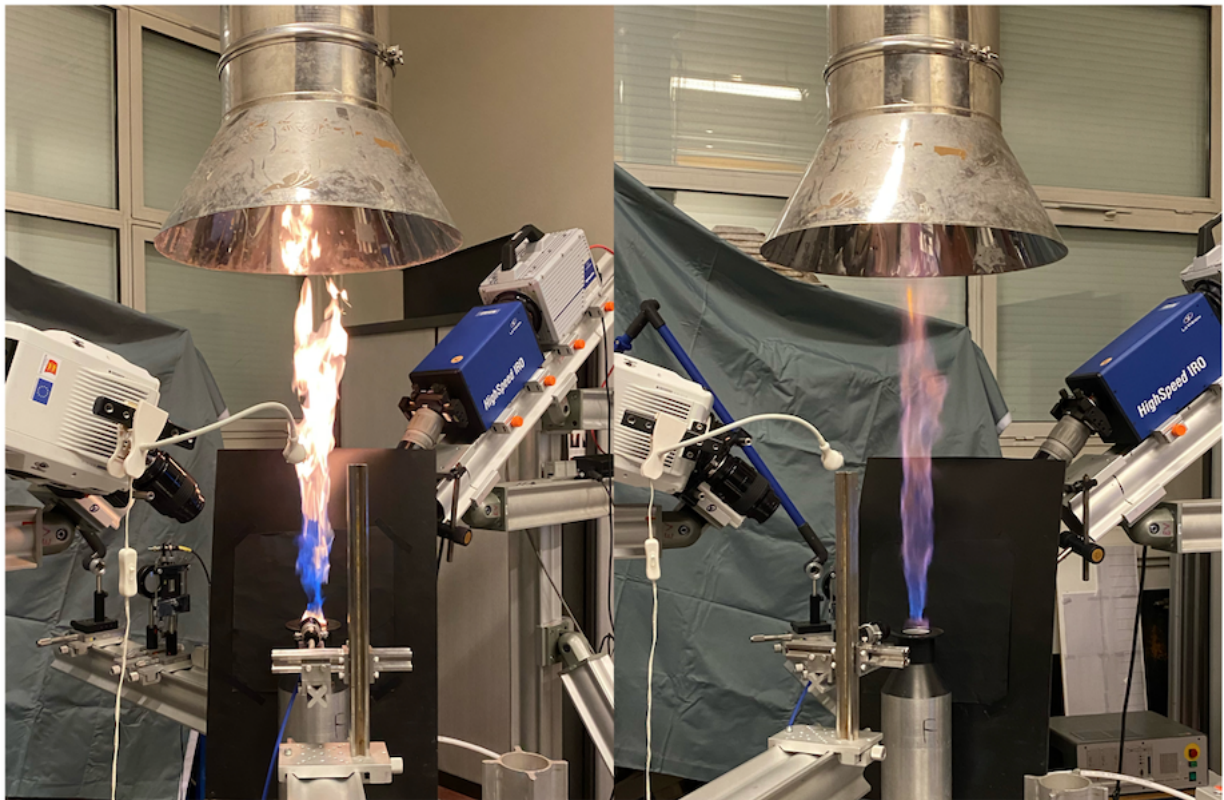


Spectroscopie d'émissions de flammes de méthane et hydrogène



Étudiants :

Laura DEPRE
Jérémy GUILLEMAUT
Yohan POUILLAIN

Marie-Charlotte GAGNARD
Lou PIEDIGROSSI
Marie-Amélie VASSEUR

Enseignant-responsable du projet :
David HONORE

Date de remise du rapport : 12/06/2021

Référence du projet : STPI/P6/2021 – 015

Intitulé du projet : Spectroscopie d'émission de flammes méthane et hydrogène

Type de projet : *bibliographie, expérimental*

Objectifs du projet : *Les principaux objectifs de ce projet sont l'étude et l'analyse du phénomène de combustion grâce à la spectroscopie, comparer les flammes de méthane et hydrogène afin de comprendre les enjeux énergétiques actuels et pourquoi aujourd'hui nous nous intéressons à l'utilisation de l'hydrogène plutôt qu'à celle du méthane.*

Mots-clefs du projet : *combustion, méthane, hydrogène, spectroscopie*

Table des matières

Introduction	4
1 Méthodologie, organisation du travail	5
2 Travail réalisé et résultats	6
2.1 Recherches bibliographiques	6
2.1.1 La combustion	6
2.1.2 Méthane et hydrogène	7
2.1.3 La méthode de la spectroscopie	9
2.2 Simulation numérique de flamme	10
2.2.1 Préambule	10
2.2.2 Calcul de concentration	10
2.2.3 Etude du front de flamme	11
2.2.4 Calcul de PCI (pouvoir calorifique inférieur)	12
2.3 Expériences	14
2.3.1 Protocoles expérimentaux	14
2.3.2 Traitement des données	15
2.3.3 Exploitation des résultats	17
Conclusion et perspectives	19
Bibliographie	20
A Organisation du travail	22
B Documentation technique	27
B.1 Le principe de Chimiluminescence	27
B.2 Stabilisation et limite de la flamme	29
B.2.1 Stabilisation de la flamme	29
B.2.2 Emission de suie	29
B.3 Quelques exemples d'application de la combustion	31
C Simulation numérique de flamme	32
D Précisions PCI et capacité thermique	54
E Résultats Expérimentaux	57

Introduction

Dans le cadre de notre projet de physique du quatrième semestre du cycle STPI, nous avons réalisé des recherches, expériences, analyses, calculs, comparaisons par rapport à un sujet précis : la spectroscopie d'émission de flammes méthane et hydrogène. Ce projet se déroule en trois parties distinctes : l'identification des principaux mots-clefs et leurs définitions, l'approche théorique du sujet et ses calculs et enfin la comparaison avec l'analyse expérimentale et ses résultats.

Pour réaliser ce projet, nous étions encadrés par M. Honoré, enseignant-chercheur et directeur du département STPI à l'INSA Rouen Normandie. Nous aimerions par ailleurs le remercier pour ses conseils, son soutien lors de la réalisation de nos expériences - en nous permettant notamment de les réaliser au CORIA - ainsi que pour nous avoir guidé tout au long de ce projet.

Les objectifs que nous cherchons à atteindre pour ce projet sont d'établir une vraie cohésion au sein d'un groupe ; apprendre à gérer un projet sur une durée de plusieurs mois en mettant en place un planning à respecter ; apprendre à synthétiser des données scientifique dans le but de les présenter lors d'une soutenance orale et sous la forme d'un rapport écrit. Nous cherchons également à comprendre le phénomène de combustion d'une flamme, comprendre la méthode de spectroscopie en la mettant en oeuvre lors d'expériences et comprendre pourquoi aujourd'hui on cherche à remplacer le méthane dans le domaine énergétique par l'hydrogène en cherchant leurs avantages et inconvénients respectifs.

Chapitre 1

Méthodologie, organisation du travail

Après notre première séance du projet de physique et en suivant les conseils de M. Honoré, nous nous sommes séparés en trois binômes à tâches différentes. Un binôme de recherche et rédaction; un pour la réalisation des expériences et ses analyses; et un dernier pour l'analyse de spectres déjà existants et le traçage de ses courbes. De même, nous avons créé un document accessible à tous (Google Docs) avec la liste des différentes tâches à réaliser et les associer aux binômes responsables.

Au cours de notre projet, nous avons réalisé 2 diagrammes de GANTT : un lors de la toute première séance pour organiser et prévoir les différentes tâches à réaliser. Le second fut créé en milieu de projet (juste avant les IS) afin de voir notre avancée dans le projet, de modifier certaines tâches qui auraient pris plus ou moins de temps que prévu et de bien prévoir ce qu'il nous restait à faire. Ces deux diagrammes de GANTT ont été partagés avec M. Honoré avec les explications des changements nécessaires dans le deuxième afin de mieux comprendre notre organisation. (Voir annexe A)

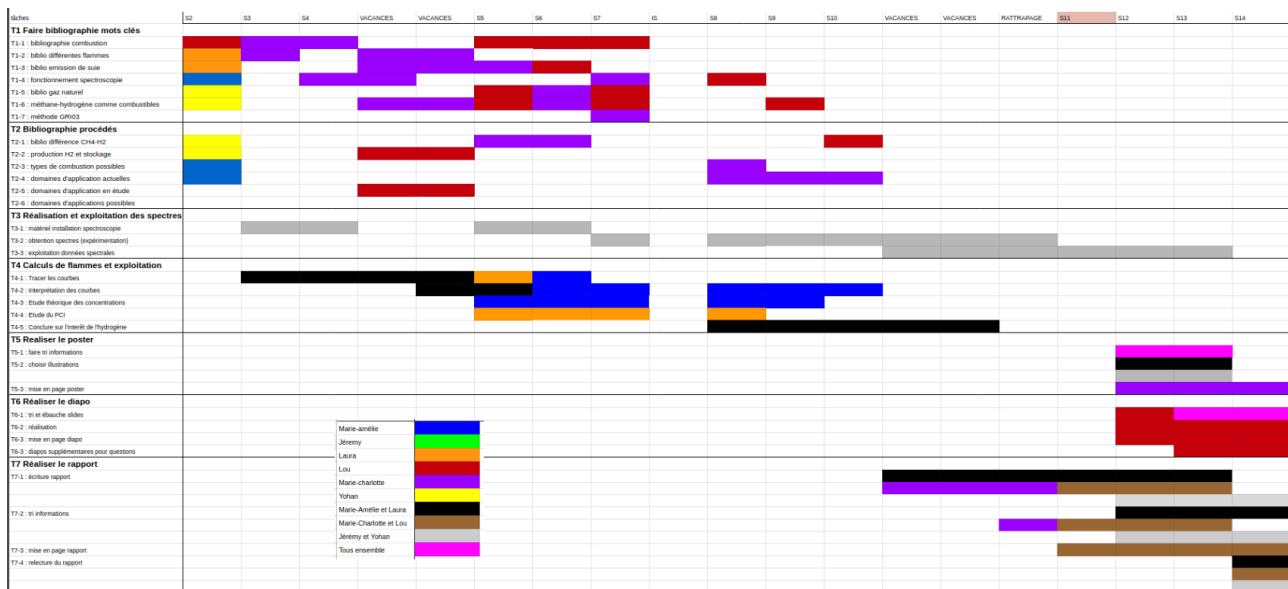


FIGURE 1.1 – Diagramme de GANTT final

Malgré la situation sanitaire de cette année, nous avons tout de même réussi à se réunir toutes les semaines durant les heures dédiées au projet de P6, ce qui a facilité la communication entre nous.

Chapitre 2

Travail réalisé et résultats

2.1 Recherches bibliographiques

La rédaction de cette première partie, nos recherches bibliographiques, est issue de la combinaison des informations importantes trouvées dans des livres ainsi que certaines thèses (toutes les références se trouvent à la page Bibliographie). Les livres et les thèses utilisés ont tous été trouvés sur le site en ligne de la bibliothèque de l'INSA.

2.1.1 La combustion

Qu'est-ce que la combustion ?

Beaucoup de civilisations se sont intéressées au phénomène de combustion, présent tout autour de nous, dans nos vies quotidiennes depuis les prémices de l'Humanité.

Prenons le feu pour exemple : il a toujours été présent dans la vie de l'Homme. Au départ craint, puis maîtrisé, il est l'une des étapes essentielles dans l'évolution de notre espèce. Le feu, qui fascine tant les Hommes encore aujourd'hui, est bien un phénomène de combustion. Concept laissé de côté jusqu'au XIXe siècle où des physiciens, tels que Sadi Carnot (1796-1832) fils du mathématicien français Lazare Carnot, se penchent plus précisément sur la réelle nature des énergies et de la combustion. C'est dans ces années que Carnot publie l'idée du fameux cycle thermodynamique qui permet d'utiliser la chaleur comme énergie en la transformant en travail dans un système. Avancée majeure lors de la Révolution industrielle, ce cycle a permis par la suite le développement des moteurs que l'on connaît aujourd'hui.

Ici, la combustion fait référence à n'importe quelle réaction chimique relativement rapide d'une phase gazeuse qui libère de l'énergie considérable telle que de la chaleur. Les étapes chimique et physique de la combustion, c'est-à-dire la destruction et le réarrangement de certaines molécules, font relâcher beaucoup d'énergie. Les réactions nécessitent des températures élevées de l'ordre de 2000°C et ne durent que quelques millièmes de seconde seulement.

Jusqu'à récemment, les enjeux environnementaux de la combustion n'étaient que très peu voire pas étudiés. Aujourd'hui, dans un monde où la demande comme la population connaissent une forte croissance, et où les ressources s'épuisent de plus en plus rapidement, la combustion devient un enjeu essentiel de notre futur. On reconnaît alors qu'il nous faut chercher une nouvelle source d'énergie répondant à certains critères :

- intarissable
- non-polluant
- prêt à l'utilisation
- viable économiquement parlant

- neutre en terme de politique
- accessible techniquement
- valide légalement parlant
- accepté par l'opinion publique
- esthétique

Un combustible peut être défini comme une ressource limitée de potentiel énergétique chimique. L'énergie y est stockée dans la structure moléculaire d'un composé spécifique et est relâchée au cours de diverses réactions chimiques précises. Les combustibles chimiques sont classés selon certains aspects tels que :

- Haute densité d'énergie
- Température élevée de combustion
- Capacités thermiques stables
- Pression de la vapeur faible
- Non toxique pour l'environnement

Il existe deux types de flammes de combustion : diffusion et prémélange. Dans le cas d'une bougie, les réactions chimiques nécessitent la présence de deux types d'espèces différentes. Dans notre exemple, l'air comme oxydant et les vapeurs de bougies comme réductrices, qui proviennent donc d'endroits différents de l'espace. Le deuxième type de flamme, celle de prémélange, les réactions chimiques nécessitent soit un seul corps chimique (qui peut être explosif, dangereux), ou bien deux corps différents mais déjà mélangés à l'avance. Des exemples de ces flammes se trouvent dans le bec de gaz, ou dans les moteurs à explosion à allumage commandé. Sa propriété principale est donc de se propager.

2.1.2 Méthane et hydrogène

Les gaz naturels au quotidien

Le gaz naturel est un combustible présent naturellement à l'état gazeux dans les roches poreuses sous terre. C'est une source d'énergie grâce à son gaz composé d'hydrocarbures : en grande majorité le méthane (CH_4) (autour de 94%), propane (C_3H_8), butane (C_4H_{10}), éthane (C_2H_6), et pentane (C_5H_{12}).

Le gaz naturel est le résultat de transformation de matières organiques dans des formations géologiques. Celui-ci peut être produit à partir des deux étapes suivantes :

- une extraction du gaz retrouvé dans le sous-sol
- son épuration afin de le rendre utilisable à la fois à son transport mais aussi à sa consommation.

Après ces deux étapes, le gaz naturel peut être transporté et distribué par des réseaux locaux.

Le composé chimique le plus présent, le méthane, est inodore mais est odorisé pour des raisons de sécurité. Le gaz naturel est aujourd'hui l'une des ressources énergétiques les plus utilisées dans le monde.

En France, on utilise principalement le gaz naturel comme source de chauffage (chauffage des locaux, production de vapeur pour l'industrie, eau chaude sanitaire) et comme source pour la production d'électricité.

Comme les réserves géologiques sont nombreuses, le gaz naturel est une ressource énergétique économique, fiable, performante et utile dans de nombreux domaines dont l'industrie, le secteur tertiaire et le secteur résidentiel.

Le méthane, le gaz naturel d'hier et d'aujourd'hui

Le méthane est un gaz présent à l'état naturel sur la Terre. La formule chimique de ce hydrocarbure de la famille des alcanes se note CH_4 (un atome de carbone et quatre atomes d'hydrogène).

Découvert en 1776 par Alessandro Volta, le méthane se trouve dans des régions naturelles peu ou pas oxygénées, comme les marais. Il est produit par les organismes vivants (végétaux, animaux...) sous l'effet de leur fermentation puis de leur digestion. Incolore et inodore, le méthane constitue plus de 90% du gaz naturel, qui est la troisième ressource énergétique mondiale utilisée, après le pétrole et le charbon. Le méthane est le seul hydrocarbure qui puisse être obtenu par un procédé naturel.

Cependant, le méthane ne présente pas que des avantages puisqu'il est un gaz qui contribue fortement à l'effet de serre. En effet, sa durée de vie dans l'atmosphère est d'environ 12 ans et son potentiel de réchauffement est 62 fois celui du dioxyde de carbone. Les émissions de méthane proviennent des décharges, de l'exploitation des mines de charbon et de gaz naturel bien entendu, mais surtout des activités d'élevage. En France, l'agriculture et la forêt (notamment bas fonds et forêts inondées) contribueraient pour 70 % aux émissions de méthane.

L'hydrogène, un avenir plus vert

L'hydrogène est le premier élément dans la table périodique. Bien qu'étant l'élément le plus répandu dans l'univers, il n'existe pratiquement pas sous forme libre dans la nature et est retrouvé essentiellement sous forme combinée, comme par exemple dans l'eau, où ses atomes se fixent à ceux de l'oxygène.

Petit résumé de sa découverte : Jean Baptiste van Helmont (1577-1644), un médecin né à Bruxelles, étudie les phénomènes chimiques et en observe ceux de l'hydrogène à partir du fer et d'un acide. Pour lui, l'eau est un élément, le feu n'en est pas un, alors que l'air sert seulement de réceptacle aux exhalaisons. Robert Boyle (1627-1691), un savant irlandais, parvient à recueillir l'hydrogène produit à partir du fer et de l'acide sulfurique. Il lui donne non seulement le nom d' "air generated de novo" mais aussi d' "inflammable solution of mars (ancienne nomenclature du fer)", en supposant que celui-ci vient du métal. Cet atome a été identifié par le chercheur anglais Henry Cavendish en 1766 qui réussit à l'isoler en faisant agir l'acide sulfurique et l'acide chlorhydrique sur le fer, l'étain et le zinc. Après avoir déterminé certaines de ses propriétés il montre qu'il est bien différent de l' "air commun" et en particulier du dioxyde de carbone. Antoine Lavoisier, chimiste français qui lui a donné son nom, *hydrogenium*, à partir des racines des mots "eau" et "engendrer" grecques. Puis en 1800, Nicholson et Carlisle ont réussi sa production à partir de l'électrolyse de l'eau. Production d' H_2 combinée à la capture de CO_2 . L'hydrogène peut être produit à partir de n'importe quelle source d'énergie. À ce jour, nous sommes sur une production de 72,2 millions de tonnes d'hydrogène par an. Cependant, l'essentiel de l'hydrogène aujourd'hui n'est pas dirigé vers l'énergie, mais vers des applications plutôt chimiques. La production mondiale (en 2009) était estimée à 500 milliards de $N.m^3$ (gazeux à 1 atm). L'hydrogène produit actuellement est utilisé à 95% par l'industrie chimique et la métallurgie, le reste étant commercialisé (merchant hydrogène). Les industries chimiques l'utilisent pour produire du méthanol, de l'ammoniac (50% des besoins) ou pour le raffinage du pétrole (désulfuration). C'est aussi le combustible des lanceurs spatiaux. Ariane en utilise 25t. Aujourd'hui, 95% de l'hydrogène est produite à partir d'hydrocarbures, mais cette production ressort du CO_2 (un gaz à effet de serre). Le reformage de gaz naturel par application de chaleur est actuellement le procédé le plus utilisé grâce à son coût économique faible. L'électrolyse produit de l'hydrogène en utilisant un courant électrique pour séparer l'eau en hydrogène et oxygène.

On retrouve l'hydrogène sous forme liquide ou gazeuse (le plus courant), y compris dans l'industrie, notamment pétrolière. Exemple : Towngas, un gaz fortement utilisé au XXème siècle est composé à 50% d'hydrogène.

L'hydrogène a quelques propriétés intéressantes comme la plus basse masse molaire (de 2,016g/mol), étant l'élément le plus léger, ce qui en fait un avantage pour les ballons ou dirigeables, mais un inconvénient pour son transport et stockage. Sa densité est de 0,0899 par rapport à l'air à 0°C (273,15 K) et 1 atm. Ce gaz est incolore, inodore, non corrosif et non toxique. Lorsqu'il brûle, sa flamme est pratiquement invisible. Son point d'ébullition est proche de -252,76°C (20,39 K), soit utilisé comme carburant dans les moteurs-fusée. Sa masse volumique à cette température est de 70,79 g/L.

Le PCI de l'hydrogène est de 120 MJ/kg.

2.1.3 La méthode de la spectroscopie

À partir du milieu du XIXe siècle, les hommes disposent d'un nouvel objet leur permettant de se rapprocher d'un des sujets qui les fascine le plus : les étoiles. En effet, au début du XXe siècle, on réalise qu'un appareil photographique peut aider à observer les astres. À partir de ce moment, différents appareils se rapprochant de ce procédé voient le jour, toujours plus pointus dans la recherche des spectres astraux : les spectrographes. Composés au départ d'une lunette astronomique complétée d'un prisme, ils ont évolué pour aujourd'hui prendre plusieurs formes différentes selon leur utilisation et selon le type de spectre observé.

Le principe de spectroscopie infrarouge repose sur l'absorption de la lumière par la plupart des molécules dans la région de l'infrarouge du spectre électromagnétique et en convertissant cette absorption en vibration moléculaire. Cette absorption correspond spécifiquement aux liaisons présentes dans la molécule. Avec un spectromètre, cette absorption du rayonnement infrarouge par le matériau de l'échantillon est mesurée en fonction de la longueur d'onde (ou plus pratiquement du nombre d'onde qui est l'inverse de la longueur d'onde, typiquement de 600 à 4000 cm^{-1}).

Les flammes d'hydrogène émettant en majorité des bandes infrarouge d' H_2O et ultraviolet d' OH . sont d'origine thermique. Au contraire, dans les flammes d'hydrocarbures, comme le CH_4 , les émissions lumineuses sont d'origine chimiluminescente. Celles-ci puiseraient leur origine et leur excitation lors d'une étape de la réaction fortement exothermique entre l'hydrocarbure et OH .

2.2 Simulation numérique de flamme

2.2.1 Préambule

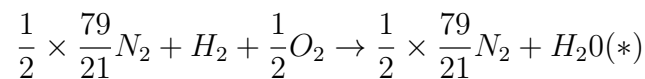
Dans cette partie, nous allons étudier le comportement chimique d'une flamme, à l'aide de données fournies par plusieurs simulations numériques. Ces simulations permettent d'obtenir la fraction molaire des différentes espèces chimiques en présence en fonction de l'altitude à laquelle on se place dans la flamme. Pour chaque simulation, la proportion d'hydrogène et de méthane dans le combustible varie et on note cette proportion $\alpha = \frac{\%H_2}{\%H_2 + \%CH_4}$.

Dans un premier temps, nous avons cherché parmi les nombreuses espèces chimiques présentes lors de la simulation lesquelles étaient les plus intéressantes pour l'étude de la flamme. Nous avons donc conservé dans une première analyse les produits de la combustion : oxygène, hydrogène et méthane, ainsi que les réactifs de la combustion : dioxyde de carbone et eau. Comme nous avons utilisé comme comburant l'air qui est constitué à 78% d'azote, nous avons conservé ce dernier pour l'étude. Finalement, une réaction chimique ne se faisant pas en une seule étape, elle nécessite la création d'intermédiaires réactionnels. Nous avons donc également dû les inclure à notre analyse et, afin de ne pas surcharger les graphes nous n'avons conservé que les plus intéressants : CO, OH, CH, C, O, H, N .

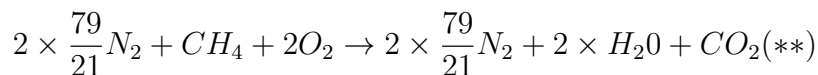
2.2.2 Calcul de concentration

Grâce à l'équation de la réaction de combustion, on peut calculer les quantités de matière des différents réactifs et produits afin de les comparer aux valeurs obtenues avec la simulation numérique.

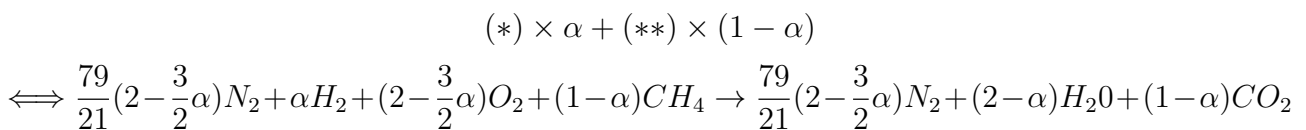
Dans la cas où $\alpha = 1$, on obtient :



Dans le cas où $\alpha = 0$, on obtient :



L'équation de la réaction dans le cas général nous donne donc :



Pour pouvoir calculer l'évolution des quantités de matière à l'aide d'un tableau d'avancement, il est nécessaire de disposer des quantités de matière initiales. Cependant, dans la simulation numérique, les quantités initiales des différents réactifs sont données en fraction molaire $x_i = \frac{n_i}{n_{total}} \iff n_i = x_i \times n_{total}$. Sachant que le nombre de moles total vaut la somme des coefficients stoechiométriques on a donc :

$$n_{total} = \frac{79}{21} (2 - \frac{3}{2}\alpha) + \alpha + (2 - \frac{3}{2}\alpha) + (1 - \alpha).$$

Le méthane et l'hydrogène sont limitants et introduits dans les proportions stoechiométriques donc, $\xi_f = \frac{n_{H_2}}{\alpha} = \frac{n_{CH_4}}{1 - \alpha}$.

Afin d'effectuer ces calculs pour plusieurs valeurs de α , de manière efficace, il faut utiliser un tableur (voir Annexe C).

On remarque que les valeurs obtenues lors de la simulation sont assez proches des valeurs théoriques. Cependant un léger décalage est observé pour certaines espèces chimiques

comme l' O_2 qui n'est pas totalement consommé, et l'eau qui est produite en moins grande quantité. Cela peut s'expliquer par le fait que la simulation numérique ne représente pas la totalité de la flamme (Pour indication, la simulation s'arrête à une hauteur de 3 cm). Cela est confirmé lorsque l'on regarde l'évolution de la somme des fractions molaires.

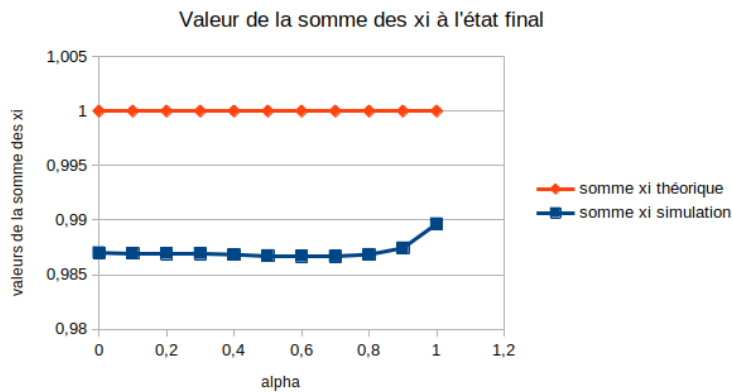


FIGURE 2.1 – Évolution de la somme des x_i à l'état final en fonction de la valeur d'alpha

La fraction molaire représentant la fréquence de l'espèce chimique au sein du mélange, on devrait avoir $\sum x_i = 1$. C'est bien le cas en théorie mais pas au niveau de la simulation (voir figure 2.1). Il existe donc d'autres espèces chimiques en présence, qui ne sont ni des réactifs, ni des produits.

Au cours de la réaction on voit donc apparaître des espèces chimiques intermédiaires qui vont intervenir au cours de la réaction. On les nomme intermédiaires réactionnels et ils sont complètement consommés à la fin de la réaction chimique. Ce sont ces espèces que nous allons étudier dans la seconde partie au niveau du front de flamme.

2.2.3 Etude du front de flamme

A l'aide des données fournies par les différentes simulations numériques, il est possible d'obtenir deux types de courbes : l'évolution de toutes les espèces chimiques pour une même valeur de α et l'évolution de la quantité de matière pour chaque valeur de α pour une même espèce chimique, le tout en fonction de l'altitude z (m). Le premier type de courbe, permet de comprendre le mécanisme général du front de flamme et de la réaction de combustion tandis que le seconde montre les différences entre les différentes valeurs de alpha.

Mécanisme général du front de flamme Pour commencer, nous avons tracé sur une même courbe l'évolution de chaque fraction molaire des réactifs et produits intervenants dans la combustion en fonction de l'altitude, et ce pour chaque valeur de alpha allant de 0 à 1. Reportées en annexe, elles nous permettent de faire plusieurs observations. Pour commencer, nous pouvons voir que dans chaque cas, le cœur de la combustion a lieu aux alentours de $z=0,011$ m. C'est à cette altitude que la majorité des réactifs est consommée et que les produits sont créés. En effet avant cette altitude, on retrouve les réactifs : CH_4 , H_2 et O_2 (présent dans l'air) dont la fraction molaire diminue à l'approche de l'altitude de combustion puisqu'ils sont effectivement consommés au cours de la réaction. Après cette valeur de z , la fraction molaire des principaux produits : CO_2 et H_2O augmente considérablement, puisqu'ils sont effectivement produits au cours de la réaction. Entre deux, nous pouvons observer des petits pics qui correspondent aux espèces intermédiaires : O , H , OH , qui sont produites puis consommées lors de la combustion.

L'influence de α La première chose remarquable quand on fait varier la valeur de α est que les intermédiaires réactionnels ne sont pas les mêmes. En effet, les réactifs de la réaction étant différents, il paraît logique que les intermédiaires réactionnels le soient également. Pour $\alpha = 0$ on aura donc la formation de CH et de CO tandis que quand $\alpha = 1$ on voit

apparaître OH . Bien sûr, pour les valeurs de α entre-deux, on remarquera la présence de toutes ces espèces intermédiaires mais dans des proportions différentes.

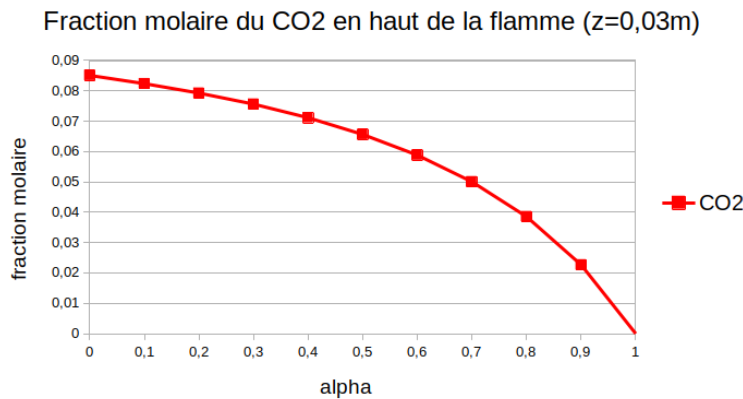


FIGURE 2.2 – Fraction molaire du dioxyde de carbone à la fin de la flamme

Ensuite, on peut remarquer qu'en haut de la flamme, le dioxyde de carbone n'est pas produit linéairement en fonction de la valeur de α mais suit plutôt un modèle exponentiel. Quand la valeur de α est grande, il est donc très intéressant de faire jouer les proportions de méthane et d'hydrogène du combustible car un léger écart de la valeur de α entraîne un écart significatif au niveau de la production de CO_2 , une espèce polluante. (voir figure 2.2)

On remarque également une singularité au niveau de l'hydrogène. On peut observer que H_2 est à la fois consommé et produit lors de la réaction. Il est donc à la fois un réactif et une espèce intermédiaire. L'équilibre parfait entre le H_2 produit et le H_2 consommé se trouve pour une valeur de α comprise entre 0,2 et 0,25. (Voir Annexe C)

Finalement, on peut voir un décalage au niveau de l'apparition du front de flamme. (voir figure 2.3)

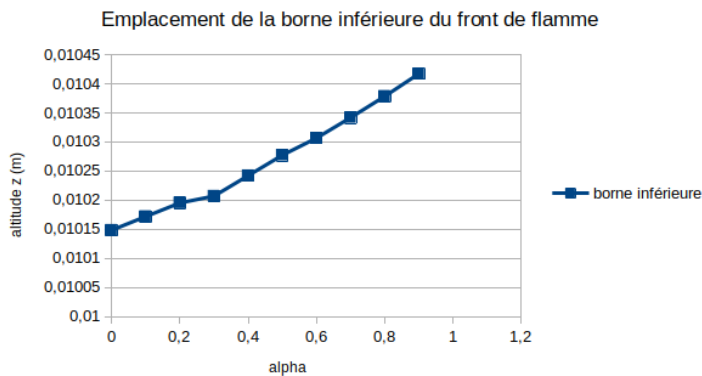


FIGURE 2.3 – Emplacement du front de flamme

En effet, plus la valeur de α est grande, plus l'apparition des espèces chimiques est rapide dans la flamme. Cela s'explique car la température adiabatique atteinte pour une flamme 100% hydrogène est plus importante que celle pour une flamme 100% méthane (voir annexe C). Comme la réaction chimique dépend de la température, il paraît donc logique de voir apparaître un décalage du front de flamme.

2.2.4 Calcul de PCI (pouvoir calorifique inférieur)

Le PCI est la quantité de chaleur dégagée lors d'une combustion. Le PCI total vaut :

$$PCI_{total} = (1 - \alpha) * PCI(CH_4) + \alpha * PCI(H_2)$$

Ce qui est intéressant ici, c'est de s'intéresser aux parts de chaleur apportées par H_2 et par CH_4 . En effet, le PCI apporté par CH_4 peut se calculer ainsi :

$$PCI(\text{Apportepar}CH_4) = (1 - \alpha) * PCI(CH_4)$$

De même pour la part de PCI apportée par H_2 :

$$PCI(\text{Apportepar}H_2) = \alpha * PCI(H_2)$$

Nous commençons par les valeurs connues de $PCI(CH_4)=803,3\text{kJ/mol}$ et $PCI(H_2)=241,94\text{kJ/mol}$. Tout d'abord, nous calculons le $PCI(\text{total})$ en fonction des différentes valeurs de α , puis, nous calculons les $PCI(\text{apporté par } CH_4)$ et $PCI(\text{apporté par } H_2)$ correspondants. Nous répétons ensuite le même exercice avec cette fois les valeurs connues de PCI en kWh/m^3 , c'est-à-dire $PCI(CH_4)=9,94\text{kWh/m}^3$ et $PCI(H_2)=2,99\text{kWh/m}^3$. Nous remarquons que pour ces valeurs caractéristiques, nous avons une égalité des apports de chaleur venus de CH_4 et H_2 pour une certaine valeur de α comprise entre 0,76 et 0,80 :

$$PCI(\text{Apportepar}CH_4) = (1 - \alpha) * PCI(CH_4) = \alpha * PCI(H_2) = PCI(\text{apportpar}H_2)$$

l'égalité est à $\alpha=0,769$, que ce soit en kJ/mol ou kWh/m^3 .

Nous allons maintenant raisonner en terme de masse. Avec les valeurs de $PCI(CH_4)=500081,05\text{kJ/kg}$ et $PCI(H_2)=120010,91\text{kJ/kg}$, nous pouvons réaliser les calculs précédents, et cette fois, l'égalité entre les apports de chaleur venant de CH_4 et venant de H_2 a lieu pour une certaine valeur de β compris entre 0,25 et 0,30. Par un calcul plus précis, nous trouvons $\beta=0,294$. Avec les valeurs de $PCI(CH_4)=14,82\text{kWh/kg}$ et $PCI(H_2)33,21\text{kWh/kg}$, l'égalité entre les différents apports de chaleur se fait pour une certaine valeur de β compris entre 0,30 et 0,35. En le calculant plus précisément, on trouve $\beta=0,309$.

Aussi, nous avons cette fois utilisé la lettre β pour parler du coefficient en terme de masse, et non plus de volume comme pour α . Il est donc intéressant maintenant de retrouver la valeur de α correspondante au β trouvé. Pour cela, les calculs suivants donnent :

$$\alpha = \frac{\beta}{(\beta + (\frac{\rho(H_2)}{\rho(CH_4)}))(1-\beta)} = 0,757 \text{ pour } \beta=0,309 \text{ (kWh/kg)}$$

$$\alpha = \frac{\beta}{(\beta + (\frac{M(H_2)}{M(CH_4)}))(1-\beta)} = 0,768 \text{ pour } \beta=0,294 \text{ (kJ/kg)}$$

Nous remarquons l'importance de la concordance des sources et l'écart qu'elle peut apporter entre les valeurs, puisque nous sommes censés retrouver la première valeur de $\alpha=0,769$, calculée directement depuis les valeurs volumiques.

Pour terminer cette étude d'apport des différentes espèces dans la combustion, nous pouvons maintenant observer l'apport de masse cette fois des espèces CH_4 et H_2 dans la combustion, c'est-à-dire, pour quelle valeur de α il y a égalité des apports de masse de la part de ces deux espèces. Pour cela, à masse égale, ce pourcentage peut s'écrire :

$$\alpha = \frac{V(H_2)}{V(H_2)+V(CH_4)}$$

Les valeurs des masses volumiques des espèces considérées se définissent comme :

$$\rho(CH_4) = \frac{m(CH_4)}{V(CH_4)} \text{ et } \rho(H_2) = \frac{m(H_2)}{V(H_2)}$$

Dans ces formules, ρ est connu et nous pouvons prendre $m=1\text{kg}$, pour considérer 1kg de masse pour chacune des deux espèces contenues dans la combustion. Les volumes correspondants aux espèces se calculent donc comme :

$$V(H_2) = \frac{m}{\rho(H_2)} \text{ et } V(CH_4) = \frac{m}{\rho(CH_4)}$$

Nous avons maintenant le volume apporté par chacune des espèces lorsqu'on introduit initialement 1kg de chaque. Les calculs donnent : $V(H_2)=11,1259 \text{ m}^3$ et $V(CH_4)=1,4905 \text{ m}^3$. Ce qui donne finalement :

$$\alpha = \frac{V(H_2)}{(V(H_2)+V(CH_4))} = \frac{11,1259}{(11,1259+1,4905)} = 0,88$$

Ce qui veut dire que lorsque nous avons un mélange avec 88% de H_2 , et donc 12% de CH_4 , nous avons exactement la même masse qui provient des deux espèces.

2.3 Expériences

2.3.1 Protocoles expérimentaux

Protocole préliminaire

L'idée du protocole préliminaire vient d'une constatation simple : comment recueillir idéalement un maximum d'intensité d'une flamme? Pour la hauteur, il a été décidé d'étudier la zone de circulation des gaz en bas de la flamme puis la zone de turbulence sur le haut. Cependant le spectroscope ne peut se trouver au cœur de la flamme; alors une distance d'acquisition doit être choisie. Ainsi est venue l'idée d'utiliser le principe inverse de la lumière.

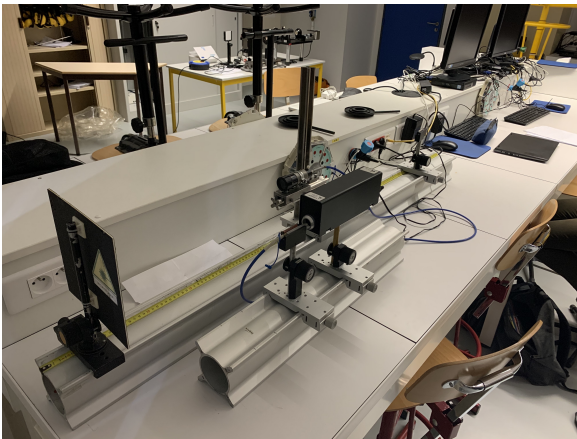


FIGURE 2.4 – Montage en salle de TP pour protocole préliminaire

Celui-ci consiste en placer un laser devant l'entrée d'une fibre optique puis une lentille convergente à la sortie, avec un écran noir en face de cette dernière. La lumière traverse alors la fibre optique dans le sens contraire que celui qu'elle prendra dans le protocole principal. Ce montage, visible ci-contre, doit permettre de déterminer la distance focale entre la sortie de la fibre et le panneau noir du fait que la tâche résultante apparue commence en théorie à diminuer en largeur à partir de cette distance focale.

Cependant, les résultats liés à cette méthode n'étaient pas assez probants pour conclure. Déjà, nous avons dû changer le laser et la fibre optique car la tâche lumineuse était bien trop faible. Mais malgré cela, la tâche apparue sur le panneau ne variait pas de manière suffisamment flagrante pour déterminer une distance focale adéquate. De par le temps déjà consacré à ce premier protocole, une distance approximative d'acquisition (une cinquantaine de centimètres de la flamme) fut arbitrairement choisie afin de recueillir les informations provenant de la flamme sans endommager le spectroscope.

Protocole d'acquisition

Ce protocole expérimental est au centre de notre projet car il a pour objectif d'acquérir le spectre d'émissions de flammes de mélange méthane-hydrogène. Le montage nécessite une fibre optique avec en entrée la lentille convergente, qui est vissé sur un mécanisme de rails afin de gérer facilement la hauteur et la distance par rapport à la flamme. De plus, un spectrographe est placé à la sortie de la fibre, et est connecté à l'ordinateur où le logiciel d'acquisition OceanView est présent.

Le spectrographe visible ci-contre permet de recueillir des intensités sur des longueurs d'onde entre 200 et 1100 nm ce qui permet d'étudier les émissions du spectre visible (400 à 750 nm) mais tout aussi bien celles du spectre ultraviolet (UV < 400 nm) et infrarouge (IR > 750 nm).



FIGURE 2.5 – Spectrographe RedTide USB 650 pixels

2.3.2 Traitement des données

Paramétrisation au brûleur

Afin de se familiariser avec le montage et le logiciel, nous avons commencé en salle de TP par placer un petit brûleur portatif au bout du mécanisme de rails, face à la lentille convergente, qui jouera le rôle de flamme.

Le logiciel OceanView recueille le signal optique du boîtier et le transforme en signal numérique. Ce signal traduit par le logiciel représente le spectre d'émission quantifiée par l'intensité lumineuse en fonction de la longueur d'onde. Les premières acquisitions effectuées sans allumer le brûleur donne déjà un spectre d'émission qui va correspondre au "bruit", c'est-à-dire les émissions lumineuses extérieures (lumière de la pièce, du jour; rayonnement...etc). Cela nous permet de comprendre qu'il sera nécessaire de faire une acquisition du bruit avant notre expérience puis de soustraire ces valeurs; afin de n'obtenir que l'intensité de la flamme. En effet, le logiciel recueille l'intensité pendant une durée t déterminée. Plus cette dernière est longue et plus l'intensité cumulée est grande : elle est donc proportionnellement liée à ce paramètre subjectif. Il faudra donc également prendre en compte ce temps d'acquisition.



FIGURE 2.6 – Brûleur

Acquisition au CORIA

Après nous être entraînés sur le brûleur, nous sommes allés au CORIA pour faire l'acquisition des données sur une flamme à hydrogène, à l'aide du montage ci-dessous.

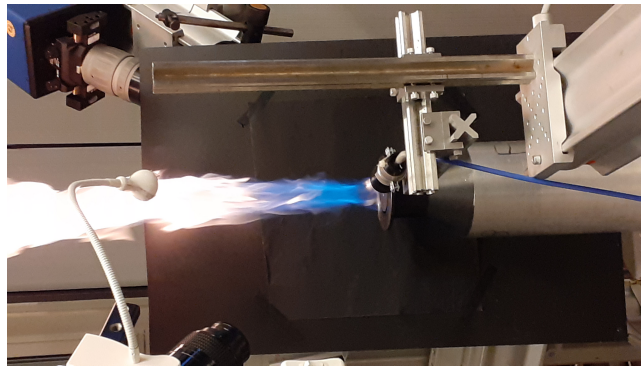


FIGURE 2.7 – Expérience et acquisition de données sur flamme à hydrogène au CORIA

L'expérience consiste en l'acquisition de l'intensité de la flamme en fonction de la longueur d'onde. L'acquisition des données s'est faite pour chaque α de 0 à 1, avec un incrément de 0,1; où la valeur du α correspond à la proportion d'Hydrogène ajoutée dans le mélange de gaz de combustion. Le laborantin présent ajoutait du H_2 dans le mélange tandis que nous faisons les mesures grâce à notre montage, précédemment testé. L'opération a été répétée deux fois : sur le bas de la flamme, zone de recirculation où la flamme est la plus stabilisée. Puis une fois plus haut sur la flamme, au-dessus de cette zone de recirculation, beaucoup plus turbulente, pour voir l'évolution des pics caractéristiques des différents radicaux dans ces différentes zones. Pour plus de précision, nous avons effectué plusieurs acquisitions pour chaque α : 30 acquisitions par α pour le bas de la flamme et seulement 10 acquisitions par α pour le haut de la flamme, le nombre d'acquisitions étant réduit pour en haut car le temps de l'expérience aurait été trop long. En effet l'intensité globale diminue lorsque la hauteur d'acquisition augmente, de ce fait nous avons dû augmenter le temps d'acquisition car la flamme fluctue énormément. Les données récupérées ont ainsi permis

de calculer les moyennes des acquisitions pour chaque α et ce pour le bas de la flamme et pour le haut de la flamme. La moyenne du bruit de fond, que nous avons pris soin d'acquérir lors de l'expérience au CORIA a été également soustraite. De plus, chaque acquisition est faite sur une durée d'acquisition propre; or un temps d'acquisition doublée implique une intensité doublée.

Les valeurs ont donc été rationalisées sur une seconde pour que les courbes soient comparables les unes avec les autres. Ce travail de traitement des données a donné de ce fait, onze graphiques (pour α allant de 0 à 1,0) de l'intensité en fonction de la longueur d'onde ayant la même base de temps d'acquisition; et ce pour chaque hauteur de spectroscopie (haut et bas).

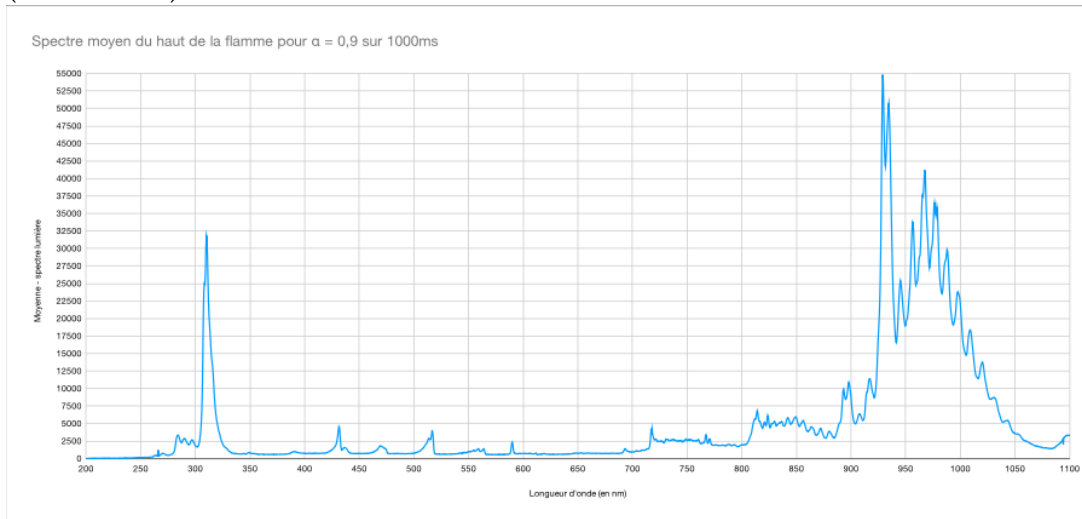


FIGURE 2.8 – Spectre du haut de flamme pour $\alpha = 0,9$

Ci-dessus, un exemple de graphique obtenu pour le haut de la flamme à $\alpha=0,9$ (pour les graphiques des autres α , et du bas de la flamme se référer à l'annexe B).

De plus, afin de voir l'évolution des pics principaux, l'ensemble des courbes a été rassemblé en deux graphiques récapitulatifs. Le graphique pour le haut de la flamme est visible ci-dessous tandis que celui du bas de la flamme est disponible en annexe B.

Ainsi a été obtenue l'évolution de l'intensité en fonction de α .

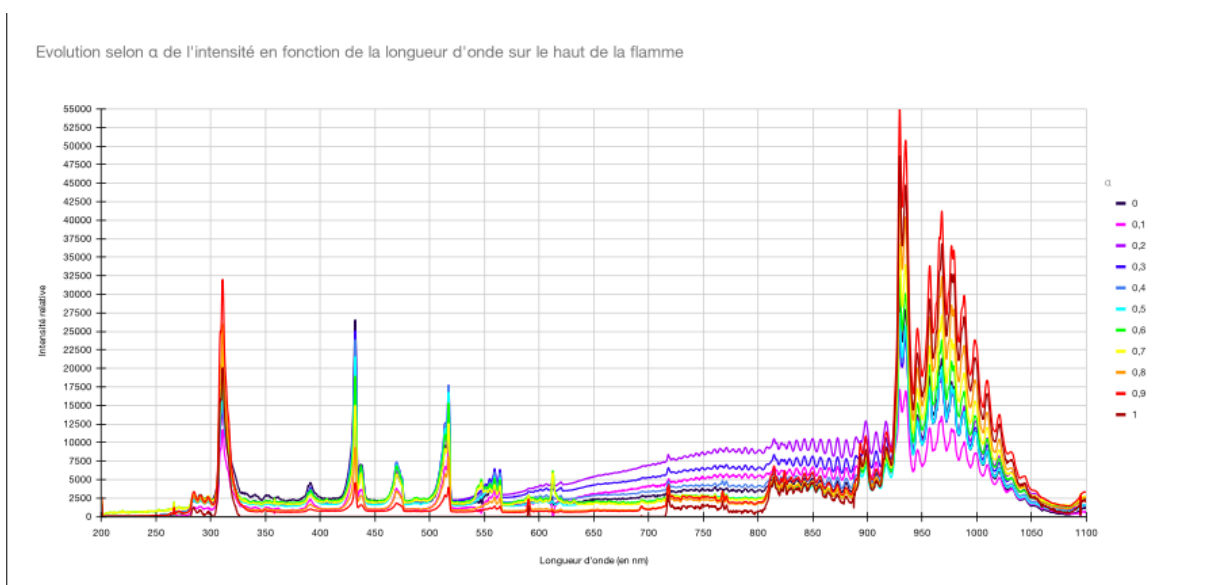


FIGURE 2.9 – Graphe récapitulatif des spectres pour chaque α

2.3.3 Exploitation des résultats

Evolution de l'intensité des pics caractéristiques

L'étude de ces graphiques permet de constater l'apparition de pics caractéristiques. Pour chacun d'entre eux, un travail d'analyse a été fait en sommant chaque intensité sur la gamme de longueurs d'onde correspondant à la largeur du pic. Ce travail donne alors l'évolution de l'intensité de chaque pic en fonction de α . Rassembler toutes ces évolutions sur un même graphique puis adimensionner ce dernier - rapporter les valeurs sur une valeur maximal fixé pour se ramener en pourcentage et non en intensité relative - permet de remarquer que certains pics ont une évolution semblable.

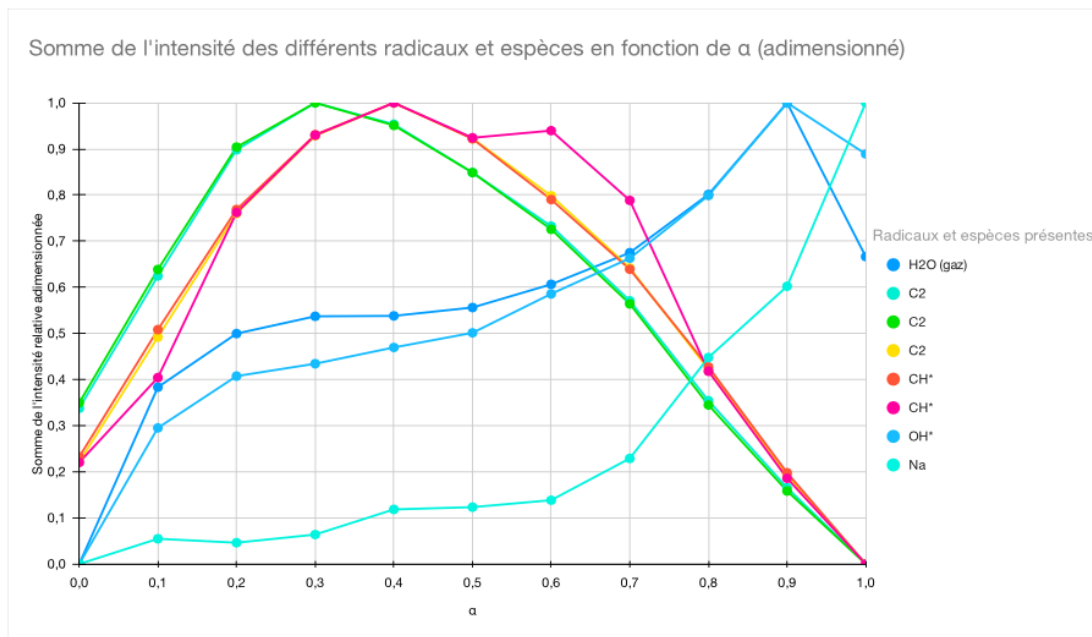


FIGURE 2.10 – Graphe adimensionné de l'intensité des pics

Le graphique ci-dessus montre que le radical OH^* et la vapeur d'eau (H_2O gazeux) ont une évolution similaire selon α : plus il y a d'hydrogène, plus leurs intensités augmentent. Également, le radical CH^* apparaît à plusieurs longueurs d'onde différentes et que dans un premier temps leurs intensités augmentent jusqu'à un maximum à $\alpha = 0,4$, ensuite son intensité diminue jusqu'à disparaître à $\alpha = 1$, ce qui est cohérent puisqu'il n'y a plus de méthane. L'analyse reste la même concernant l'évolution de l'intensité du radical C_2 , avec un maximum à $\alpha = 0,3$.

Apparition d'un pic non prévu par la théorie

Enfin, il y a, curieusement, apparition d'un pic à 589 nm qui correspond au Sodium (voir graphique page suivante).

Evolution de l'intensité du sodium en fonction du temps pour $\alpha = 1$

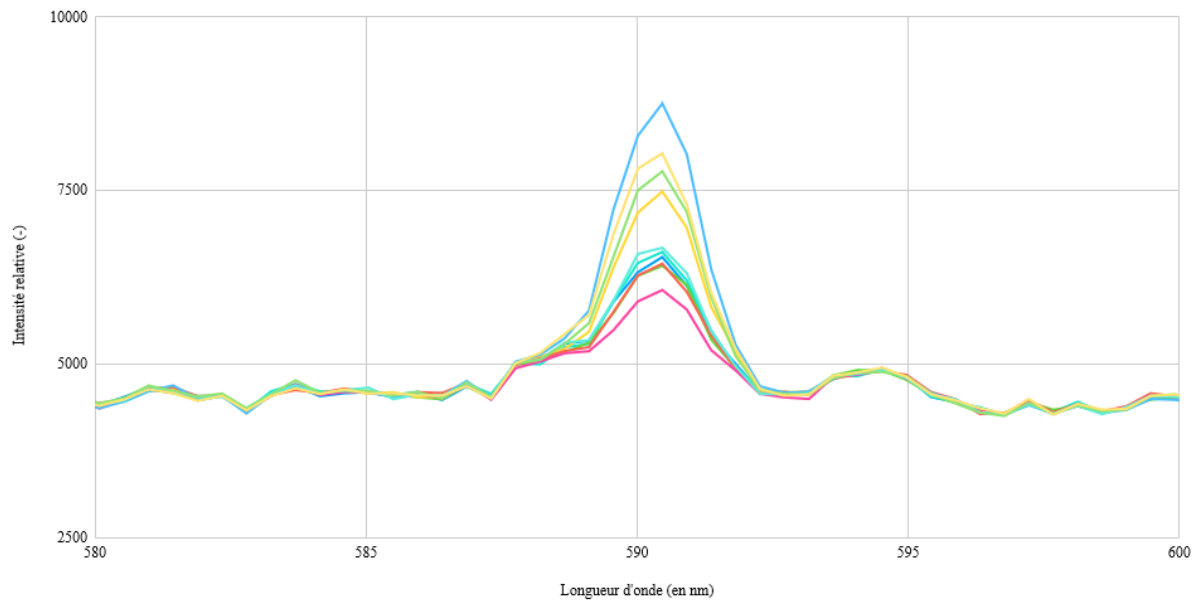


FIGURE 2.11 –

Intensité du pic du Sodium sur différentes acquisitions (pour un α fixé)

Une analyse statistique a permis de mettre en évidence le phénomène d'intermittence d'apparition du Sodium. En effet, le calcul d'écart-type sur les valeurs d'acquisitions du maximum d'intensité du pic caractéristique (longueur d'onde à 590,5 nm) donne un pourcentage de fluctuation par rapport à la moyenne de 30% sur le bas de la flamme ($\alpha = 0,9$) et 60% sur le haut ($\alpha = 1$). Ces différences de pourcentage s'expliquent par la turbulence de la flamme bien plus élevée sur le haut ; ce qui justifie la forte variation de sa composition en fonction du temps.

L'apparition de ce pic est intéressante car il n'y a à priori aucune raison de détecter l'élément Sodium dans une flamme de combustion d'un mélange $CH_4 - H_2$. L'intermittence de cet apparition remarquée précédemment pourrait suggérer une source extérieure telle que le matériau d'un élément impliqué dans l'expérimentation (conduite de gaz ou ventilation) ou encore des résidus dans les gaz de combustion ; mais aucune explication physiquement valable n'a été encore donnée. Ce résultat inattendu mériterait d'être approfondi d'autant plus qu'il a déjà été rencontré par les chercheurs du CORIA notamment, et n'est donc pas seulement un cas isolé dû à notre expérience.

Conclusion et perspectives

Au cours de ces derniers mois, nous avons eu la chance de pouvoir découvrir un domaine qui nous était alors inconnu. Nous avons effectué des recherches pour définir des mots qui, à prime abord, nous semblaient abstraits, ou alors dont nous pensions connaître le sens sans pour autant réussir à l'expliquer. Nous avons avancé des théories sur ce que nous allions observer grâce à des calculs et des graphiques sur des données qui nous ont été fournies et, finalement, nous avons pu démontrer certaines de ces théories par la pratique au travers de différentes expériences. Nous avons dû pour cela réfléchir à un montage précis, que nous avons par la suite mis en place avec du matériel mis à notre disposition par l'INSA. Nous avons même eu le privilège de pouvoir expérimenter notre projet au CORIA, sous l'oeil attentif de notre enseignant référent, M. Honoré. Finalement, nous avons eu la chance de pouvoir travailler sur un sujet de recherche en cours, sujet de certaines thèses également. Une chance car, en fournissant nos données recueillies, nous avons l'impression d'apporter notre pierre dans cet édifice, dans ce parcours vers une meilleure compréhension du monde qui nous entoure, à notre échelle d'étudiant ingénieur en deuxième année.

Lors de ce projet, nous avons dû et pu élargir nos connaissances sur un sujet sur lequel nous ne savions que peu de choses. Nous avons appris à nous organiser grâce à une nouvelle méthode de travail : le diagramme de Gantt. Par ce dernier, nous avons eu la possibilité d'organiser notre travail uniformément, de manière simple, avec des dates d'échéance à respecter sans pour autant s'être sentis mis sous pression. Nous avons avancé à notre rythme tout en étant efficace. Nous avons appris à nous remettre en question lorsque ce diagramme n'était pas respecté ; à communiquer ; à travailler avec des personnes avec lesquelles nous n'étions pas familiers. Nous avons tout simplement appris à travailler comme un ingénieur : nous avons pu toucher du doigt cette manière de travailler, de s'organiser, de gérer un projet à long terme, de faire confiance à nos partenaires. Nous sommes fiers d'avoir pu apporter chacun notre contribution à la réalisation de ce projet.

Il est évident que l'un des principaux objectifs de ce projet est de comprendre l'intérêt de l'utilisation de l'hydrogène aujourd'hui comme source d'énergie pour remplacer le méthane. Il vient donc naturellement comme perspective d'avenir pour ce projet de mettre en place des dispositifs utilisant l'hydrogène pour fonctionner.

Le train à hydrogène est un très bon exemple : présenté pour la première fois en 2016, commercialisé depuis 2018 en Allemagne, il apparaîtra bientôt également dans les paysages français. En effet, quatre régions françaises viennent de passer commande pour des TER à hydrogène. Leur lancement est prévu pour 2025. Une énorme avancée en sachant que le diesel, actuel carburant des TER, est responsable de 61% des émissions de CO_2 de ces derniers.

Bibliographie

- [1] BEGUIN, Claude *Une chronique de l'hydrogène*, PU Polytechnique, 2016.
- [2] BORGHI, Roland *La combustion et les flammes*, Paris : Ed. Technip., 1995.
- [3] BOUALLOU, Chakib *Le stockage d'énergie : conversion d'énergie en gaz combustible*, Presses des Mines, 2015.
- [4] BOUDELLAL, Méziane *La pile à combustible : l'hydrogène et ses applications*, Dunod : [L'Usine nouvelle], 2012.
- [5] BROWNING, D.R. *Méthodes Spectroscopiques*, Masson et cie, 1972.
- [6] CARON, Georges *Méthode Simplifiée de spectrographie*, Impr Léon Gy, 1909.
- [7] CONGRÈS OSE, École nationale supérieure des mines *L'hydrogène, vecteur énergétique du futur ?*, Presses des Mines, 2018.
- [8] CORDIER, Rémy, BOUCHER, Pascal, GOSELIN, Dominique *La régulation de combustion des procédés thermiques industriels alimentés au gaz naturel*, Gaz de France, 2000.
- [9] DRYER, Frederick L., SAWYER, Robert F. *Physical and Chemical Aspects of Combustion*, Gordon and Breach Science Publishers, 1997.
- [10] EIMER, Dag *Gas treating*, John Wiley Sons, 2014.
- [11] GLASSMAN, Irvin *Combustion*, Academic Press, 1987.
- [12] GUERASSIMOFF, Gilles, ADEGNON, Lisa *L'hydrogène : un vecteur pour la transition énergétique*, Presses des Mines - Transvalor, 2020.
- [13] KEATING, Eugene *Applied Combustion*, Marcel Dekker Inc., 1993.
- [14] LEWIS, Bernard, VON ELBE, Guenther *Combustion, flames and explosions of gases*, Academic Press, 2014.
- [15] DE SOETE, Gérard, FEUGIER, Alain *Aspects physiques et chimiques de la combustion*, Paris : Éditions Technip, 1976.
- [16] WILLIAMS, Forman Arthur, OPPENHEIM, Antoni K., OLFE, Daniel B. *Modern Developments in Energy, Combustion and Spectroscopy : in honor of S. S. Penner*, Pergamon Press, 1993.
- [17] AYOUB MECHLINE, "Étude de l'extension du régime de combustion sans flamme aux mélanges Méthane/Hydrogène et aux environnements à basse température", sous la direction de Abdelkrim Boukhalfa et de David Honore, 2013.
- [18] GUVEN UMUT, "Simulation haute-fidélité de la combustion pour les moteurs-fusées", sous la direction de Guillaume Ribert et de Julien Reveillon, 2018.
- [19] LARABI HAKIM, "Vers la modélisation multi-composants des flammes de spray", sous la direction de Abdelkrim Boukhalfa, 2019.
- [20] LIEN INTERNET, <https://www.alstom.com/fr/nos-solutions/materiel-roulant/coradia-ilint-le-premier-train-hydrogene-au-monde> (Valide à la date du 04/06/2021)

- [21] LIEN INTERNET, <https://www.sncf.com/fr/engagements/enjeux-rse/sncf-accelere-train-a-hydrogene> (Valide à la date du 04/06/2021)
- [22] LIEN INTERNET, <https://youtu.be/px4Wp96HWeI> (Valide à la date du 04/06/2021)
- [23] LIEN INTERNET, <https://energies.airliquide.com/fr/mediatheque-planete-hydrogene/applications-lhydrogene> (Valide à la date du 04/06/2021)
- [24] LIEN INTERNET, <https://gaz-tarif-reglemente.fr/gaz/comprendre-gaz-naturel/types-gaz/gaz-naturel.html> (Valide à la date du 04/06/2021)
- [25] LIEN INTERNET, <https://www.mediachimie.org/actualite/qu\T1\textquoterightest-ce-que-l\T1\textquoterighthydrogène-\T1\guillemotleft-vert-\T1\guillemotright> (Valide à la date du 04/06/2021)
- [26] LIEN INTERNET, <https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-00925554/document> (Valide à la date du 04/06/2021)
- [27] LIEN INTERNET, <https://www.societechimiquedefrance.fr/Methane.html> (Valide à la date du 04/06/2021)
- [28] LIEN INTERNET, <https://www.largus.fr/actualite-automobile/lhydrogene-a-t-il-un-avenir-comme-carburant-automobile-9280398.html> (Valide à la date du 04/06/2021)

Annexe A

Organisation du travail

Liste des tâches

T1 Faire bibliographie mots clés

- T1-1 : bibliographie combustion
- T1-2 : biblio différentes flammes
- T1-3 : biblio émission de suie
- T1-4 : fonctionnement spectroscopie
- T1-5 : biblio gaz naturel
- T1-6 : méthane-hydrogène comme combustibles
- T1-7 : méthode GRI03

T2 Bibliographie procédés

- T2-1 : biblio différence CH_4-H_2
- T2-2 : production H_2 et stockage
- T2-3 : types de combustion possibles
- T2-4 : domaines d'application actuelles
- T2-5 : domaines d'application en étude
- T2-6 : domaines d'applications possibles

T3 Réalisation et exploitation des spectres

- T3-1 : matériel installation spectroscopie
- T3-2 : obtention spectres (expérimentation)
- T3-3 : exploitation données spectrales

T4 Calculs de flammes et exploitation

- T4-1 : Tracer les courbes
- T4-2 : Interprétation des courbes
- T4-3 : Etude théorique des concentrations
- T4-4 : Etude du PCI
- T4-5 : Conclure sur l'intérêt de l'hydrogène

T5 Realiser le poster

- T5-1 : faire tri informations
- T5-2 : choisir illustrations

T5-3 : mise en page poster

T6 Réaliser le diapo

T6-1 : tri et ébauche slides

T6-2 : réalisation

T6-3 : mise en page diapo

T6-3 : diapos supplémentaires pour questions

T7 Réaliser le rapport

T7-1 : écriture rapport

T7-2 : tri informations

T7-3 : mise en page rapport

T7-4 : relecture du rapport

Diagramme de Gantt

Avant de commencer à travailler sur ce projet, nous avons réalisé un diagramme de Gantt afin de s'organiser et de se répartir les tâches.

Liste des tâches initiales tâches

T1 Faire bibliographie mots clés

T1-1 : bibliographie combustion

T1-2 : biblio différentes flammes

T1-3 : biblio émission de suie

T1-4 : fonctionnement spectroscopie

T1-5 : biblio gaz naturel

T1-6 : méthane-hydrogène comme combustibles

T1-7 : méthode GRI03

T2 Bibliographie procédés

T2-1 : biblio différence CH₄-H₂

T2-2 : production H₂ et stockage

T2-3 : types de combustion possibles

T2-4 : domaines d'application actuelles

T2-5 : domaines d'application en étude

T2-6 : domaines d'applications possibles

T3 Réalisation et exploitation des spectres

T3-1 : matériel installation spectroscopie

T3-2 : obtention spectres (expérimentation)

T3-3 : exploitation données spectrales

T4 Calculs de flammes et exploitation

T4-1 : tracer les courbes

T4-2 : alpha en fonction de la masse

T4-3 : étude front de flamme

T4-4 : comparaison front de flamme en fonction de alpha

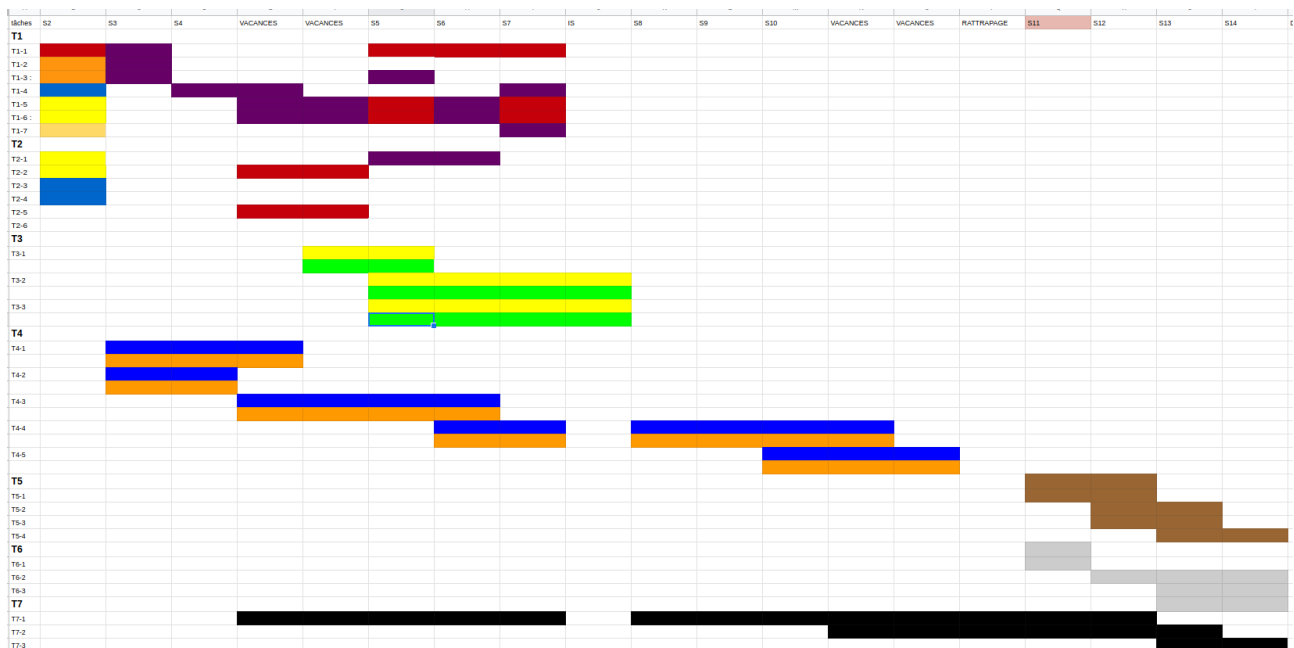
T4-5 : conclusion intérêt de l'hydrogène

T5 Réaliser le poster

T5-1 : faire tri informations

- T5-2 : choisir illustrations
- T5-3 : mise en page poster
- T5-4 : réalisation poster
- T6 Réaliser le diapo
- T6-1 : tri et ébauche slides
- T6-2 : réalisation
- T6-3 : diapos supplémentaires pour questions
- T7 Réaliser le rapport
- T7-1 : écriture rapport
- T7-2 : tri informations
- T7-3 : relecture rapport

Diagramme de Gantt initial



Marie-amélie	Blue
Jérémy	Green
Laura	Orange
Lou	Red
Marie-charlotte	Purple
Yohan	Yellow
TOUS	Black
poster	Brown
diapo	Grey

Modifications

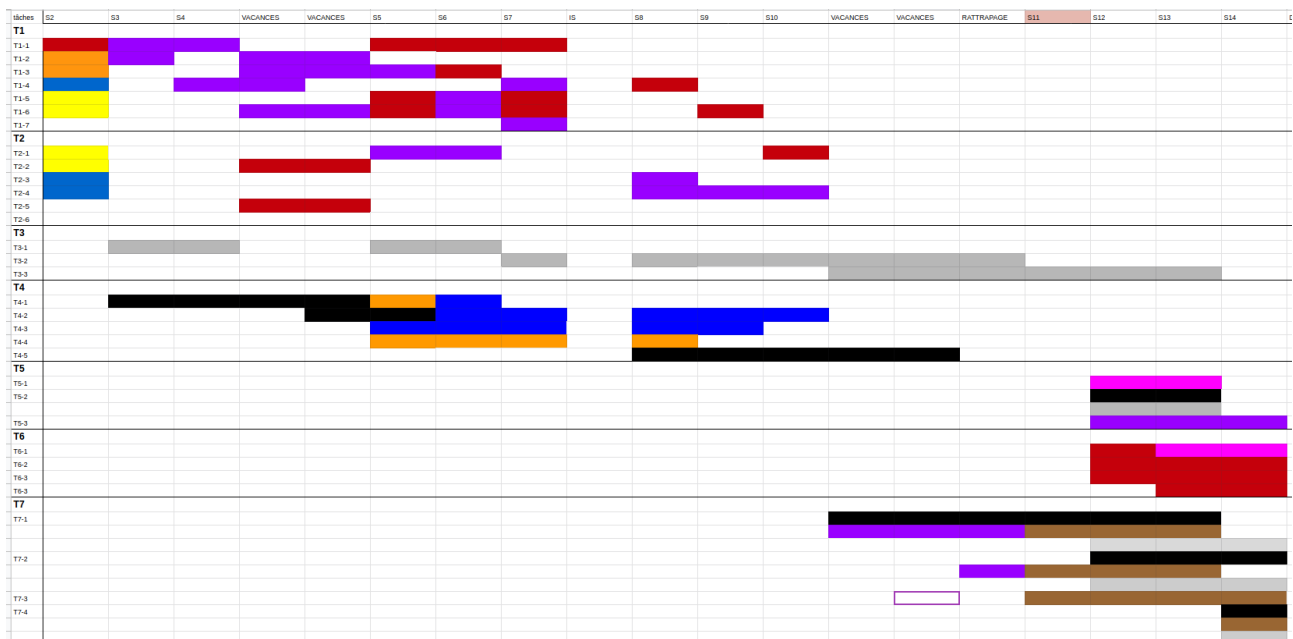
Au cours du projet, nous avons eu besoin de modifier le diagramme de Grant initial.

T1 Bibliographie mots clés + procédés Nous avons commencé par les recherches des mots clés. Comme celle-ci étaient un peu trop courtes pour comprendre le sujet on a dû revenir sur plusieurs mots clés à différentes reprises donc les recherches n'étaient pas complètes aux dates indiquées. Les recherches avec les livres empruntés à la BU ont elles aussi été plus longues que prévues donc ce qui était supposé être fait pendant les vacances a continué la semaine 5. Il nous reste encore à combiner nos deux différentes bibliographies.

T3 : Réalisation et exploitation spectres Premièrement, l'installation du matériel de spectroscopie (tâche T3-1) a pris une semaine de plus que prévu originellement car, du matériel étant manquant il a fallu lister et commander du matériel en plus pour la semaine suivante. Ensuite, l'obtention a été décalée évidemment de par ce manque de matériel expliqué précédemment; mais aussi par les difficultés rencontrées pendant l'installation du matériel. En effet pour réaliser le protocole dans de bonnes conditions il nous fallait réaliser un protocole préliminaire (avec du matériel à prévoir donc) ce qui a retardé donc l'obtention des spectres (tâche T3-2) de 2 semaines. Enfin l'exploitation des spectres (tâche T3-3) a été remise à semaine 09 au lieu de 05 auparavant, soit 3 semaines de décalage (sans compter la semaine d'IS) puisque dépendante des tâches précédentes; mais aussi par l'impossibilité d'accéder à la salle de projet en semaine 07.

T4 : Calculs de flamme et exploitation des profils La tâche 4.1 a duré plus longtemps que prévu. En effet, nous avons eu besoin d'une semaine supplémentaire, pendant les vacances, pour finir de tracer toutes les courbes qui nous paraissaient importantes. Nous avons modifié la tâche 4.2 car dans l'ordre chronologique, nous avons commencé par interpréter les courbes que nous avons obtenues. Cette nouvelle tâche 4.2 est l'équivalent de la tâche 4.3 de la version initiale. Nous l'avons renommé car notre étude des courbes nous a permis de faire l'étude du front de flamme mais aussi du comportement des différents constituants de cette flamme à d'autres endroits. Cette tâche nous a pris moins de temps que prévu mais elle nous a lancé vers des tâches non prévues initialement.

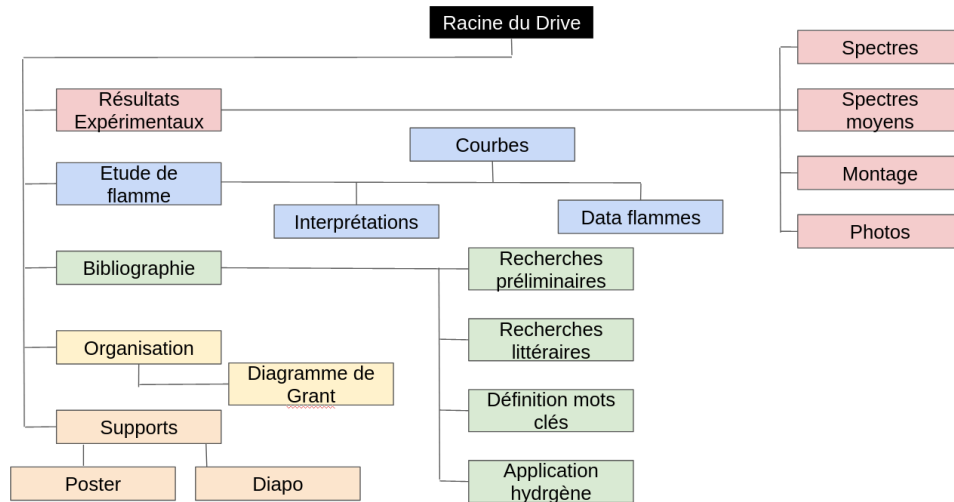
Diagramme de Gantt final



Marie-amélie	Blue
Jérémy	Green
Laura	Orange
Lou	Red
Marie-charlotte	Purple
Yohan	Yellow
Marie-Amélie et Laura	Black
Marie-Charlotte et Lou	Brown
Jérémy et Yohan	Grey
Tous ensemble	Pink

Organisation du travail

Afin de travailler ensemble le mieux possible, nous avons créé un drive afin de partager notre travail avec les autres membres du groupe.



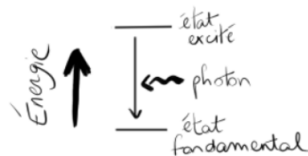
Pour la rédaction du rapport, nous avons utilisé un logiciel de travail collaboratif sous LATEX : overleaf.

Annexe B

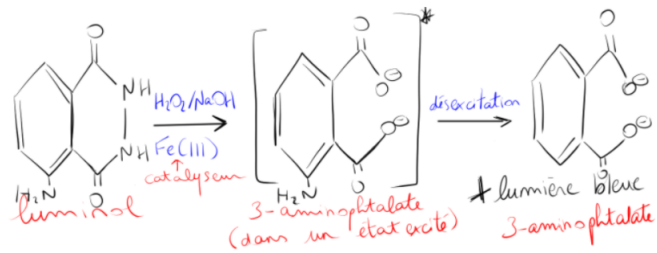
Documentation technique

B.1 Le principe de Chimiluminescence

Les zones réactionnelles de combustion sont caractérisées par une intense émission de lumière visible à l'œil nu. Cette dernière pourrait être d'origine thermique, cependant il a été remarqué que le front de flamme émet plus de lumière à des longueurs d'onde plus courtes que si l'énergie avait été répartie équitablement lors de la combustion. Cet écart est dû au fait que certaines espèces excitées naissent de processus élémentaires de chimiluminescence. Durant ceux-ci, une partie voire la totalité de la chaleur de la réaction est conservée par l'une des molécules produites sous forme d'une énergie d'excitation qu'elle émet au bout d'un certain temps dans un spectre bien défini. La chimiluminescence est intéressante à étudier dans ce cas-ci car elle permet de mettre en évidence le déséquilibre thermique créé en front de flamme lors de la combustion. L'énergie d'une particule individuelle est la somme de quatre composés : énergie de translation, énergie de rotation, énergie de vibration et énergie électronique. Lorsque que cette particule reçoit une certaine quantité d'énergie, cette dernière va se propager selon tous les degrés de liberté possibles de la particule. Lorsque les énergies atteignent un stade d'équilibre au bout d'un certain temps, le gaz est alors caractérisé par une certaine température ; l'émissivité du gaz sera de nature thermique. Cependant, on observe une intense émission dans la zone réactionnelle de combustion dans le spectre du visible et des ultra-violets bien supérieur à ce qui est attendu lorsque le système est en équilibre thermodynamique. Cela est dû au fait qu'au cours de la combustion, avant l'arrivée à l'équilibre des énergies, certaines espèces sont créées par réactions chimiques. Cela peut arriver lorsque le produit est directement formé dans un état électronique excité : en revenant à un état plus stable, celui-ci va émettre de la lumière. C'est ce qu'on appelle la chimiluminescence. Réaction irréversible, son intensité dépendra directement de la concentration d'espèces émettrices correspondantes.



Exemple d'application :



Application de la chimiluminescence :

- En criminologie, afin de révéler les taches de sang grâce au luminol, qui réagit en présence du fer contenu dans le sang.
- Dosage des oxyazotes dans l'atmosphère.
- Présente chez des organismes vivants (ex : lucioles, champignons), elle est alors appelée bioluminescence. Elle sert à des fonctions basiques telles que la reproduction, la chasse, le camouflage, etc.

B.2 Stabilisation et limite de la flamme

B.2.1 Stabilisation de la flamme

La flamme ne peut se propager que dans des mélanges compris entre certaines limites de composition. Un mélange combustible-comburant est, dans une pièce tempérée et soumise à la pression extérieure, relativement stable. Cependant, si une source de feu augmente ponctuellement la température de manière locale ou cause une haute concentration de formation des radicaux, une réaction explosive va se former puis se propager dans le mélange gazeux. Cela met en évidence des limites appelées les limites d'inflammabilité.

A. Stabilisation de la flamme en régime laminaire

Il existe deux types de critères de stabilisation de la flamme en régime laminaire. Le premier concerne l'habileté du mélange à supporter la flamme de propagation et est intimement lié aux taux de chaque élément du système. Un point peut être atteint pour une limite d'un ratio du mélange donné dans lequel le taux de réaction et la température en résultant libérée ne sont pas suffisants pour contenir la réaction, et par ce fait, la propagation. Le deuxième critère est associé au flux du mélange et sa relation au régime laminaire. Cette limite de stabilité inclut des phénomènes de retour en arrière, de souffle et de début de turbulences de la flamme. Cela décrit le début des limites de la stabilisation de la flamme en régime laminaire lors d'une expérience.

B. Déterminer les limites d'une flamme

Pour déterminer les limites d'inflammabilité expérimentalement, il suffit d'enfermer le mélange dans un réacteur puis d'en provoquer l'allumage à l'aide d'une étincelle suffisamment énergétique. Répéter les essais sur des mélanges de plus en plus riches (ou de plus en plus pauvres) permettra de déterminer ainsi les mélanges pour lesquels la flamme se propage le plus (ou le moins) à travers le réacteur. Le pourcentage de combustible correspondant correspond alors à la limite supérieure (ou inférieure) d'inflammabilité du mélange.

B.2.2 Emission de suie

La flamme est le siège de nombreuses réactions en chimie. On l'utilise alors pour la synthèse de certains produits chimiques. L'obtention de ces derniers requiert une connaissance pointue de la thermodynamique et de la cinétique chimique de la combustion. En effet, certaines espèces chimiques indésirables peuvent apparaître lors de la réaction, tels que les gaz à effet de serre ou des polluants atmosphériques (CH_3OH , CO_2 , ...). Cependant, il apparaît parfois une espèce chimique parfois recherchée, parfois non-désirée : le carbone-suie.

La suie, ou carbone-suie, réfère à une large variété de particules solides. Majoritairement composée de carbone et d'hydrogène, elle peut contenir d'autres éléments présents originellement dans le combustible utilisé au départ. La suie peut être une phase gazeuse homogène, mais peut aussi prendre la forme d'une fine pellicule solide sur une surface autour de la flamme. Cette différence, la plus remarquable concernant les suies, est due à la présence, ou non, d'une surface proche de la suie lorsqu'elle est formée. La présence de vapeur d'eau ou d'une petite quantité d'oxygène favoriserait cependant la suppression de la phase gazeuse au profit du dépôt solide.

La présence de suies s'observe lorsque la flamme, trop riche, ne permet pas une combustion stoechiométrique avec l'oxygène. Le carbone-suie alors formé ne trouve pas l'oxygène nécessaire à sa combustion. Ces flammes-ci présentent une coloration jaune clair qui provient de l'émission d'un spectre continu dû aux fines particules de suie présentes dans les gaz

brûlés.

Du point de vue des applications industrielles, les suies sont recherchées lors de l'utilisation de fours afin d'optimiser les échanges de chaleur avec les parois de ceux-ci. Cependant, elles ne sont pas toujours désirées, notamment à cause de leur caractère polluant et cancérigène lors de leur rejet dans les fumées, mais également dans les cylindres de moteur à explosion, où leur présence empêche le travail mécanique du moteur voulu en y privilégiant les échanges thermiques. Les annexes ne sont pas obligatoire, les annexes présentées ici le sont à titre indicatif.

B.3 Quelques exemples d'application de la combustion

La combustion et les flammes sont, comme dit précédemment, fortement présentes dans l'industrie ainsi que la nature. La première grande catégorie de dispositifs concerne les moteurs, qui doivent propulser divers véhicules (avions, fusées, bateaux, automobiles) grâce à l'énergie thermique que la combustion peut libérer.

- le moteur à piston à allumage commandé (ex. par bougie)

- le moteur Diesel : flamme de diffusion un peu semblable à celle de la bougie

- le statoréacteur : moteur d'avions

- la chambre de combustion des turboréacteurs

- le moteur fusée, qui a pour intérêt : n'utilise pas d'air qui permet d'assurer la propulsion dans l'espace où il n'y en a pas ou peu besoin d'obtenir des performances plus élevées.

Les brûleurs sont des dispositifs utilisant la combustion, et sont utilisés dans les foyers, des fours, ou des chaudières, leur intérêt est de fournir de la chaleur ou de détruire certains produits. Certains exemples :

- brûleurs à gaz

- brûleurs à fuel-oil ; ressemble plus à une flamme de diffusion

- brûleurs qui utilisent comme combustible le charbon (un solide). Très utilisé dans le monde, mais sont maintenant bien plus rares que par le passé en France.

La pollution à l'intérieur et extérieur de systèmes de combustion, tels que les moteurs de voiture, ou les usines d'incinération de déchets est due à l'incapacité de totalement réarranger les molécules du combustible en un produit stable et complet. C'est pourquoi, aujourd'hui plus que jamais, les recherches portant sur le sujet de la combustion sont un élément clé dans notre besoin actuel de pouvoir comprendre et trouver une solution aux problèmes environnementaux que nous subissons. Améliorer la combustion, c'est-à-dire permettre une synthèse totale des combustibles en un produit fiable et viable, permettrait non seulement de réduire les émissions de gaz à effet de serre, mais également d'optimiser la puissance des machines qui dépendent de ce procédé. Ce serait une avancée majeure pour l'économie notamment.

Annexe C

Simulation numérique de flamme

Calcul de concentration

Tableau d'avancement :

	$N_2 +$	$CH_4 +$	$H_2 +$	$O_2 \rightarrow$
état initial	n_{N_2}	n_{CH_4}	n_{H_2}	n_{O_2}
état intermédiaire	$n_{N_2} - \frac{79}{21}(2 - \frac{3}{2}\alpha)\xi_e$	$n_{CH_4} - (1 - \alpha)\xi_e$	$n_{H_2} - \alpha\xi_e$	$n_{O_2} - (2 - \frac{3}{2}\alpha)\xi_e$
état final	$n_{N_2} - \frac{79}{21}(2 - \frac{3}{2}\alpha)\xi_f$	0	0	$n_{O_2} - (2 - \frac{3}{2}\alpha)\xi_f$

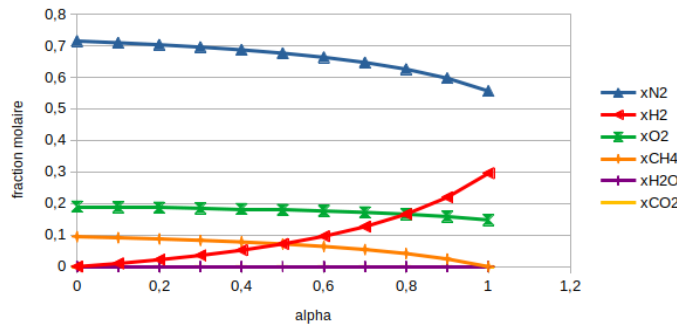
$N_2 +$	$H_2O +$	CO_2
0	0	0
$\frac{79}{21}(2 - \frac{3}{2}\alpha)\xi_e$	$(2 - \alpha)\xi_e$	$(1 - \alpha)\xi_e$
$\frac{79}{21}(2 - \frac{3}{2}\alpha)\xi_f$	$(2 - \alpha)\xi_f$	$(1 - \alpha)\xi_f$

Voici le tableau qui nous a servi à effectuer les calculs de concentration. Nous avons séparé l'état initial de l'état final afin de simplifier la compréhension et la manipulation de ce tableau. Les données écrites en noir correspondent à la quantité de matière en mol tandis que celles à gauche représentent les fractions molaires. Pour le tableau représentant l'état final, nous avons séparé les données liées à la simulation sur fond blanc à celles calculées théoriquement sur fond jaune.

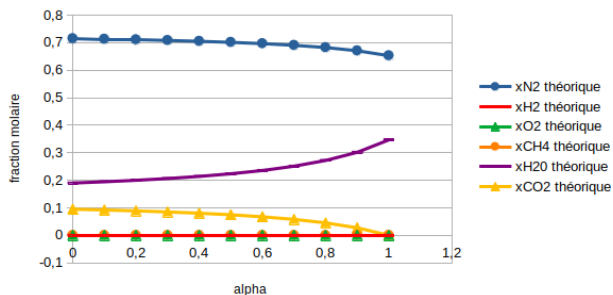
	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L
1	fraction molaire / alpha	0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	1
2												
3	INITIAL :											
4												
5	xN2	0,71493213	0,70946602	0,70314136	0,69573864	0,68695652	0,67636986	0,66335878	0,64698276	0,62574257	0,59709302	0,55633803
6	nN2	7,52380952	6,95952381	6,3952381	5,83095238	5,26666667	4,70238095	4,13809524	3,57380952	3,00952381	2,4452381	1,88095238
7	xH2	5,81E-010	0,01019417	0,02198953	0,03579545	0,05217391	0,07191781	0,09618321	0,12672414	0,16633663	0,21976744	0,29577465
8	nH2	6,11E-009	1,00E-001	2,00E-001	3,00E-001	4,00E-001	5,00E-001	6,00E-001	7,00E-001	8,00E-001	9,00E-001	1,00E+000
9	xO2	0,19004525	0,18859223	0,18691099	0,18494318	0,1826087	0,17979452	0,17633588	0,17198276	0,16633663	0,15872093	0,14788732
10	nO2	2	1,85	1,7	1,55	1,4	1,25	1,1	0,95	0,8	0,65	0,5
11	xCH4	0,09502262	0,09174757	0,08795812	0,08352273	0,07826087	0,07191781	0,06412214	0,05431034	0,04158416	0,0244186	5,24E-016
12	nCH4	1	0,9	0,8	0,7	0,6	0,5	0,4	0,3	0,2	0,1	1,77247E-15
13	xH2O	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
14	nH2O	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
15	xCO2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
16	nCO2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
17												
18	somme xi	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
19	n total	10,5238095	9,80952381	9,0952381	8,38095238	7,66666667	6,95238095	6,23809524	5,52380952	4,80952381	4,0952381	3,38095238
20												
21	avancement	1	1,00000002	1	1	1	1	1	1	1	1	1
22												
23	FINAL :											
24												
25	xN2 théorique	0,71493213	0,71310076	0,71095818	0,7084177	0,70535714	0,70159858	0,69687249	0,69075012	0,6825054	0,6708034	0,65289258
26	xN2 simulation	0,70928426	0,70740597	0,70530436	0,70288476	0,69978479	0,69591647	0,69113678	0,6848427	0,67650768	0,66451613	0,64602717
27	nN2 théorique	7,52E+000	6,96E+000	6,40E+000	5,83E+000	5,27E+000	4,70E+000	4,14E+000	3,57E+000	3,01E+000	2,45E+000	1,88E+000
28	nN2 simulation	7,46437242	6,90394536	6,34438069	5,78541102	5,22509579	4,66429732	4,10403603	3,54324567	2,98307673	2,42231951	1,86117351
29												
30	xH2 théorique	5,80701E-10	0	0	-3,9326E-11	-2,4278E-11	-7,9445E-12	-1,8052E-12	-5,8732E-14	0	-5,4213E-15	0
31	xH2 simulation	0,00363683	0,00379874	0,00397054	0,00418319	0,00451233	0,0049542	0,00552064	0,00637372	0,0076271	0,00988239	0,01465416
32	nH2 théorique	6,11118E-09	0	0	-3,2369E-10	-1,8128E-10	-5,3247E-11	-1,072E-11	-3,0387E-13	0	-1,9762E-14	0
33	nH2 simulation	0,03827332	0,03707391	0,03571599	0,03443167	0,03369205	0,03320491	0,03278208	0,03297643	0,03363187	0,03602367	0,04221793
34												
35	xO2 théorique	6,27222E-12	-4,019E-09	-1,8917E-10	1,05236E-13	-2,5563E-13	3,57895E-13	2,32212E-13	-4,1329E-14	2,72424E-14	5,93908E-15	-5,9925E-15
36	xO2 simulation	0,00546793	0,0055423	0,0056752	0,00580659	0,00596597	0,00593364	0,00605575	0,00616801	0,00635235	0,00643982	0,00621165
37	nO2 théorique	6,60076E-11	-3,9223E-08	-1,7016E-09	8,66196E-13	-1,9087E-12	2,39875E-12	1,3789E-12	-2,1383E-13	1,20126E-13	2,16493E-14	-1,7264E-14
38	nO2 simulation	0,05754347	0,05409022	0,05104975	0,04779377	0,04379924	0,03976951	0,03595962	0,03191213	0,02801085	0,02347469	0,01789547
39												
40	xCH4 théorique	0	-1,9564E-09	-8,9074E-11	0	0	0	0	0	-4,4961E-14	0	6,15236E-16
41	xCH4 simulation	2,13E-017	2,30E-017	2,45E-017	2,64E-017	3,03E-017	3,57E-017	4,22E-017	5,26E-017	6,49E-017	7,76E-017	-8,61E-029
42	nCH4 théorique	0	-1,9093E-08	-8,0124E-10	0	0	0	0	0	-1,9826E-13	0	1,77247E-15
43	nCH4 simulation	2,24E-016	2,24E-016	2,20E-016	2,17E-016	2,26E-016	2,39E-016	2,51E-016	2,72E-016	2,86E-016	2,83E-016	-2,48E-028
44												
45	xH2O théorique	0,19004525	0,19468163	0,20010588	0,20653746	0,21428571	0,22380107	0,23576584	0,25126553	0,27213823	0,30176355	0,34710744
46	xH2O simulation	0,18353742	0,18784817	0,19274502	0,19844819	0,20555335	0,21431085	0,2251705	0,23923989	0,257831	0,28394258	0,32277126
47	nH2O théorique	2	1,90000004	1,8	1,7	1,6	1,5	1,4	1,3	1,2	1,1	1
48	nH2O simulation	1,93151289	1,83330867	1,73378737	1,63341758	1,53479832	1,43639299	1,33708387	1,23778162	1,13691194	1,03503833	0,92988864
49												
50	xCO2 théorique	0,09502262	0,09221762	0,08893595	0,08504484	0,08035714	0,07460036	0,06736167	0,05798435	0,04535637	0,02743305	0
51	xCO2 simulation	0,0850826	0,08236676	0,07925678	0,07562227	0,07113442	0,06562782	0,05881835	0,05004869	0,03853555	0,02266585	-1,03E-014
52	nCO2 théorique	1	0,90000002	0,8	0,7	0,6	0,5	0,4	0,3	0,2	0,1	0
53	nCO2 simulation	0,89539311	0,80386033	0,71293363	0,62244334	0,53113701	0,43986264	0,34926894	0,25894241	0,16992343	0,08262244	-2,9777E-14
54												
55	somme xi théorique	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
56	somme xi simulation	0,98700905	0,98696193	0,98695191	0,98694501	0,98685086	0,98674298	0,98670202	0,98667302	0,98685369	0,98744679	0,98966424
57	somme n théorique	10,5238095	9,75952381	8,9952381	8,23095238	7,46666667	6,70238095	5,93809524	5,17380952	4,40952381	3,6452381	2,88095238

Afin de mieux visualiser les espèces en présence dans chaque état, nous avons commencé par tracer des courbes représentant les états initiaux et finaux des transformations.

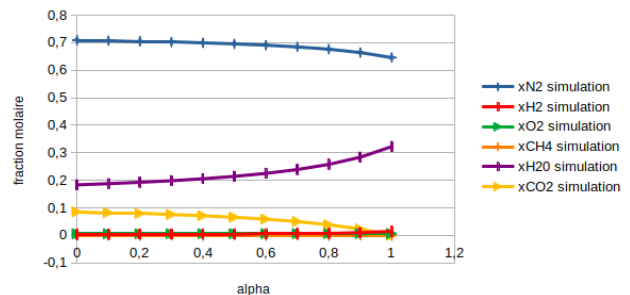
Fractions molaires à l'état initial



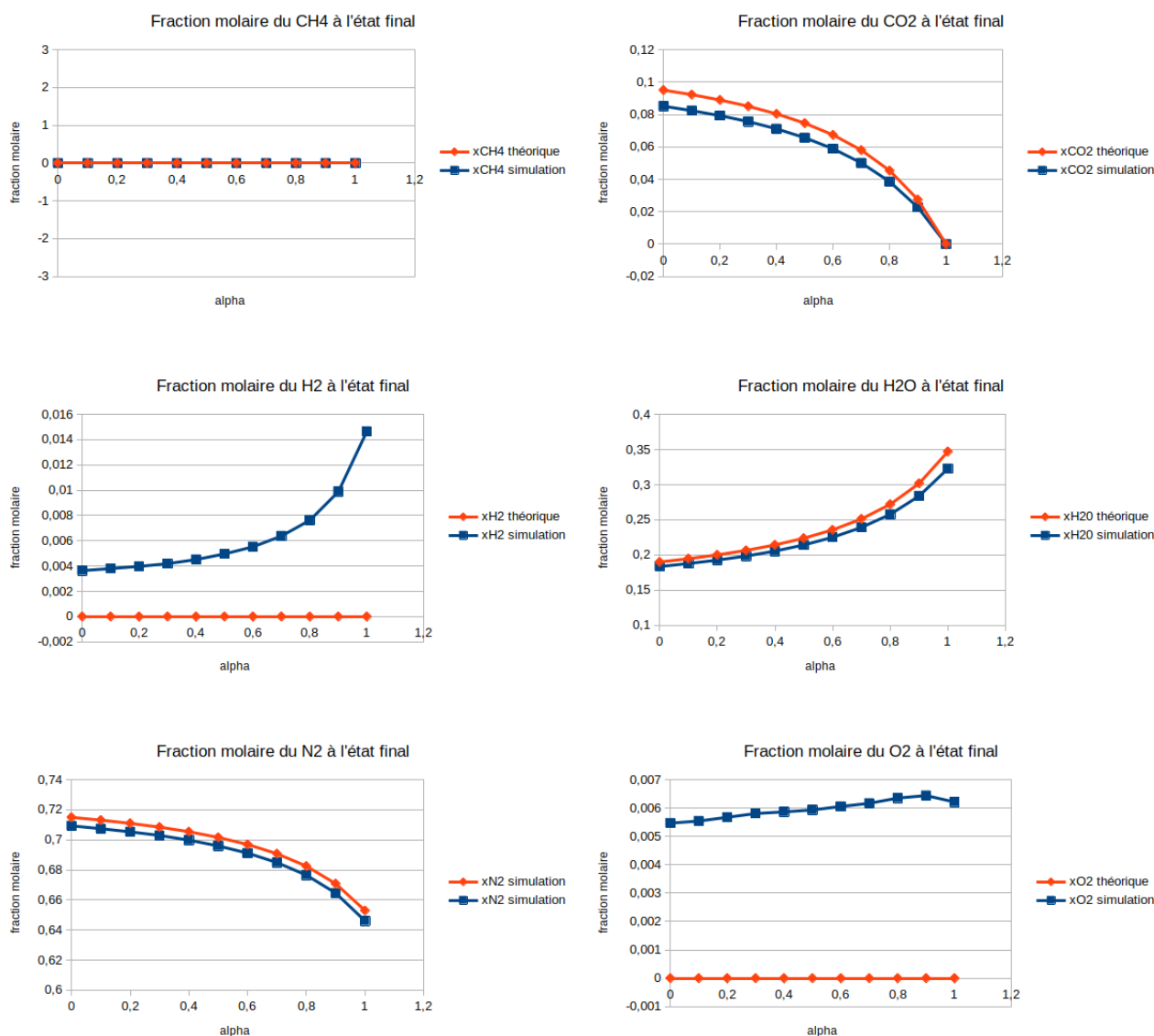
Fractions molaires à l'état final obtenues avec les calculs théoriques



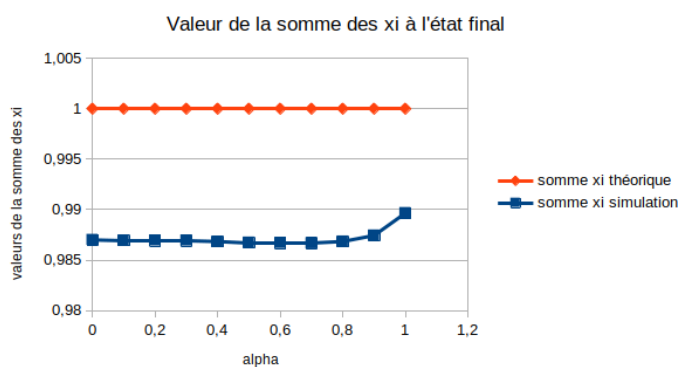
Fractions molaires à l'état final obtenues avec la simulation

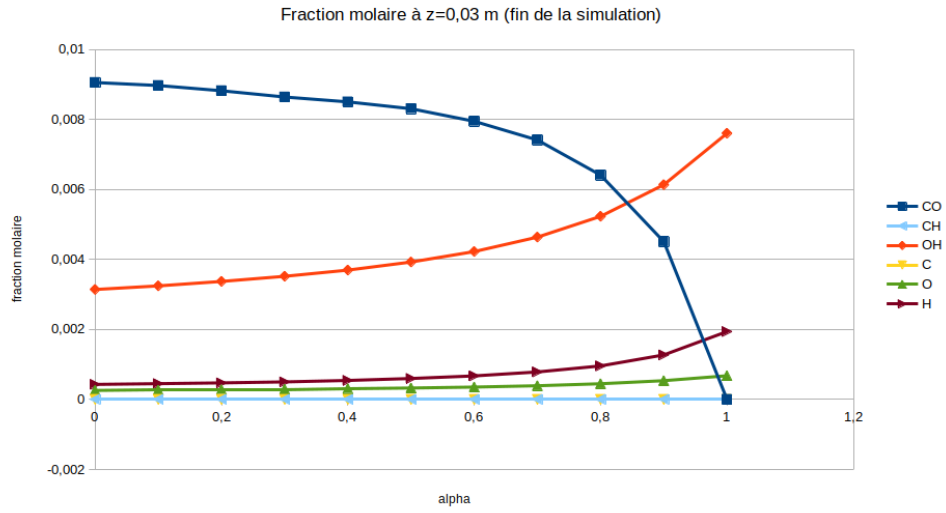


Enfin, grâce aux données calculées, nous avons pu comparer les valeurs trouvées théoriquement à celles fournies par la simulation. Nous pouvons constater que les valeurs trouvées par les deux voies sont assez proches.



On voit bien que pour certaines espèces chimiques il y a une légère différence entre les résultats théoriques et ceux obtenus par la simulation qui est due au fait que celle-ci ne va pas jusqu'à la fin de la flamme. En effet, on voit bien lorsqu'on regarde la quantité de matière restante à la fin de la simulation pour les espèces intermédiaires, qu'elle n'est pas nulle.



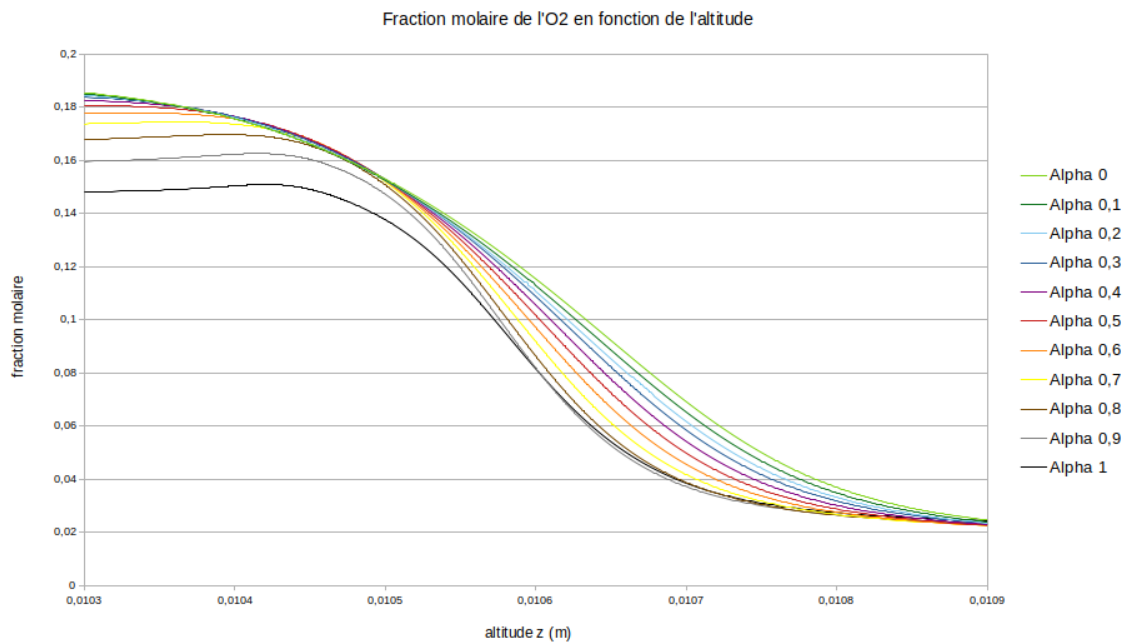
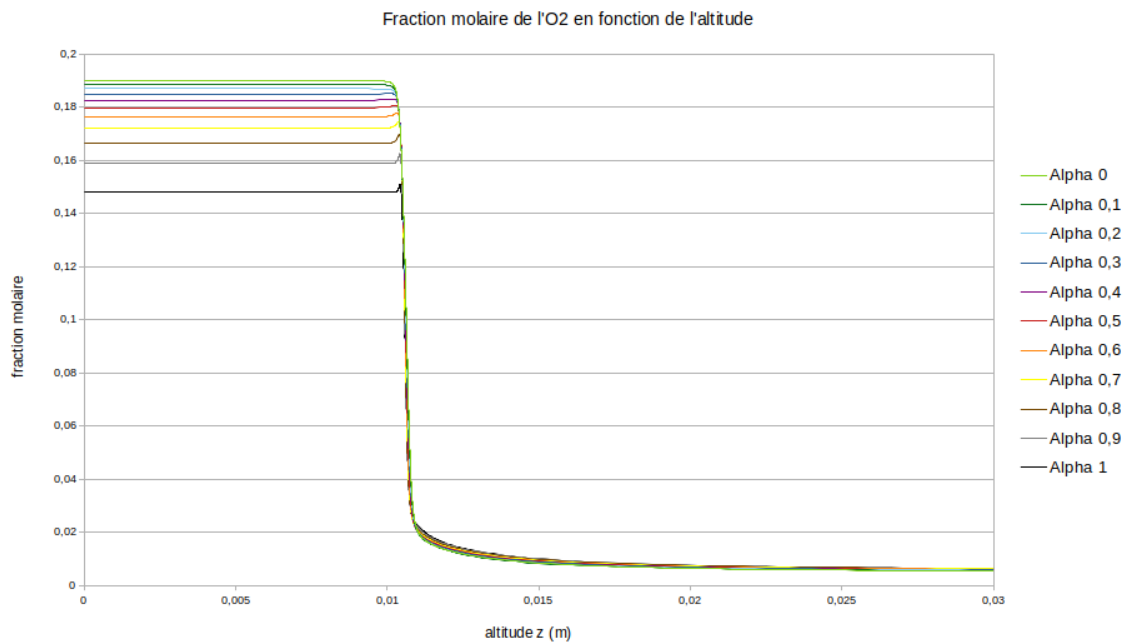


Mécanisme général du front de flamme

Pour chaque espèce chimique, nous avons cherché à voir l'évolution de sa fraction molaire en fonction de la valeur de α .

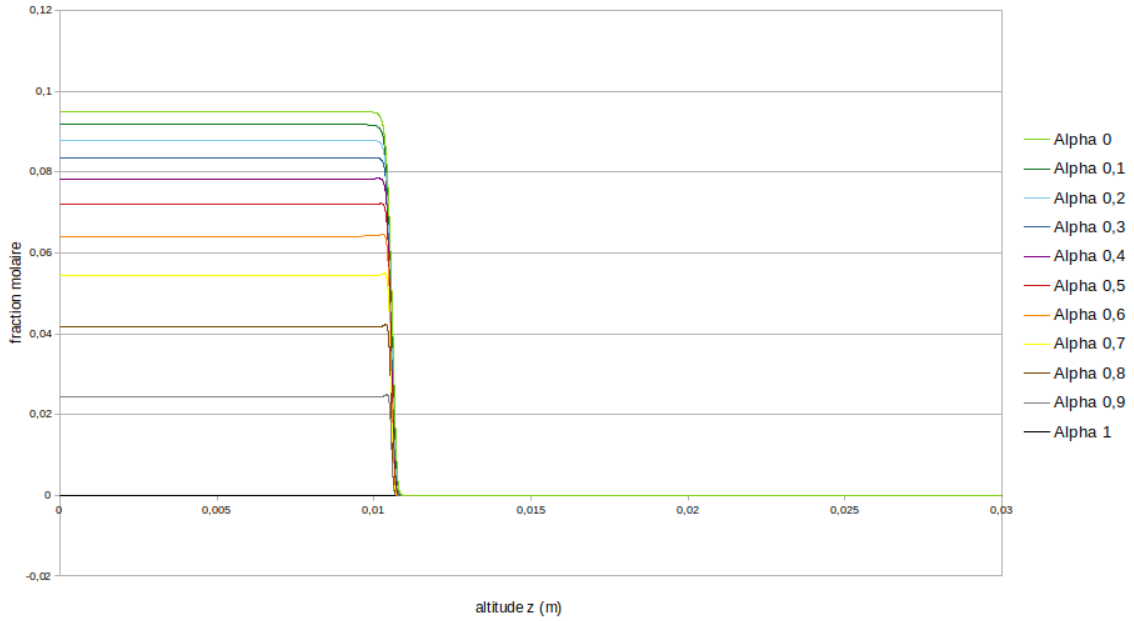
Réactifs de la réaction

O_2

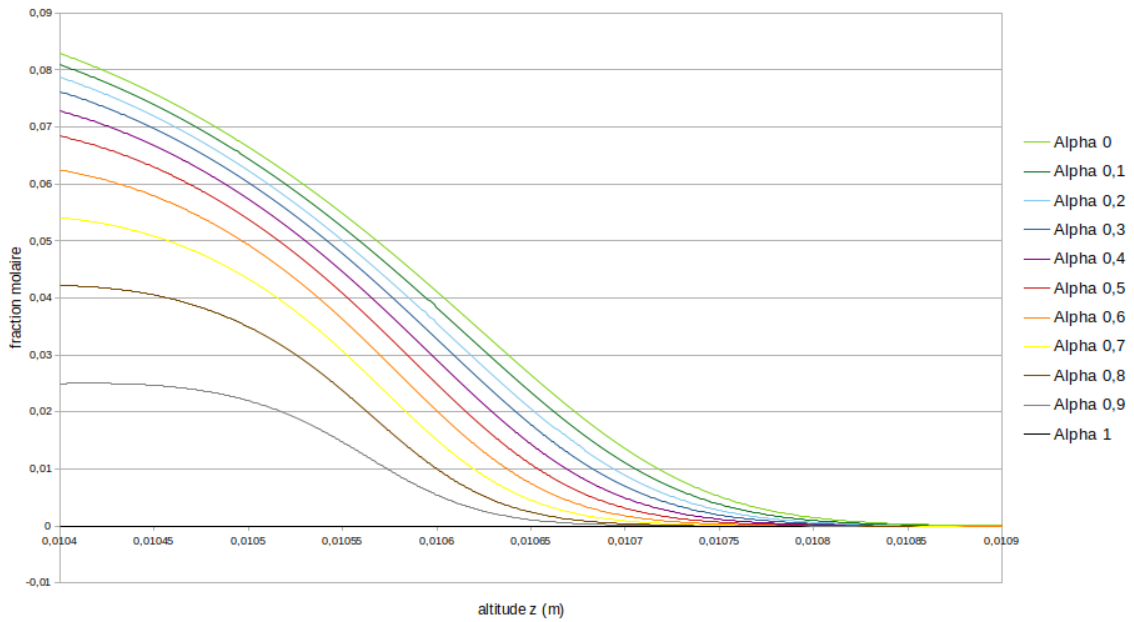


CH₄

Fraction molaire de CH4 en fonction de l'altitude

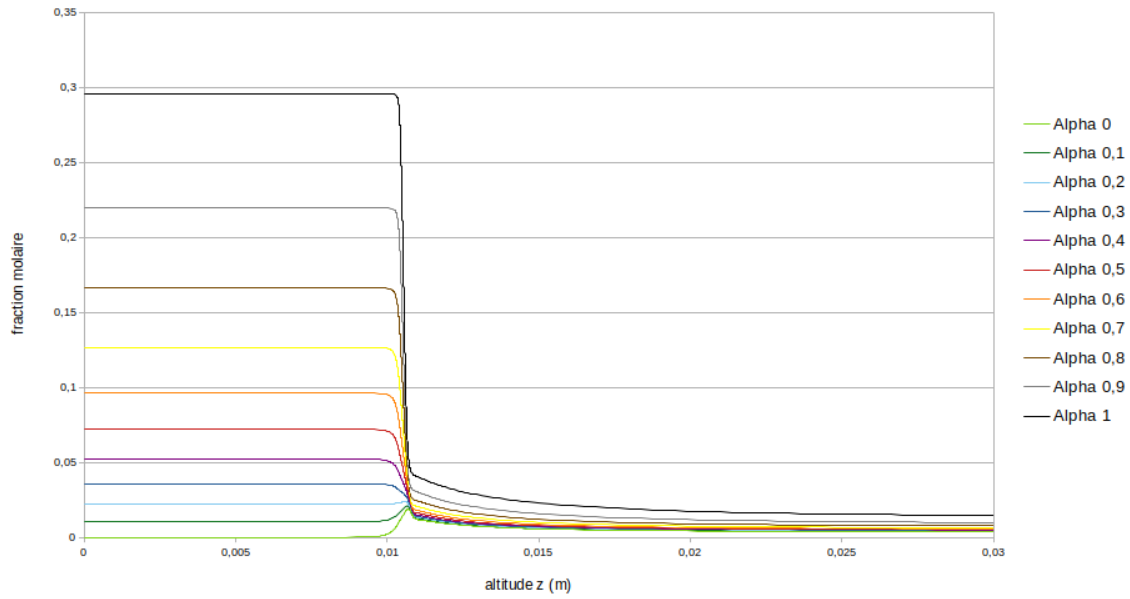


Fraction molaire de CH4 en fonction de l'altitude

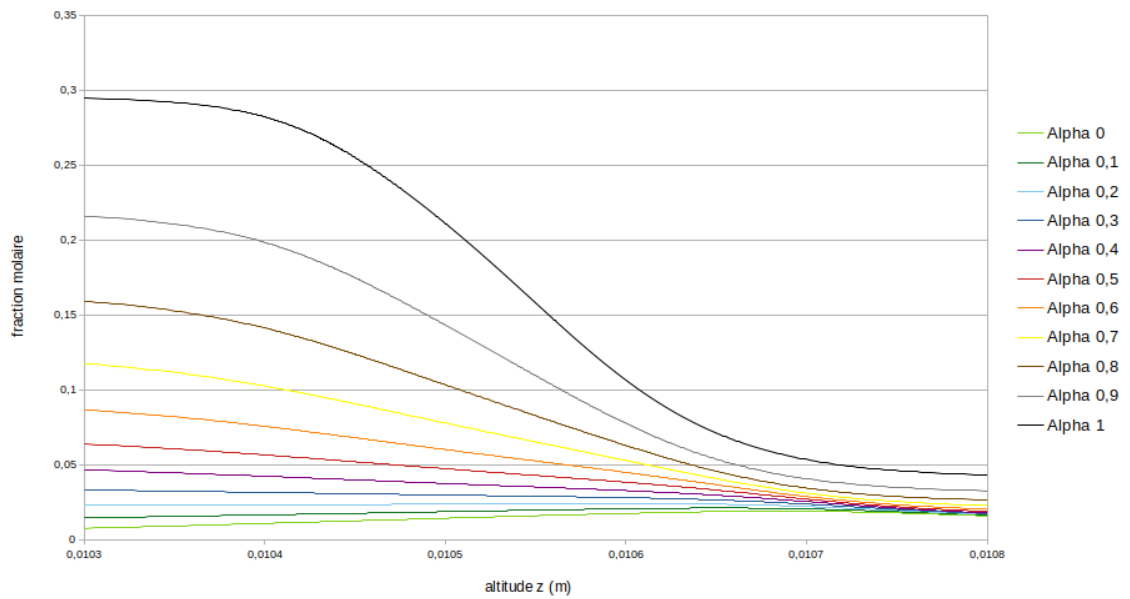


H₂

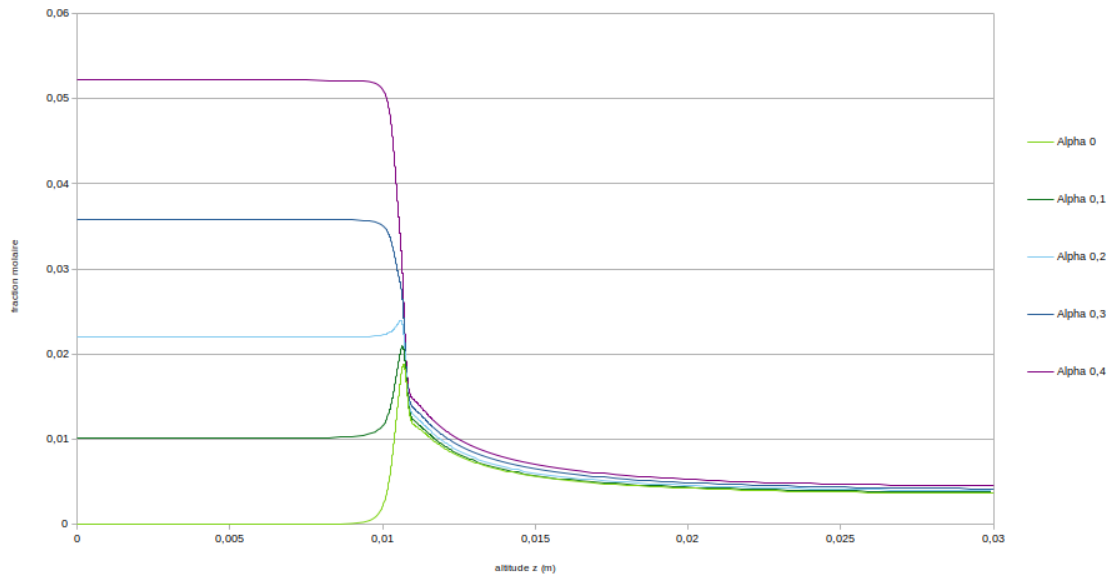
Fraction molaire du H2 en fonction de l'altitude



Fraction molaire du H2 en fonction de l'altitude



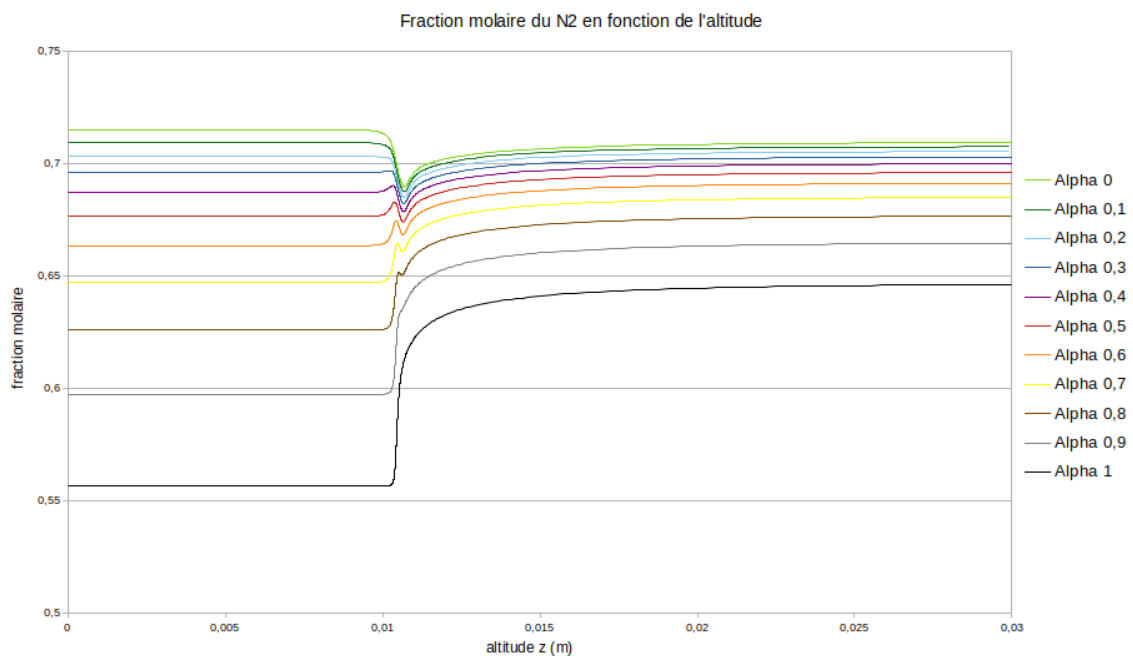
Evolution de la fraction molaire de l'H2 en fonction de l'altitude



On remarque ici que l'hydrogène est à la fois réactif et espèce intermédiaire de la réaction et l'équilibre parfait entre les deux états se situe entre $\alpha = 0, 20$ et $\alpha = 0, 25$.

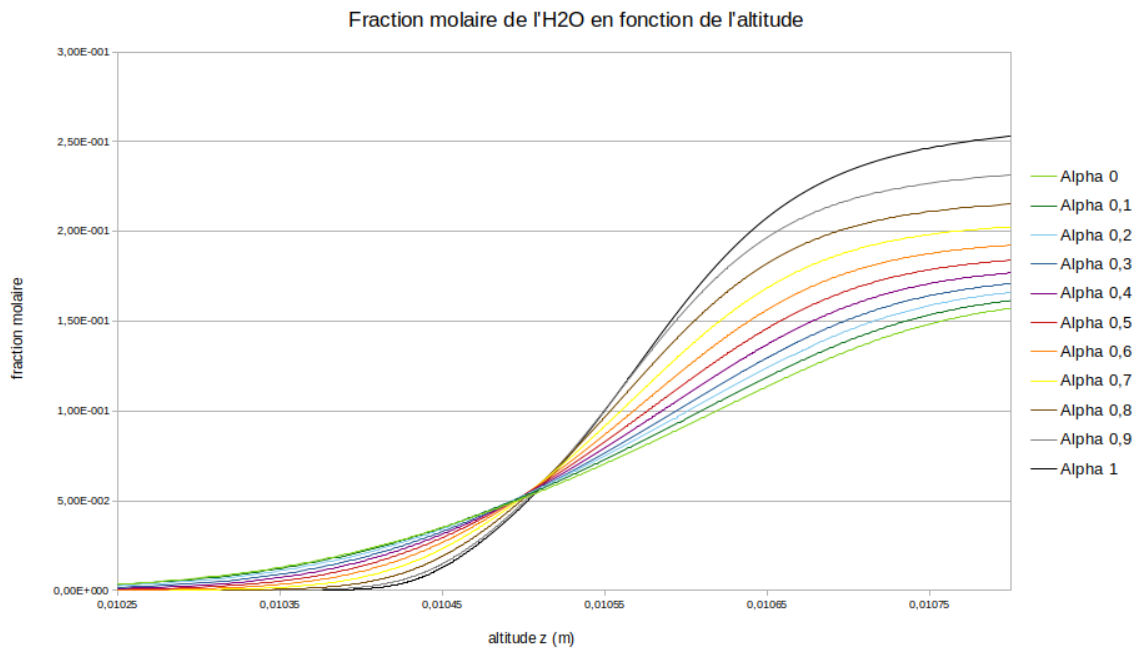
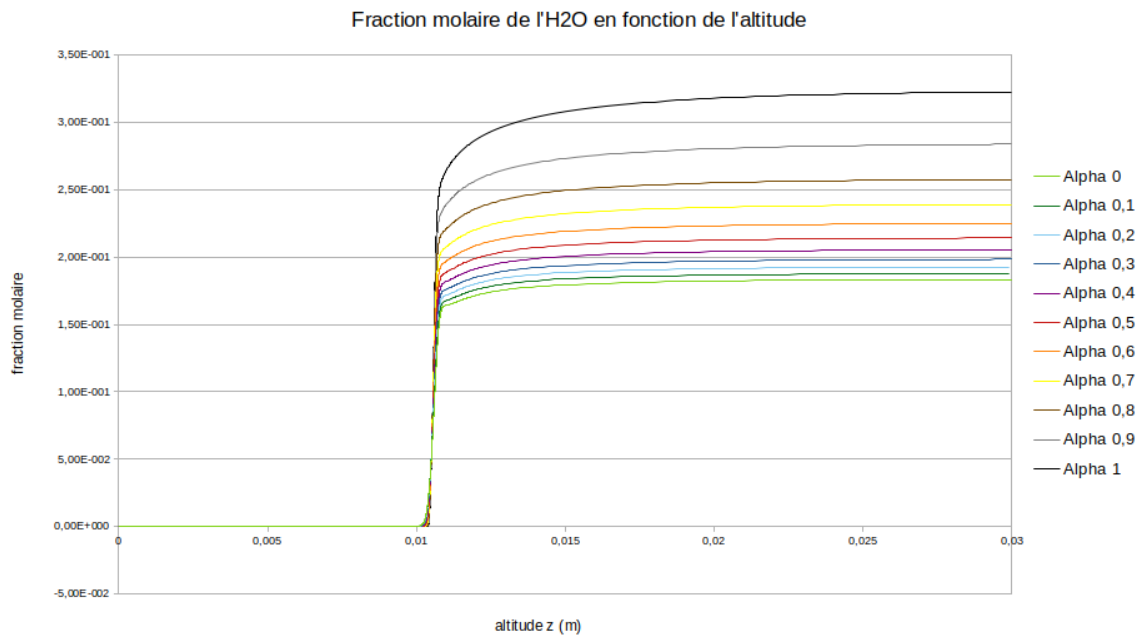
Espèce spectatrice

N₂



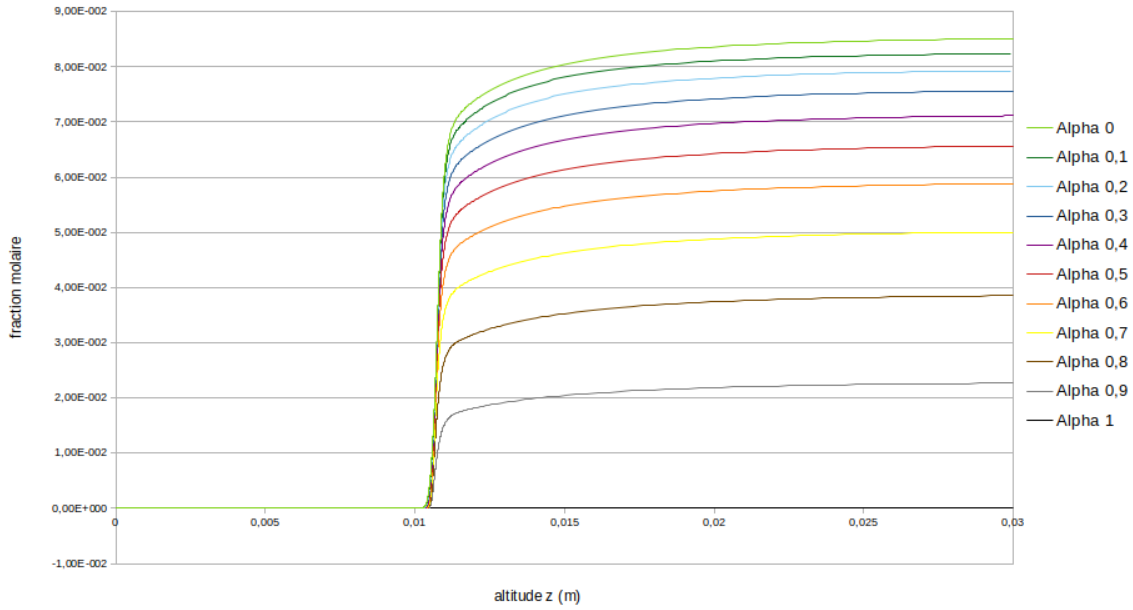
Produits de la réaction

H₂O

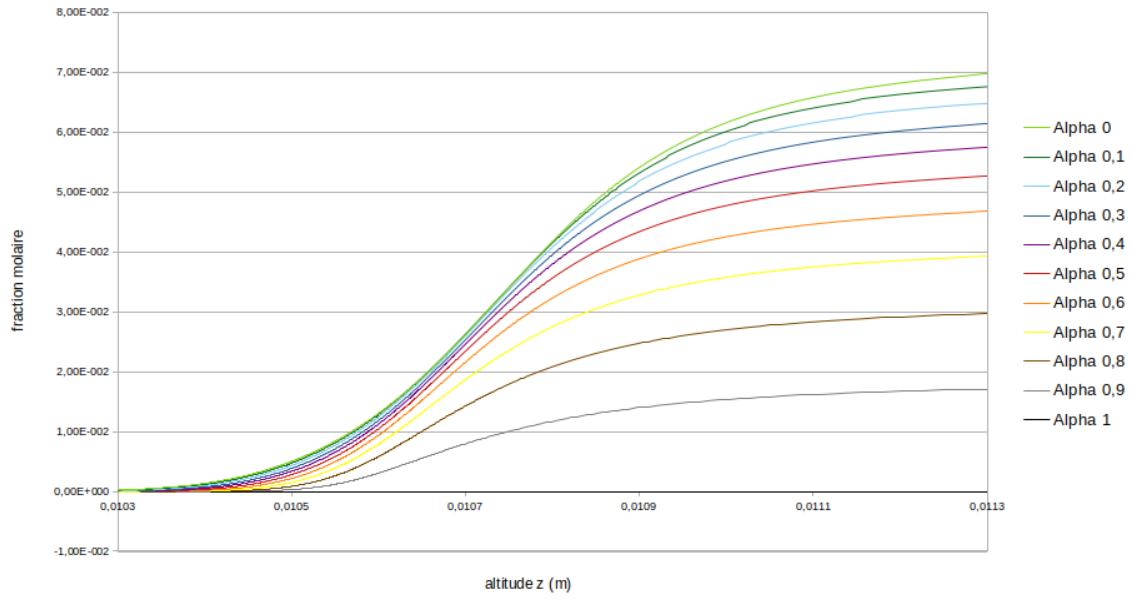


CO₂

Fraction molaire du CO₂ en fonction de l'altitude



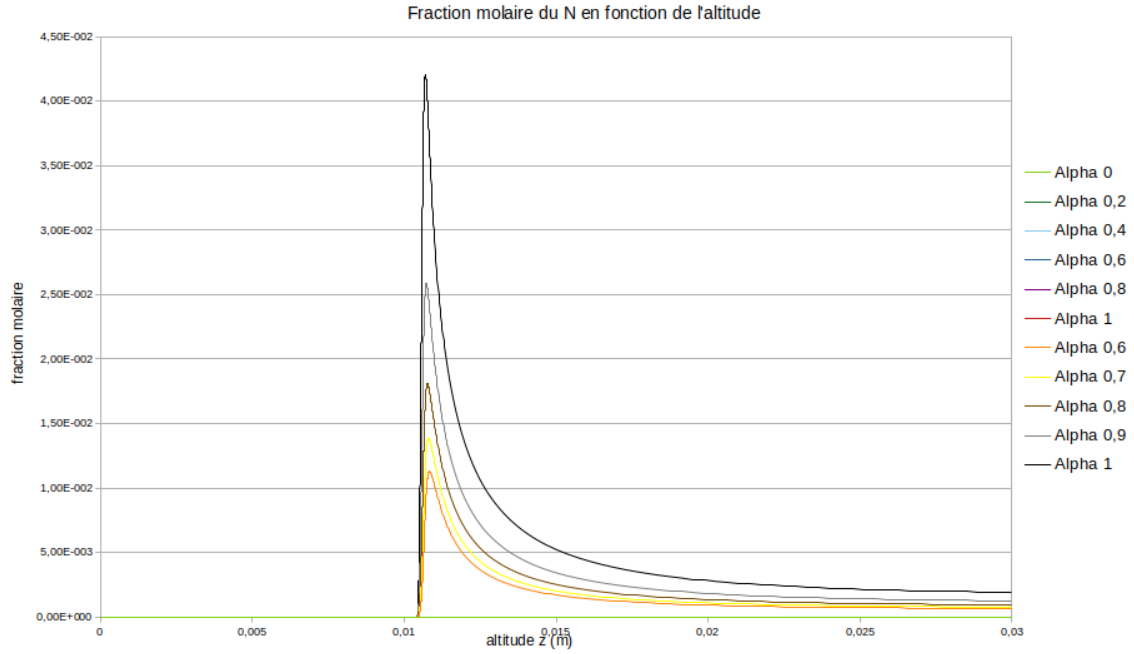
Fraction molaire du CO₂ en fonction de l'altitude



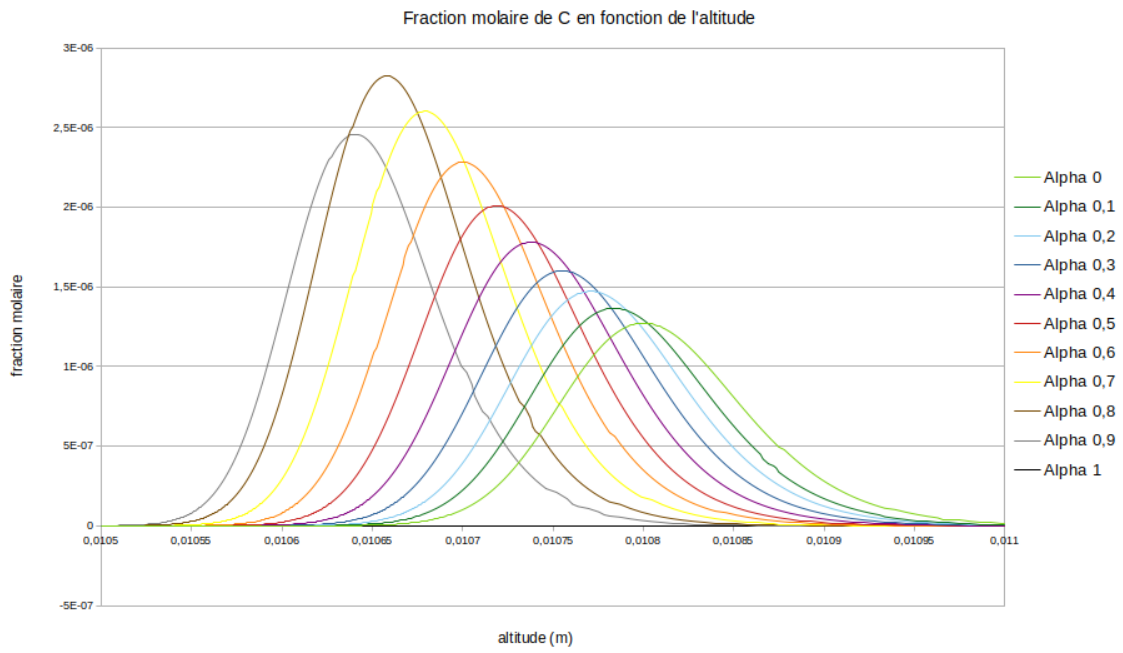
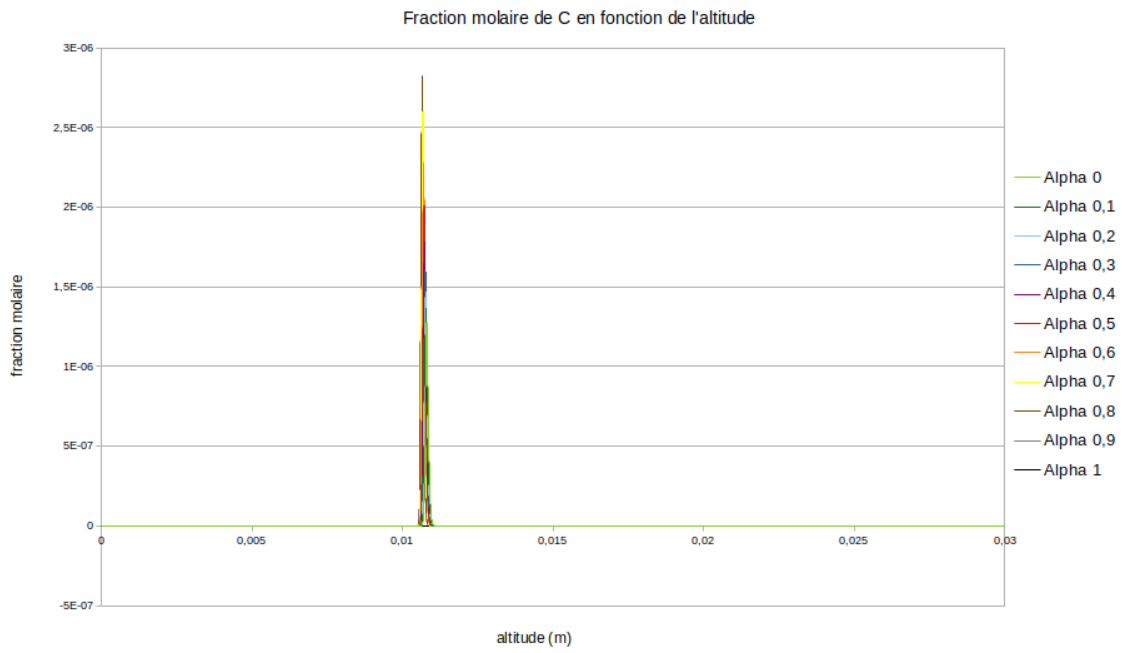
Intermédiaires réactionnels

Atomes

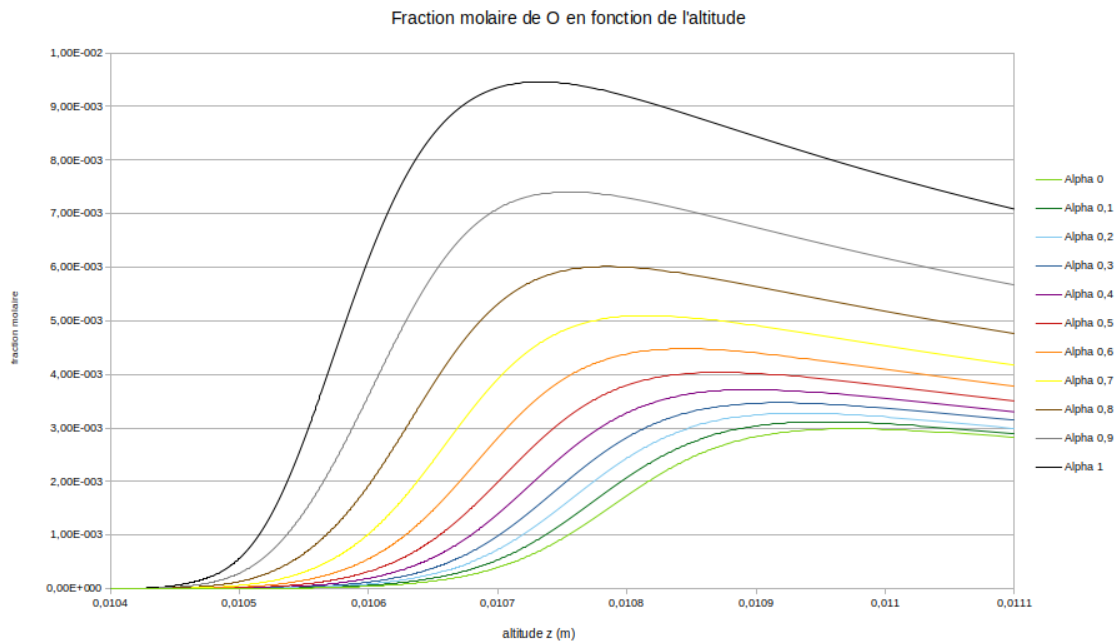
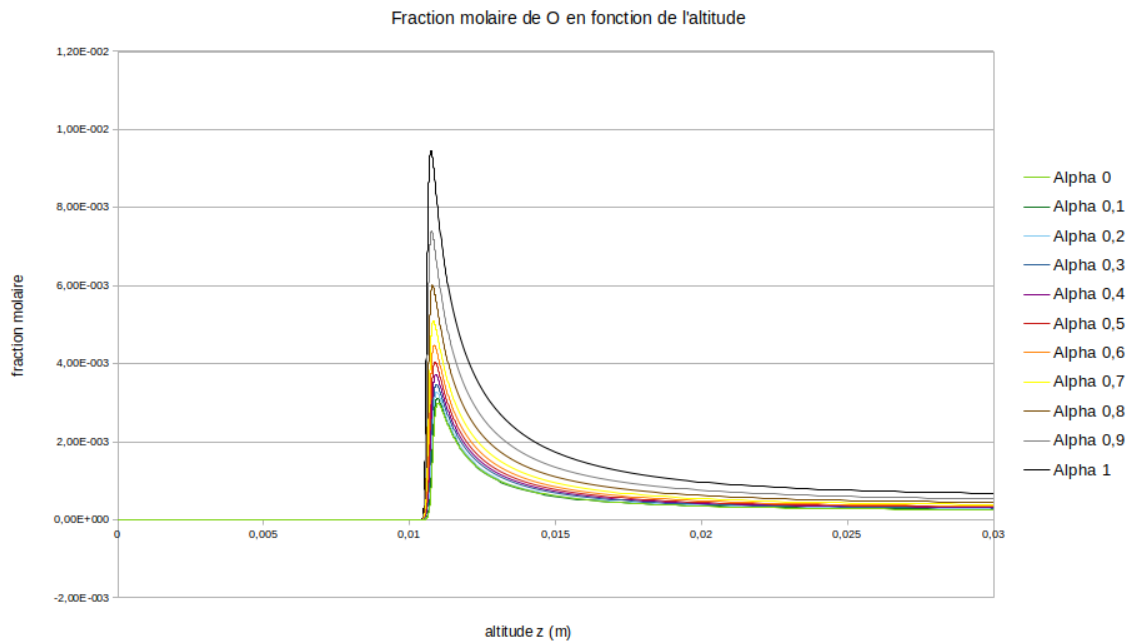
N



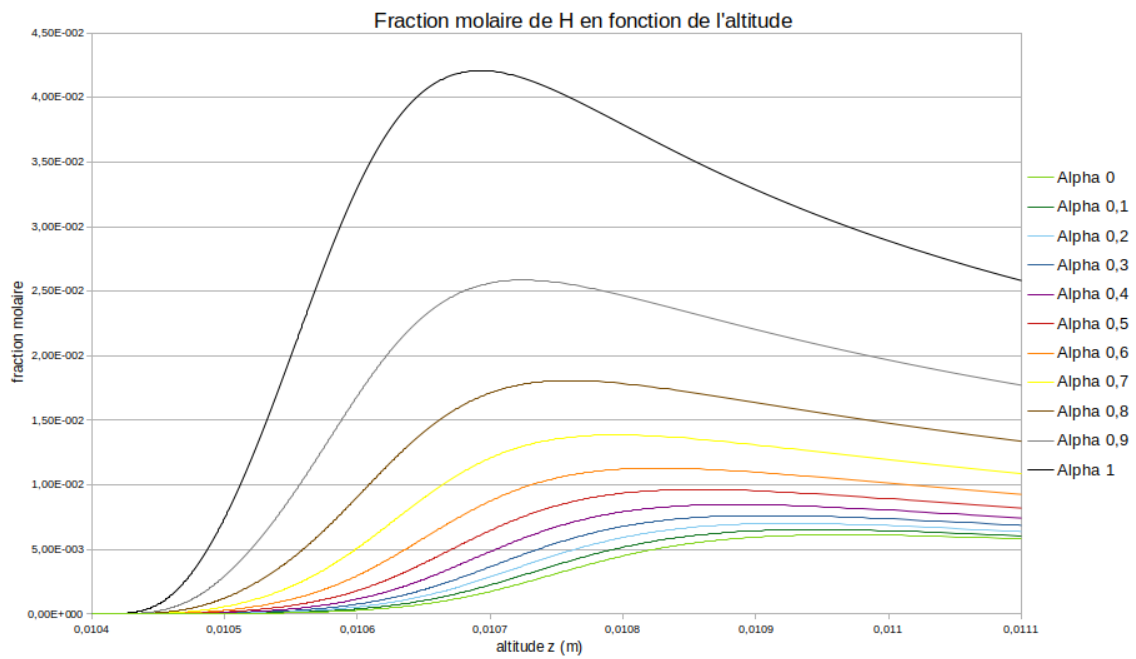
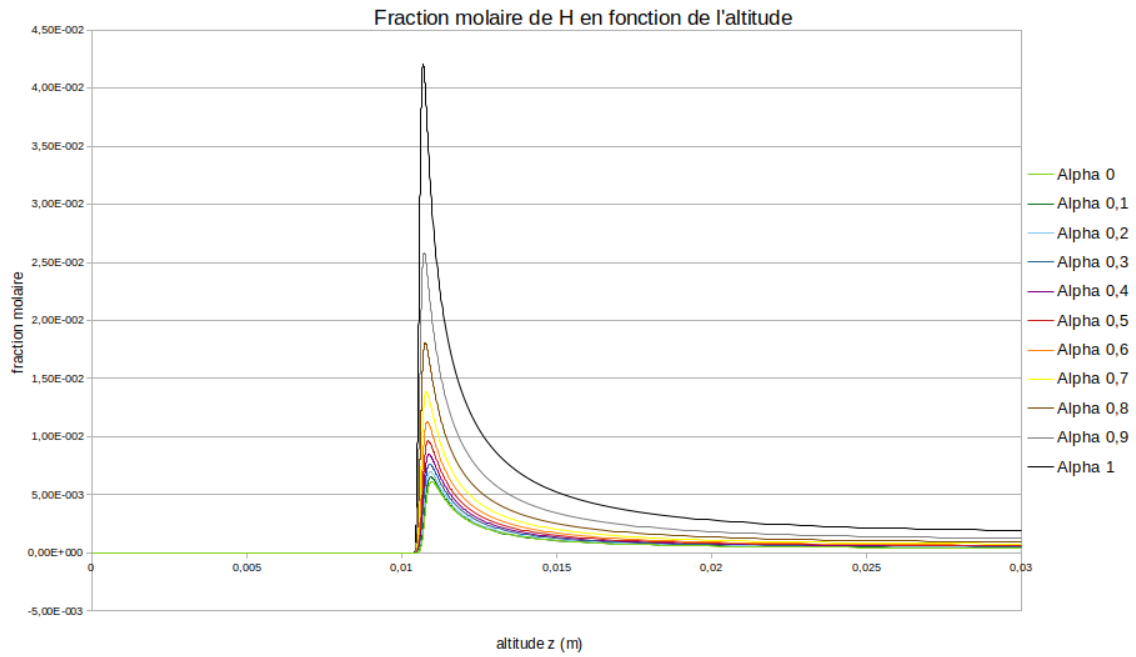
C



O

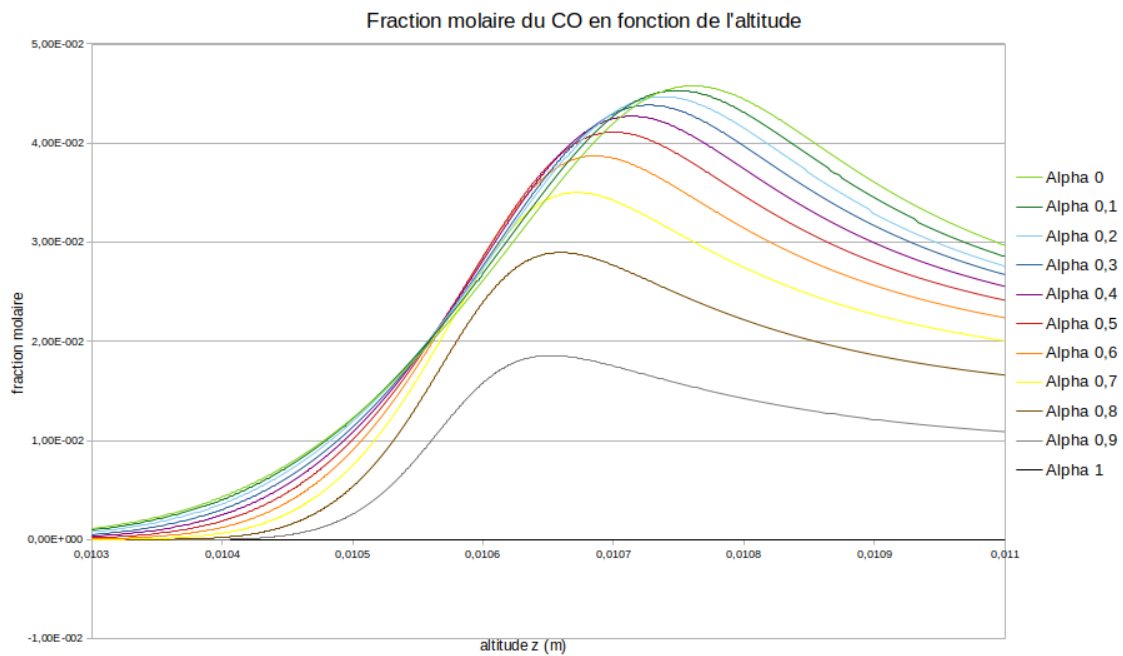
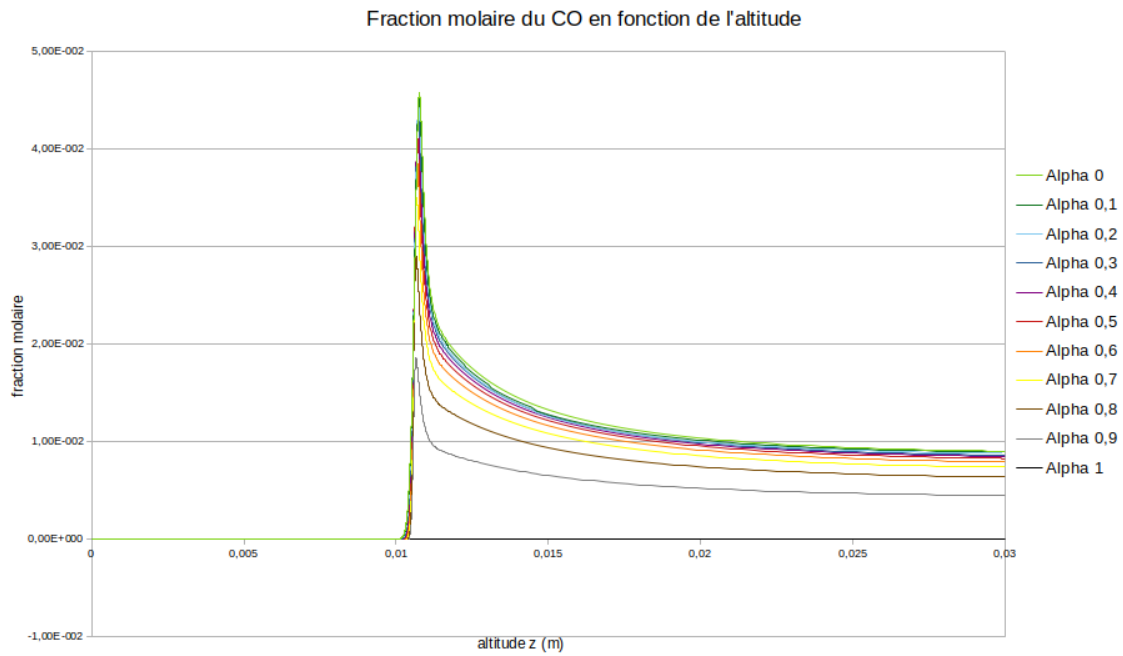


H

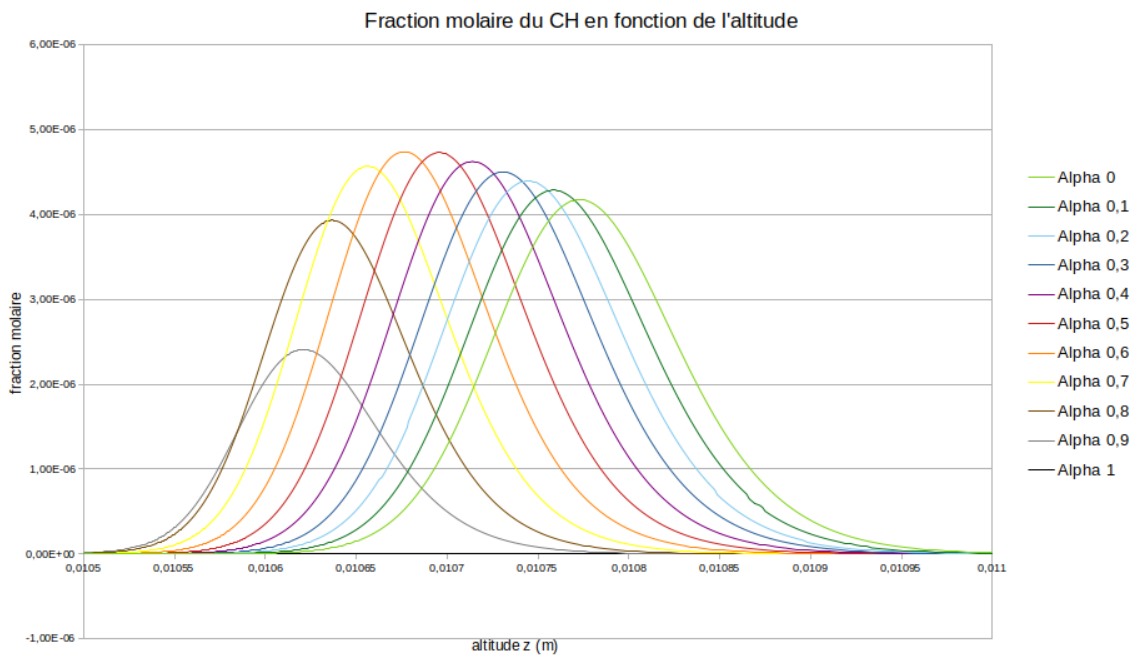
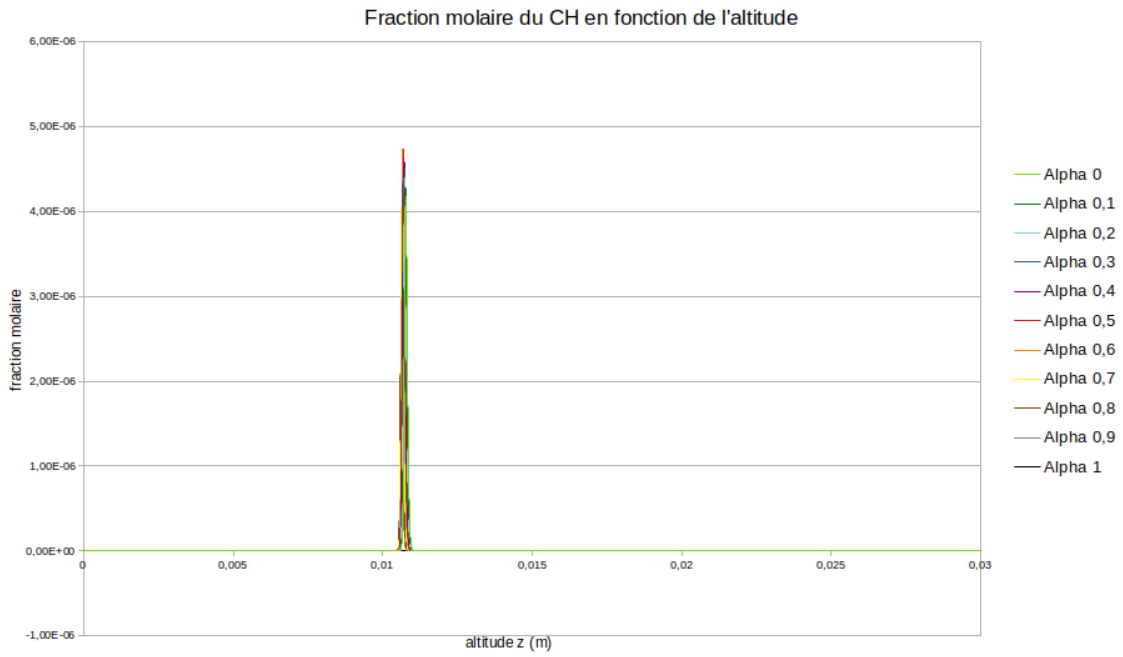


Molécules

CO

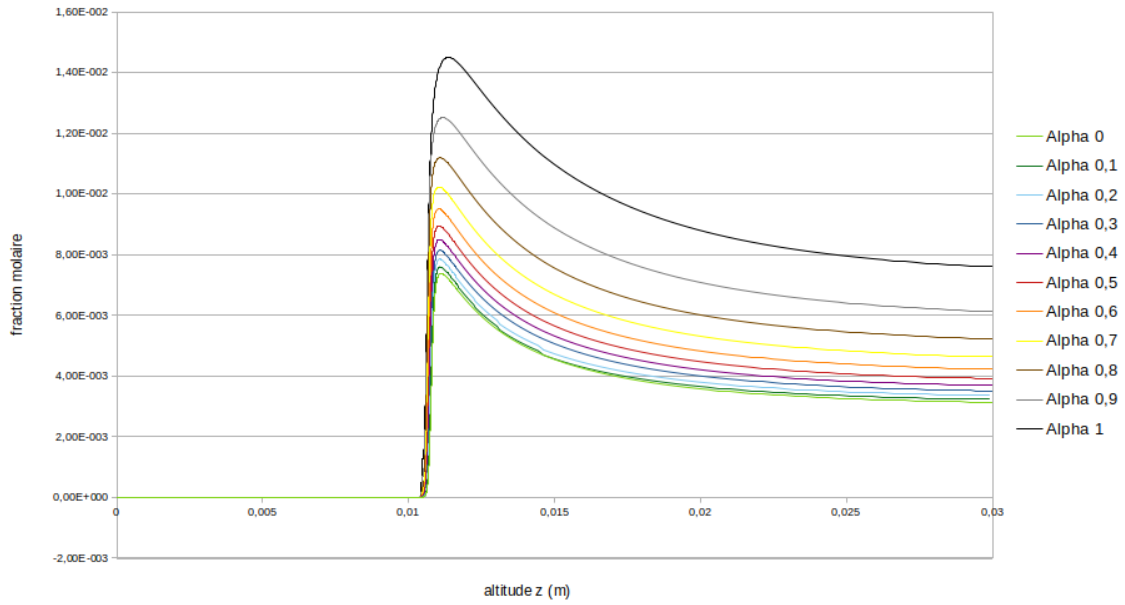


CH

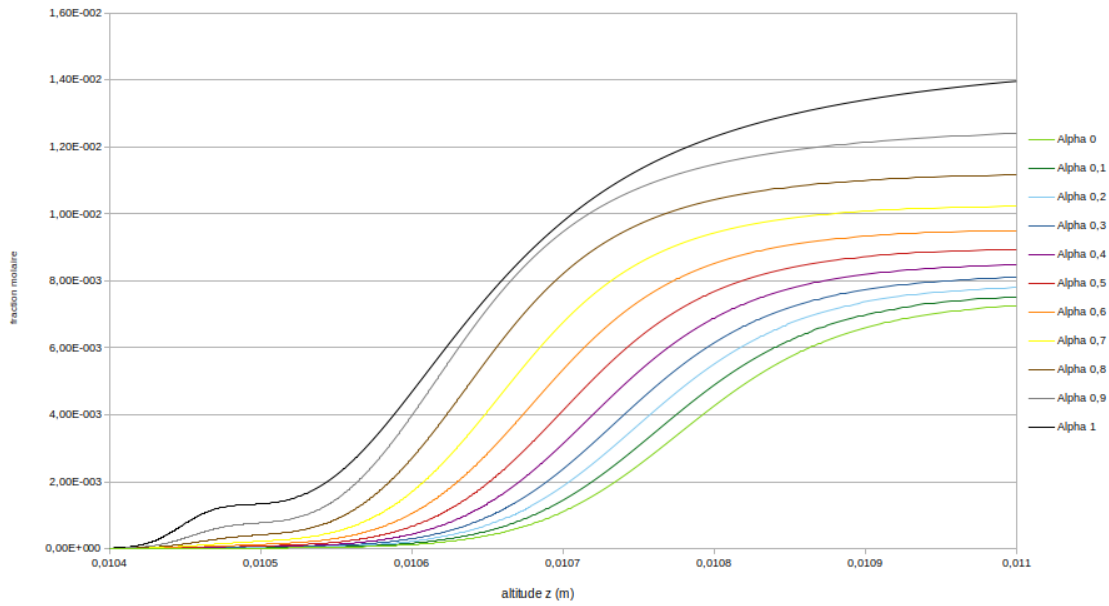


OH

Fraction molaire de OH en fonction de l'altitude

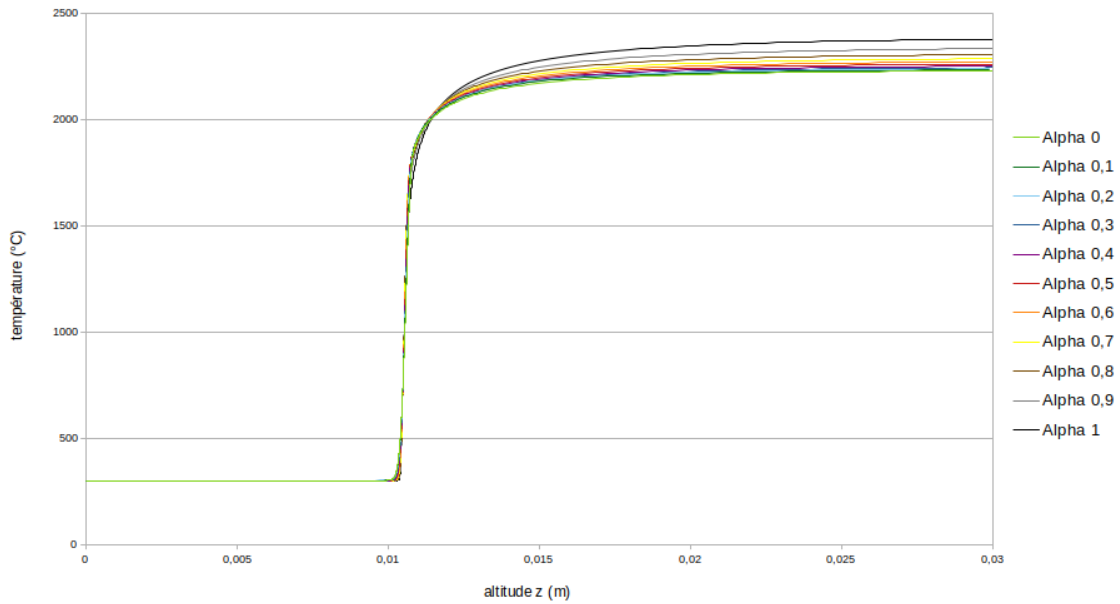


Fraction molaire de OH en fonction de l'altitude

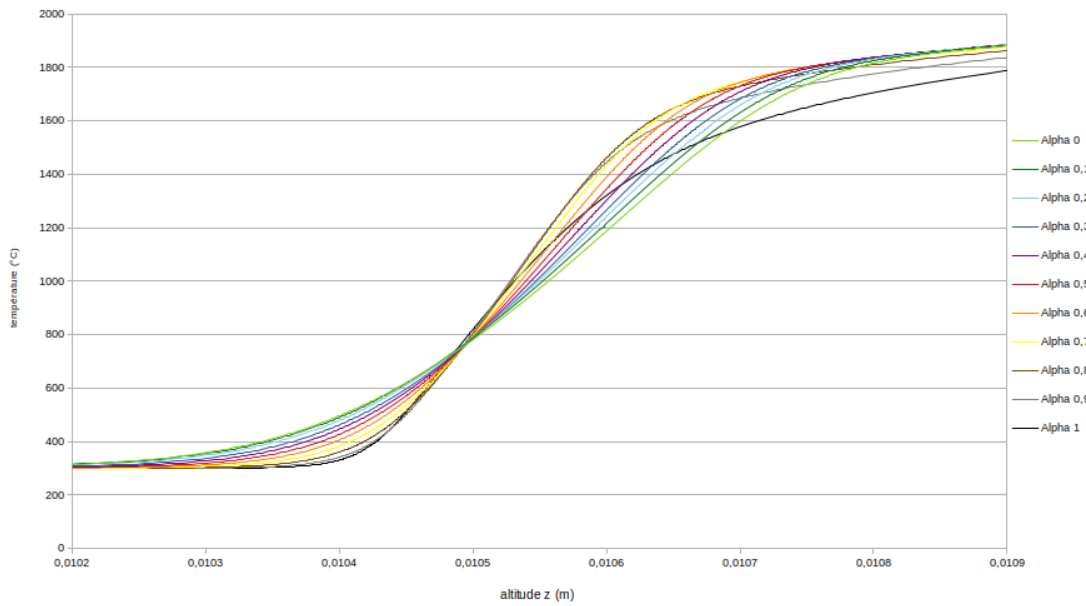


Température

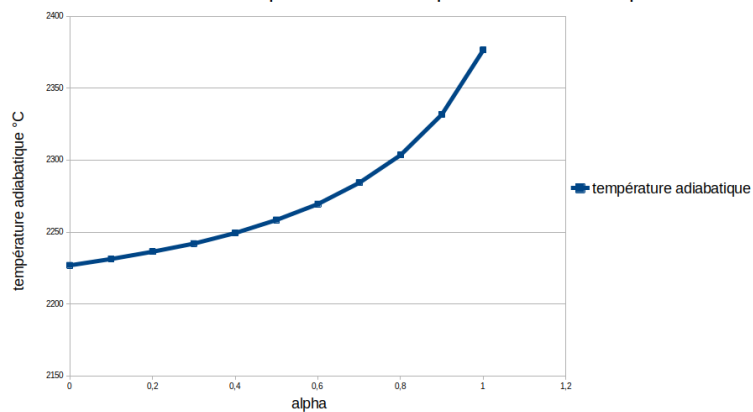
Evolution de la température en fonction de l'altitude



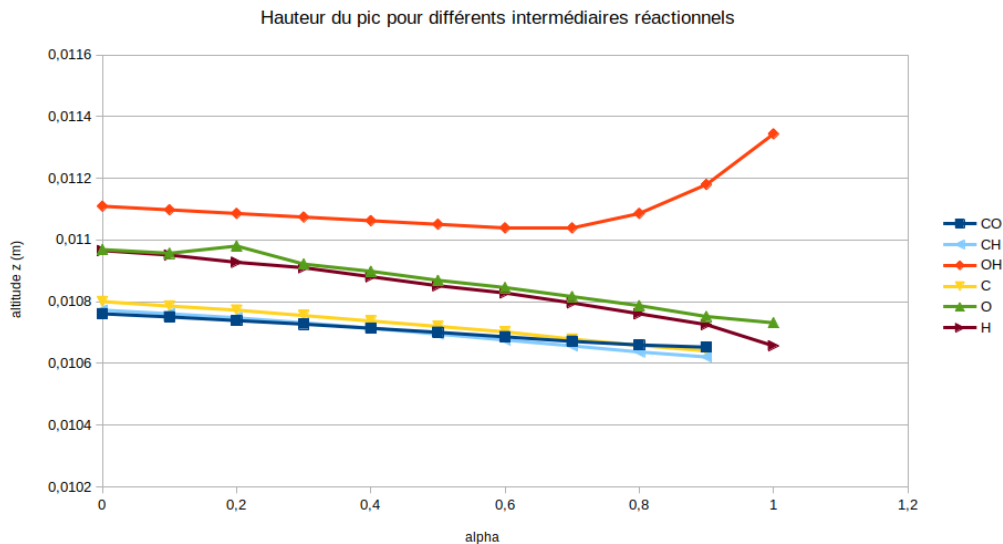
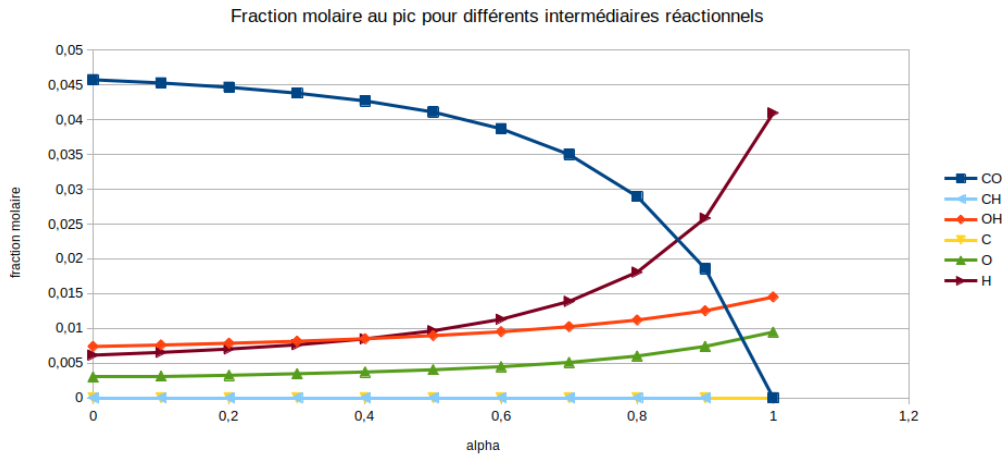
Evolution de la température en fonction de l'altitude



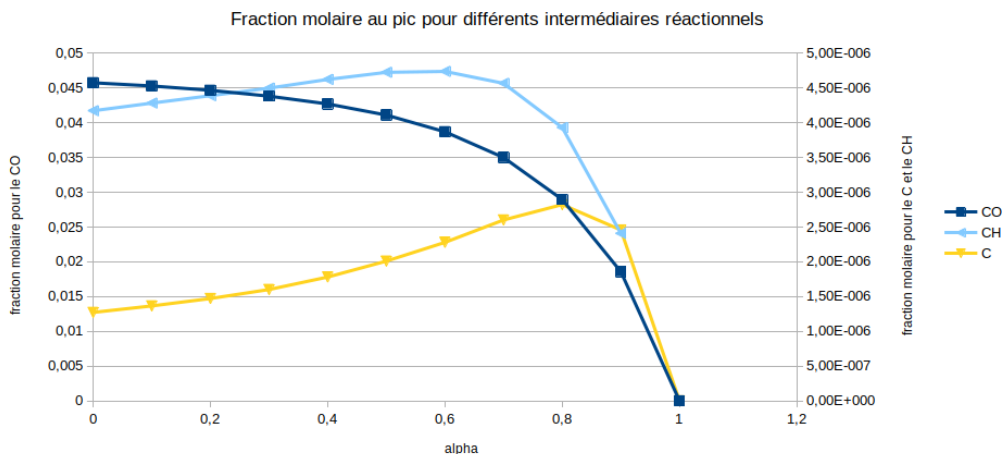
Evolution de la température adiabatique en fonction de alpha



Etude des pics de fraction molaire des espèces intermédiaires



On voit bien ici le décalage du front de flamme car on peut remarquer que lorsque la valeur de α augmente la hauteur du pic des espèces intermédiaires diminuent. On a donc un décalage du front de flamme vers le bas quand la valeur de α augmente ce qui s'explique par l'augmentation de la température adiabatique quand la valeur de α augmente.

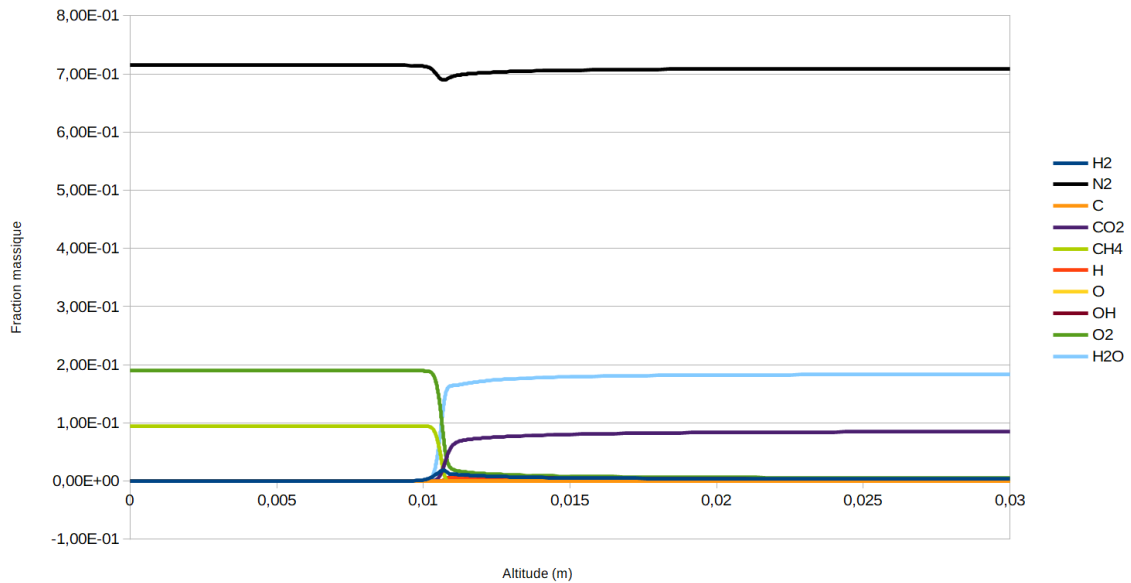


On peut remarquer que l'apparition de ces espèces intermédiaires n'est pas linéaire en fonction de la valeur de α . Le plus souvent on voit l'apparition d'une croissance exponentielle

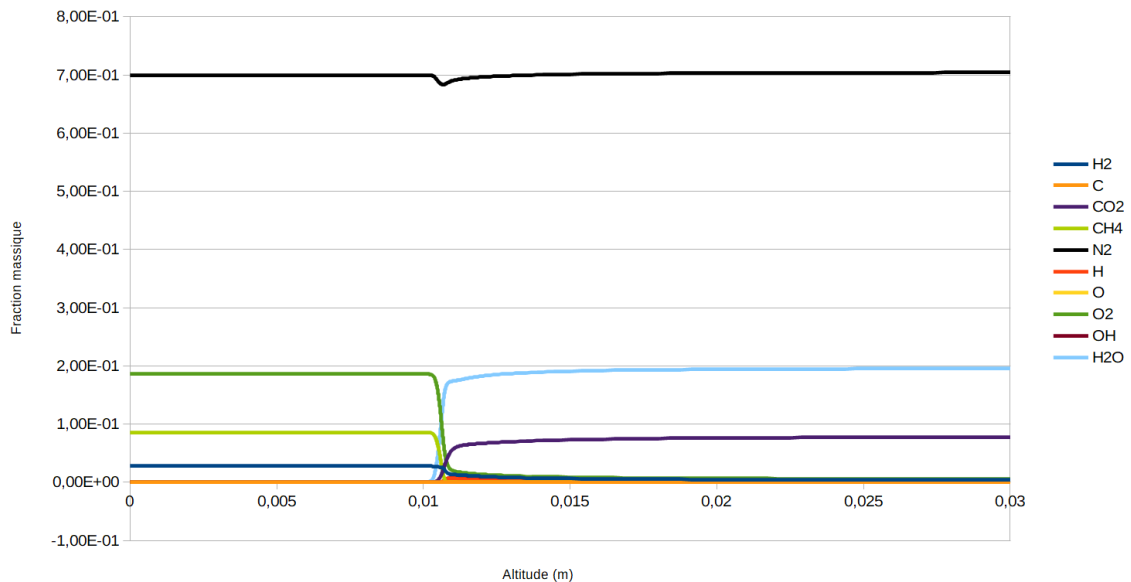
Evolution du front de flamme général selon la valeur de α

Pour toutes les espèces chimiques, nous avons cherché à voir l'évolution de leur fraction molaire en fonction de l'altitude pour une même valeur de α , et ce, pour plusieurs valeurs de α :

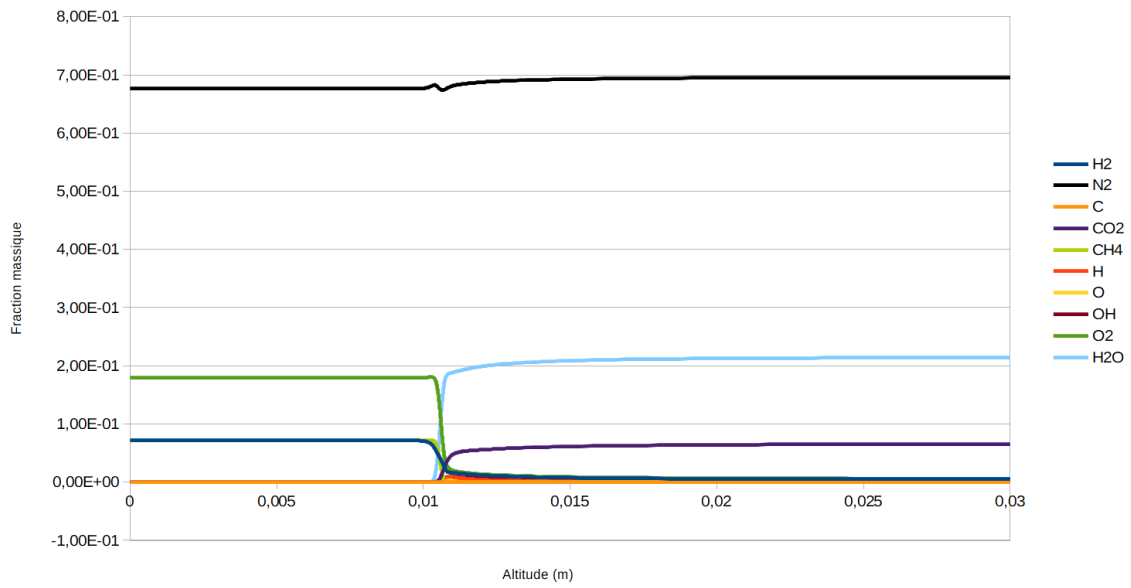
Graphique représentant les fractions massiques des différentes espèces présentes lors de la combustion en fonction de l'altitude pour $\alpha=0$



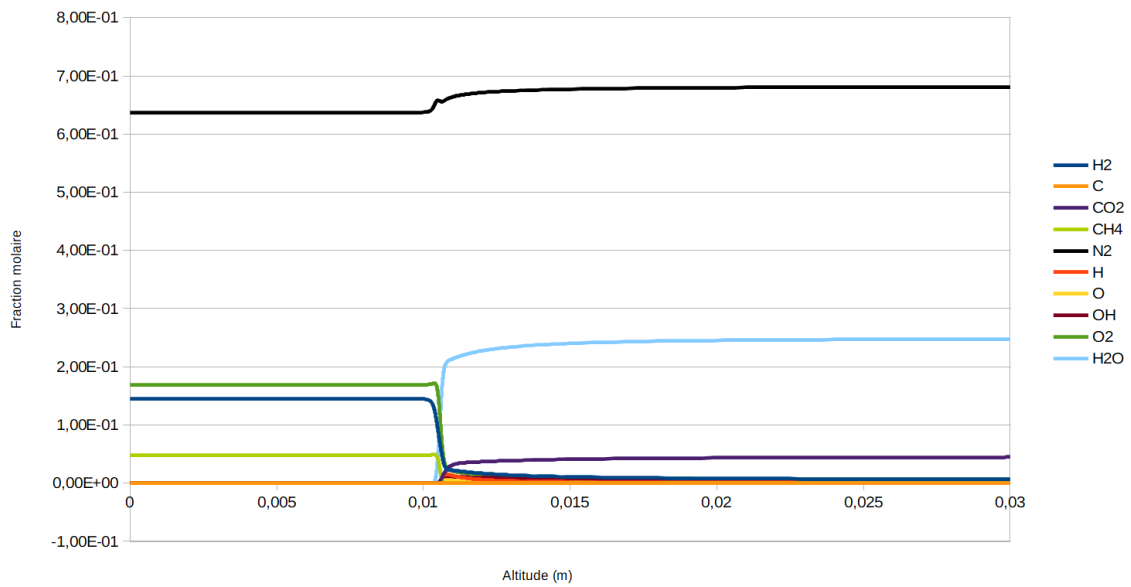
Graphique représentant les fractions massiques des différentes espèces présentes lors de la combustion en fonction de l'altitude pour $\alpha=0,25$



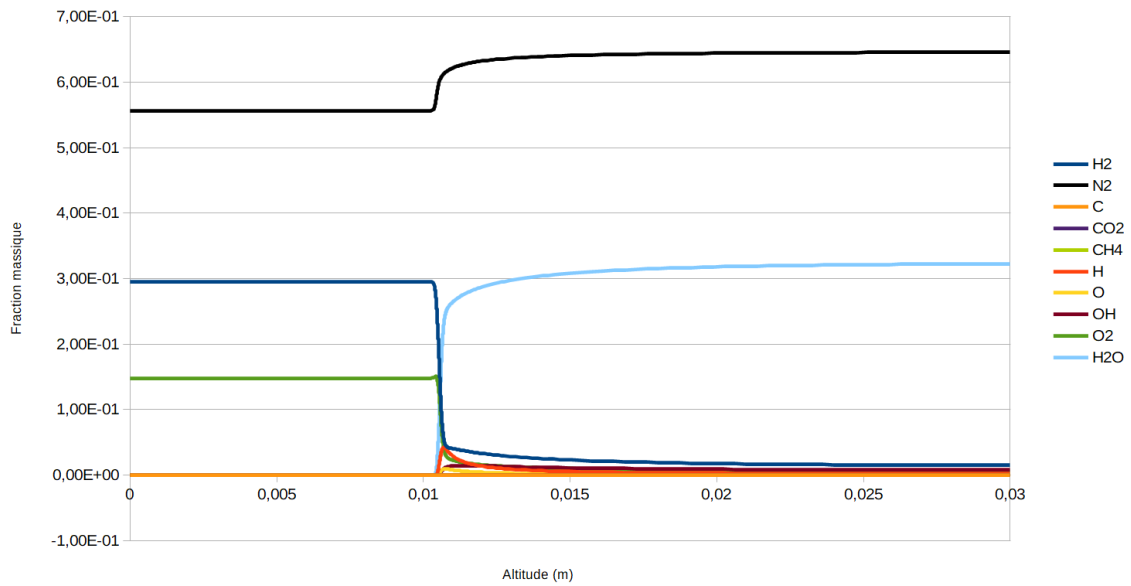
Graphique représentant les fractions massiques des différentes espèces présentes lors de la combustion en fonction de l'altitude pour $\alpha=0,5$



Graphique représentant les fractions massiques des différentes espèces présentes lors de la combustion en fonction de l'altitude pour $\alpha=0,75$



Graphique représentant les fractions massiques des différentes espèces présentes lors de la combustion en fonction de l'altitude pour $\alpha=1$



Ainsi, nous pouvons facilement observer l'évolution de chaque fraction molaire en fonction de l'altitude et de la valeur de α , et pouvoir faire facilement des comparaisons pour des mélanges de compositions différentes.

Annexe D

Précisions PCI et capacité thermique

Tableaux de valeurs

Voici les tableaux de valeurs nous ayant permis le calcul des différents apports de PCI :

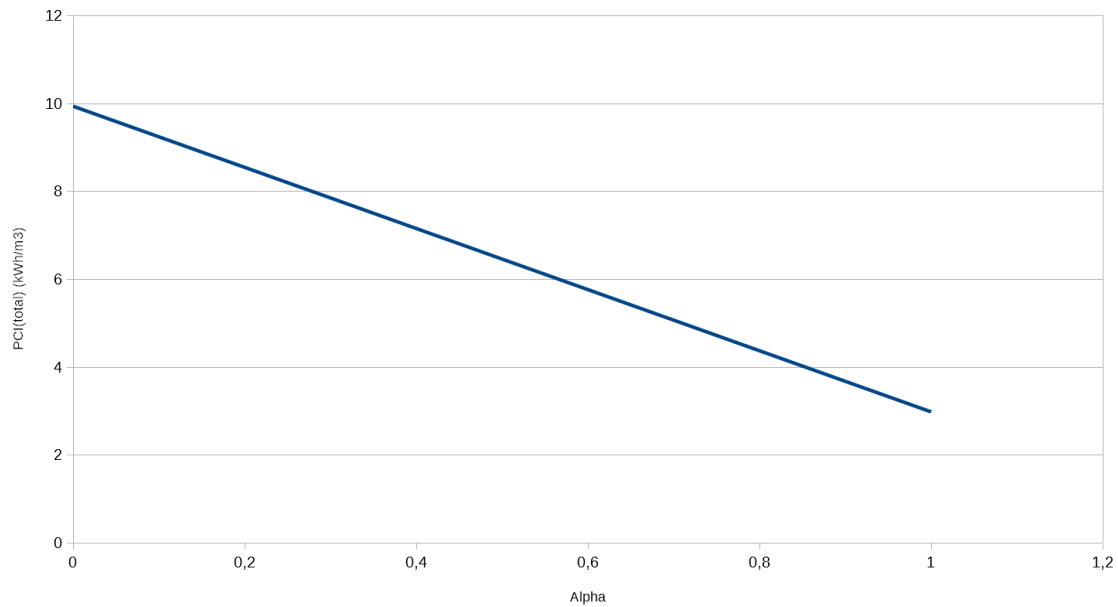
Alpha	PCI total (kJ/kg)	PCI (part de CH4)	PCI (part de H2)	PCI CH4 (kJ/kg)	PCI H2 (kJ/kg)	Alpha	PCI total (kWh/kg)	PCI (part de CH4)	PCI (part de H2)	PCI CH4 (kWh/kg)	PCI H2 (kWh/kg)
0	50081,05	50081,05	0	50081,05	120010,91	0	14,82	14,82	0	14,82	33,21
0,05	53577,543	47576,9975	6000,5455			0,05	15,7395	14,079	1,6605		
0,1	57074,036	45072,945	12001,091			0,1	16,659	13,338	3,321		
0,15	60570,529	42568,8925	18001,6365			0,15	17,5785	12,597	4,9815		
0,2	64067,022	40064,84	24002,182			0,2	18,498	11,856	6,642		
0,25	67563,515	37560,7875	30002,7275			0,25	19,4175	11,115	8,3025		
0,3	71060,008	35056,735	36003,273			0,3	20,337	10,374	9,963		
0,35	74556,501	32552,6825	42003,8185			0,35	21,2565	9,633	11,6235		
0,4	78052,994	30048,63	48004,364			0,4	22,176	8,892	13,284		
0,45	81549,487	27544,5775	54004,9095			0,45	23,0955	8,151	14,9445		
0,5	85045,98	25040,525	60005,455			0,5	24,015	7,41	16,605		
0,55	88542,473	22536,4725	66006,0005			0,55	24,9345	6,669	18,2655		
0,6	92038,966	20032,42	72006,546			0,6	25,854	5,928	19,926		
0,65	95535,459	17528,3675	78007,0915			0,65	26,7735	5,187	21,5865		
0,7	99031,952	15024,315	84007,637			0,7	27,693	4,446	23,247		
0,75	102528,445	12520,2625	90008,1825			0,75	28,6125	3,705	24,9075		
0,8	106024,938	10016,21	96008,728			0,8	29,532	2,964	26,568		
0,85	109521,431	7512,1575	102009,2735			0,85	30,4515	2,223	28,2285		
0,88	111619,3268	6009,726	105609,6008			0,88	31,0032	1,7784	29,2248		
0,9	113017,924	5008,105	108009,819			0,9	31,371	1,482	29,889		
0,95	116514,417	2504,0525	114010,3645			0,95	32,2905	0,741	31,5495		
1	120010,91	0	120010,91			1	33,21	0	33,21		

Alpha	PCI total (kJ/mol)	PCI (part de CH4)	PCI (part de H2)	PCI CH4 (kJ/mol)	PCI H2 (kJ/mol)	Alpha	PCI total (kWh/m³)	PCI (part de CH4)	PCI (part de H2)	PCI CH4 (kWh/m³)	PCI H2 (kWh/m³)
0	803,3	803,3	0	803,3	241,942	0	9,94	9,94	0	9,94	2,985
0,05	775,2321	763,135	12,0971			0,05	9,59225	9,443	0,14925		
0,1	747,1642	722,97	24,1942			0,1	9,2445	8,946	0,2985		
0,15	719,0963	682,805	36,2913			0,15	8,89675	8,449	0,44775		
0,2	691,0284	642,64	48,3884			0,2	8,549	7,952	0,597		
0,25	662,9605	602,475	60,4855			0,25	8,20125	7,455	0,74625		
0,3	634,8926	562,31	72,5826			0,3	7,8535	6,958	0,8955		
0,35	606,8247	522,145	84,6797			0,35	7,50575	6,461	1,04475		
0,4	578,7568	481,98	96,7768			0,4	7,158	5,964	1,194		
0,45	550,6889	441,815	108,8739			0,45	6,81025	5,467	1,34325		
0,5	522,621	401,65	120,971			0,5	6,4625	4,97	1,4925		
0,55	494,5531	361,485	133,0681			0,55	6,11475	4,473	1,64175		
0,6	466,4852	321,32	145,1652			0,6	5,767	3,976	1,791		
0,65	438,4173	281,155	157,2623			0,65	5,41925	3,479	1,94025		
0,7	410,3494	240,99	169,3594			0,7	5,0715	2,982	2,0895		
0,75	382,2815	200,825	181,4565			0,75	4,72375	2,485	2,23875		
0,8	354,2136	160,66	193,5536			0,8	4,376	1,988	2,388		
0,85	326,1457	120,495	205,6507			0,85	4,02825	1,491	2,53725		
0,88	309,30496	96,396	212,90896			0,88	3,8196	1,1928	2,6268		
0,9	298,0778	80,33	217,7478			0,9	3,6805	0,994	2,6865		
0,95	270,0099	40,165	229,8449			0,95	3,33275	0,497	2,83575		
1	241,942	0	241,942			1	2,985	0	2,985		

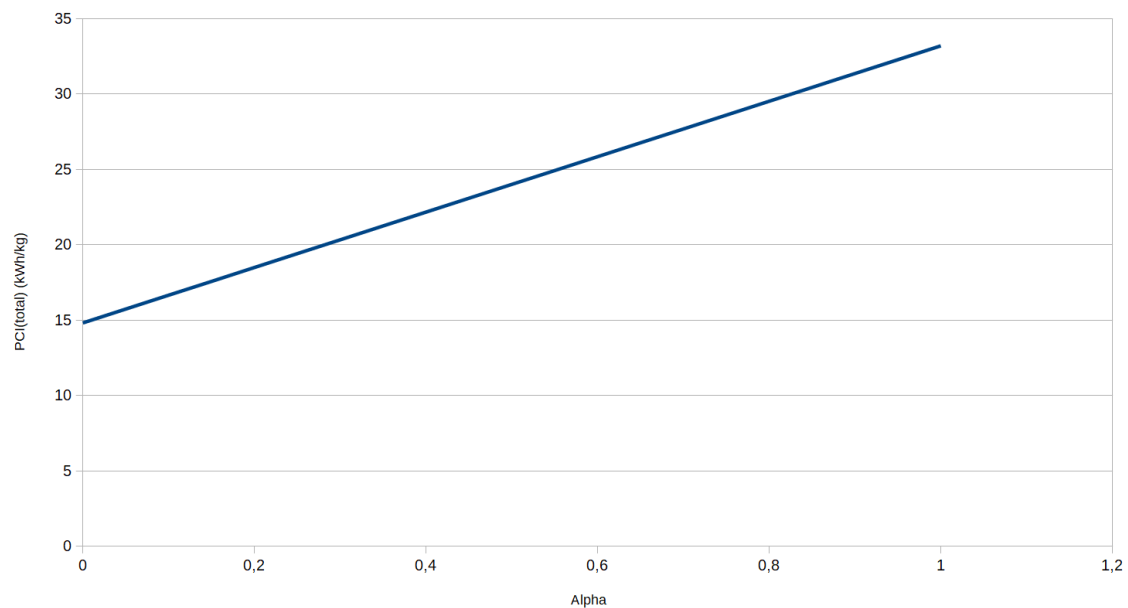
Etude de courbes

Nous avons tracé graphiquement l'évolution des PCI totaux en fonction de la valeur de α .
Nous obtenons ainsi deux courbes, l'une en terme de volume, l'autre en terme de masse :

Evolution du PCI(total) en fonction de alpha



Evolution du PCI(total) en fonction de alpha

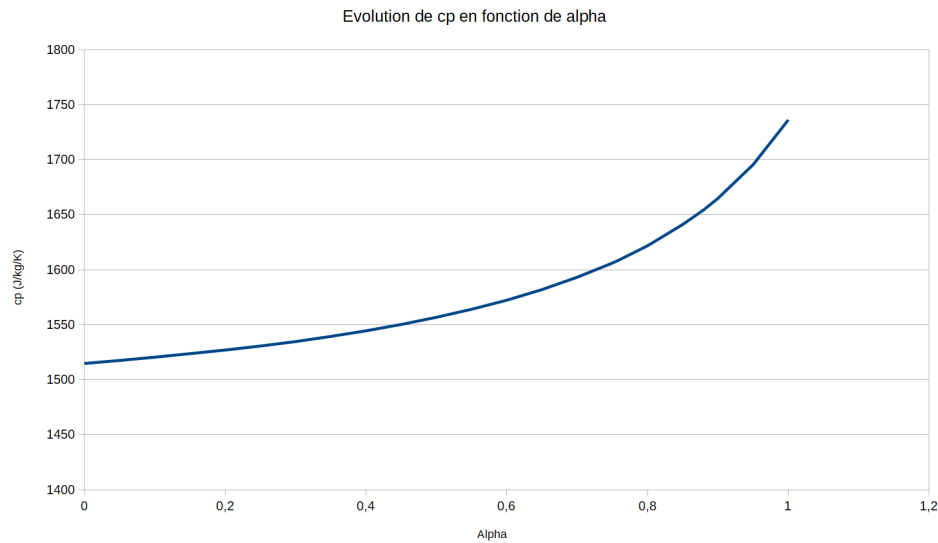


Dans les deux cas, nous remarquons que la courbe obtenue est une portion de droite. Mais, la différence entre le PCI total en volume et le PCI total en masse est que le premier décroît avec valeurs de α croissantes, et que c'est l'inverse pour le second. Cela s'explique par la différence des valeurs de PCI volumiques et massiques de CH_4 et H_2 : $PCI(CH_4)=9,94kWh/m^3$ et $PCI(H_2)=2,99kWh/m^3$ en terme de volume, où nous avons donc $PCI(CH_4)>PCI(H_2)$, et $PCI(CH_4)=14,82kWh/kg$ et $PCI(H_2)=33,21kWh/kg$ en terme de masse, où nous avons cette fois $PCI(CH_4)<PCI(H_2)$.

Capacité thermique

La capacité thermique massique est une grandeur qui reflète la capacité d'un matériau à accumuler de l'énergie sous forme thermique, pour une masse donnée, quand sa température augmente. Une grande capacité thermique signifie qu'une grande quantité d'énergie

peut être stockée, moyennant une augmentation relativement faible de la température. Nous avons donc tracé l'évolution de c_p (J/kg/K) en fonction de la valeur de α :



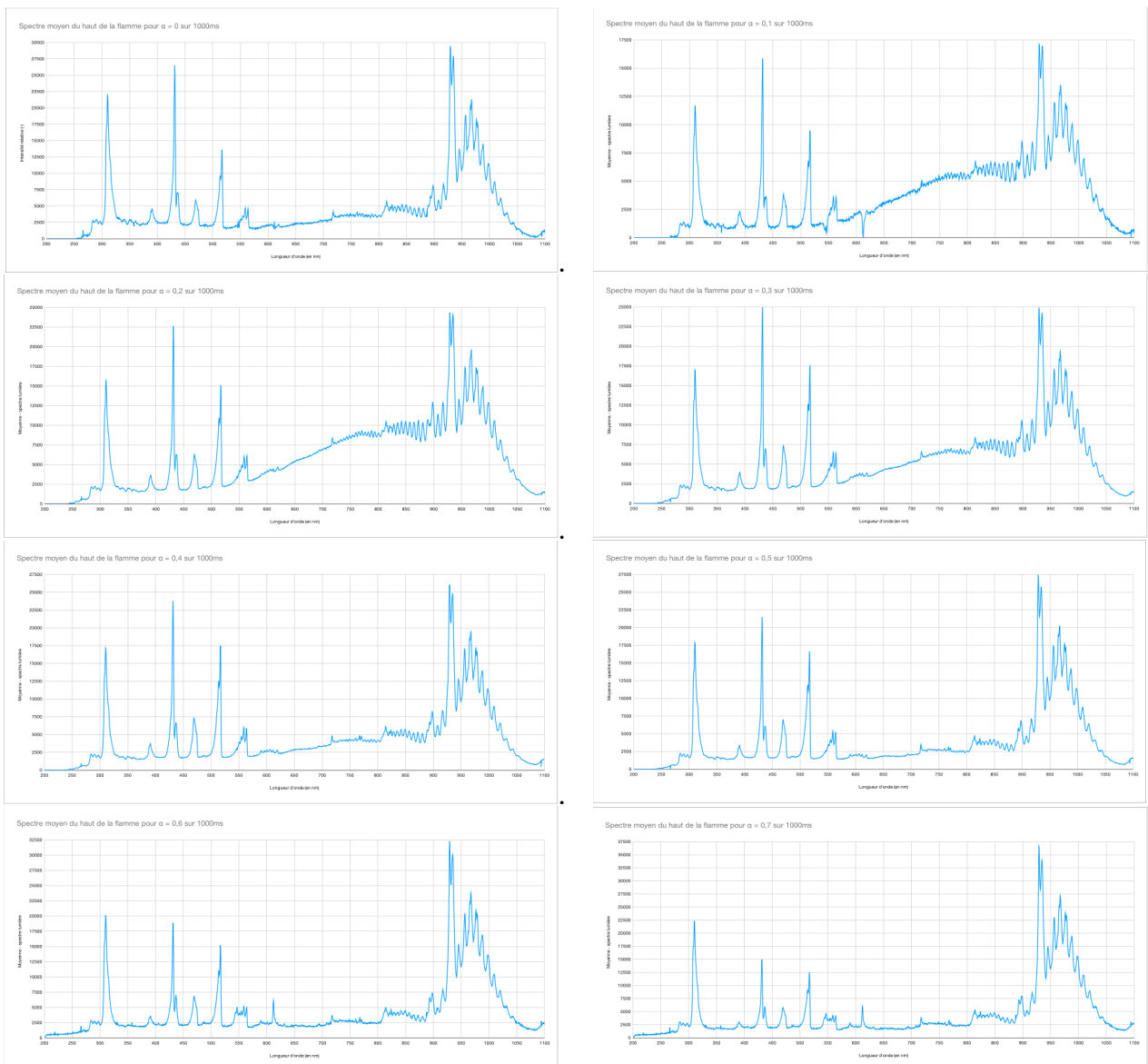
Nous observons alors que c_p augmente avec une valeur de α croissante. Dans notre cas, cela signifie donc que pour une même masse donnée, l'hydrogène accumulera plus d'énergie que le méthane, puisque $c_p (\alpha=1)$ (100% H_2) > $c_p (\alpha=0)$ (100% CH_4). Nous pouvons donc penser que l'utilisation de l'hydrogène est plus intéressante, mais il ne faut pas oublier que la masse volumique de l'hydrogène est beaucoup plus petite que celle du méthane, ce qui veut donc dire que pour un même volume donné, nous aurons beaucoup plus de masse de méthane que de masse d'hydrogène (0,67g de méthane pour 1L contre 0,09g d'hydrogène pour 1L). Il faut donc prendre en compte ces deux facteurs pour choisir le plus intéressant. En effet, pour une même masse donnée, l'hydrogène stockera plus d'énergie que le méthane, mais il prendra un volume beaucoup plus important ! Il faut donc penser à des solutions pour le stocker, ce qui n'est pas toujours évident.

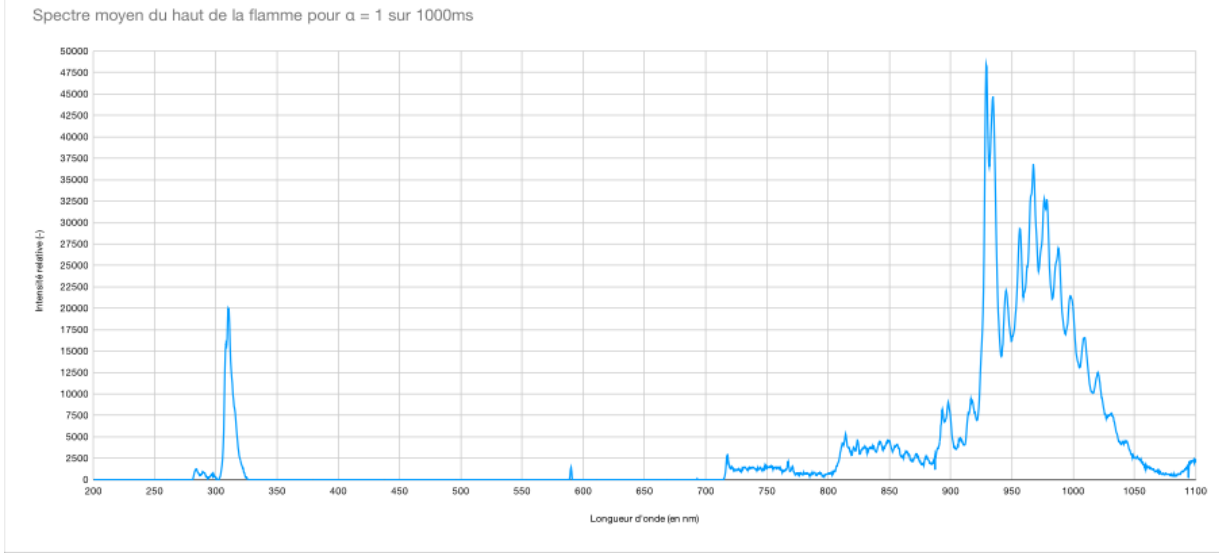
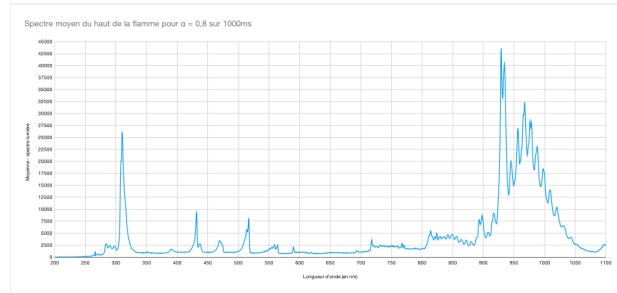
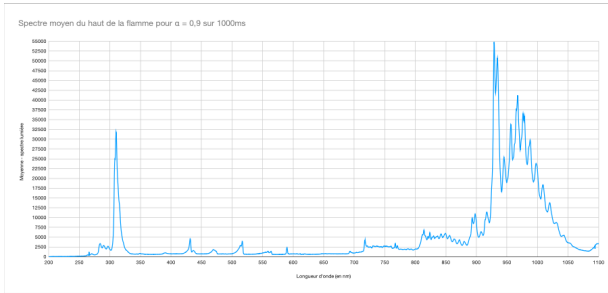
Annexe E

Résultats Expérimentaux

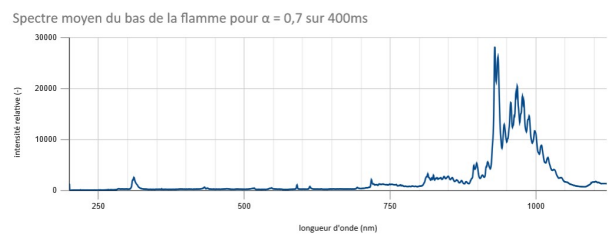
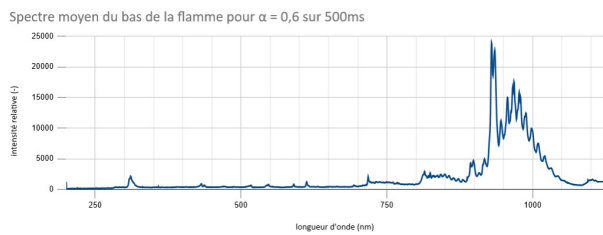
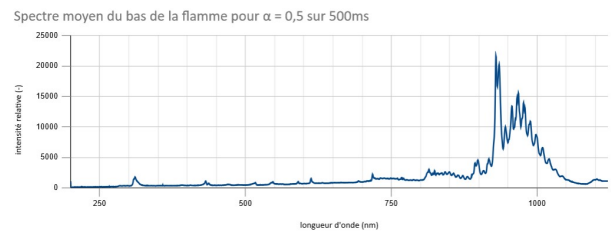
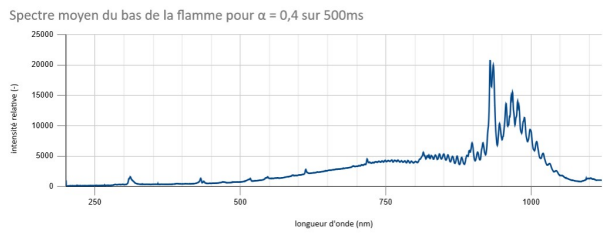
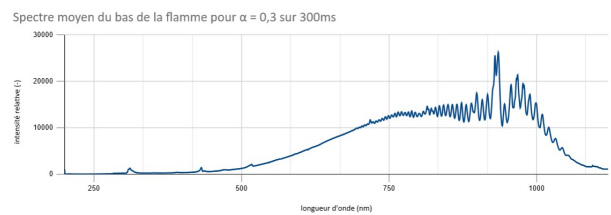
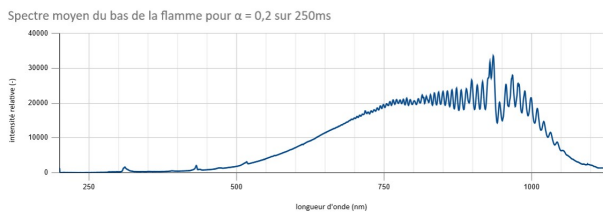
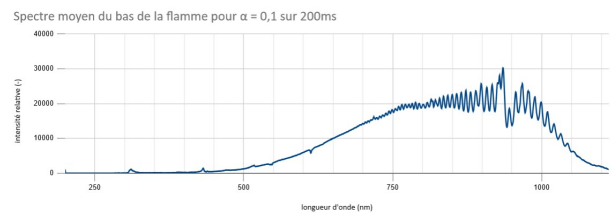
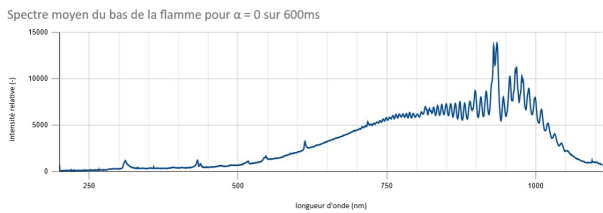
Spectres moyens par α

Haut de la flamme

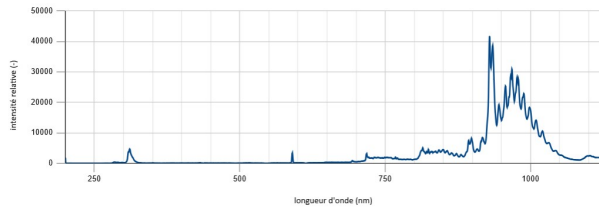




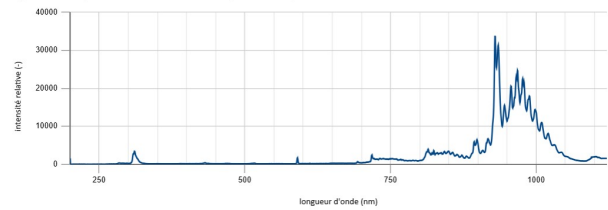
Bas de la flamme



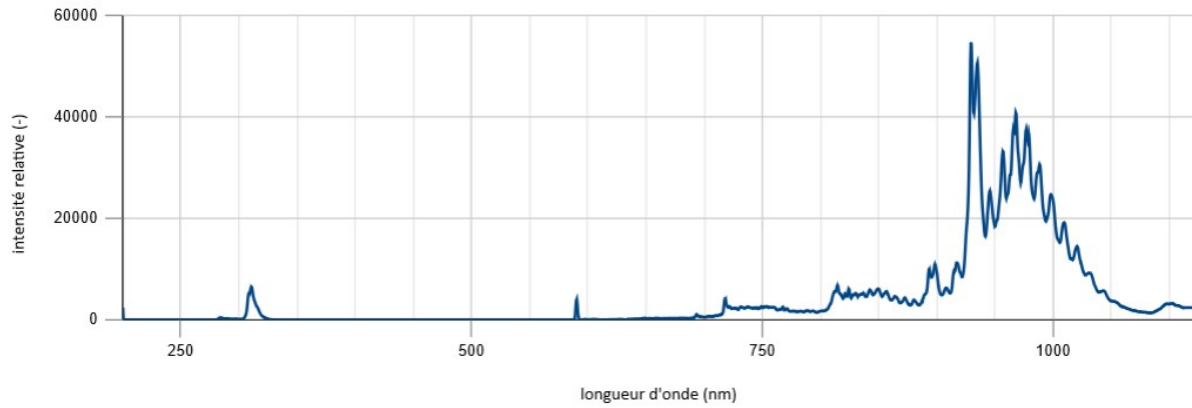
Spectre moyen du bas de la flamme sur $\alpha = 0,9$ sur 250ms



Spectre moyen du bas de la flamme pour $\alpha = 0,8$ sur 300ms

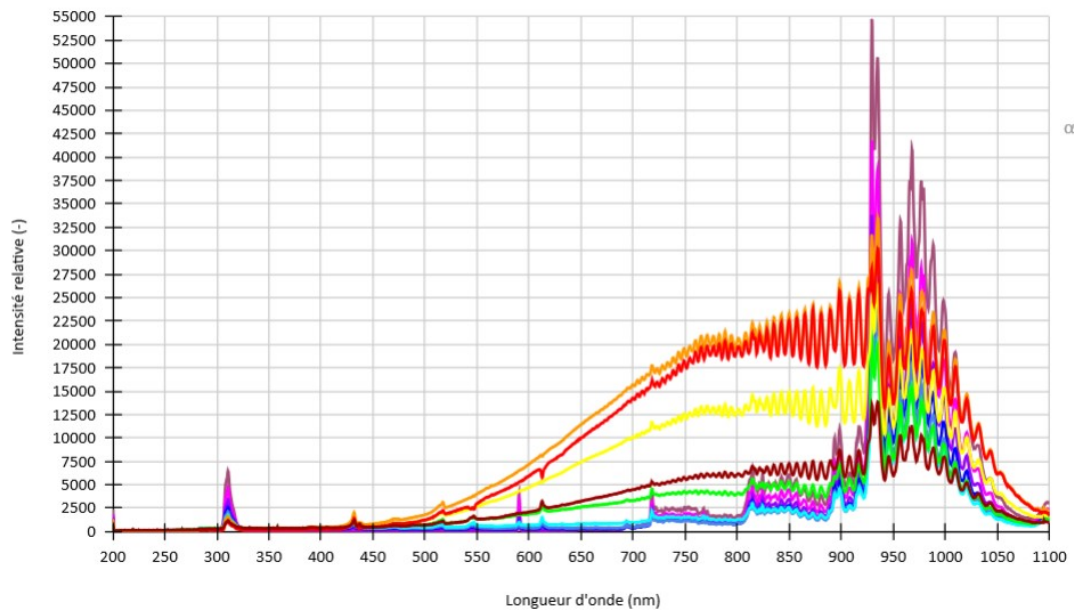


Spectre moyen du bas de la flamme sur $\alpha = 1$ sur 200ms



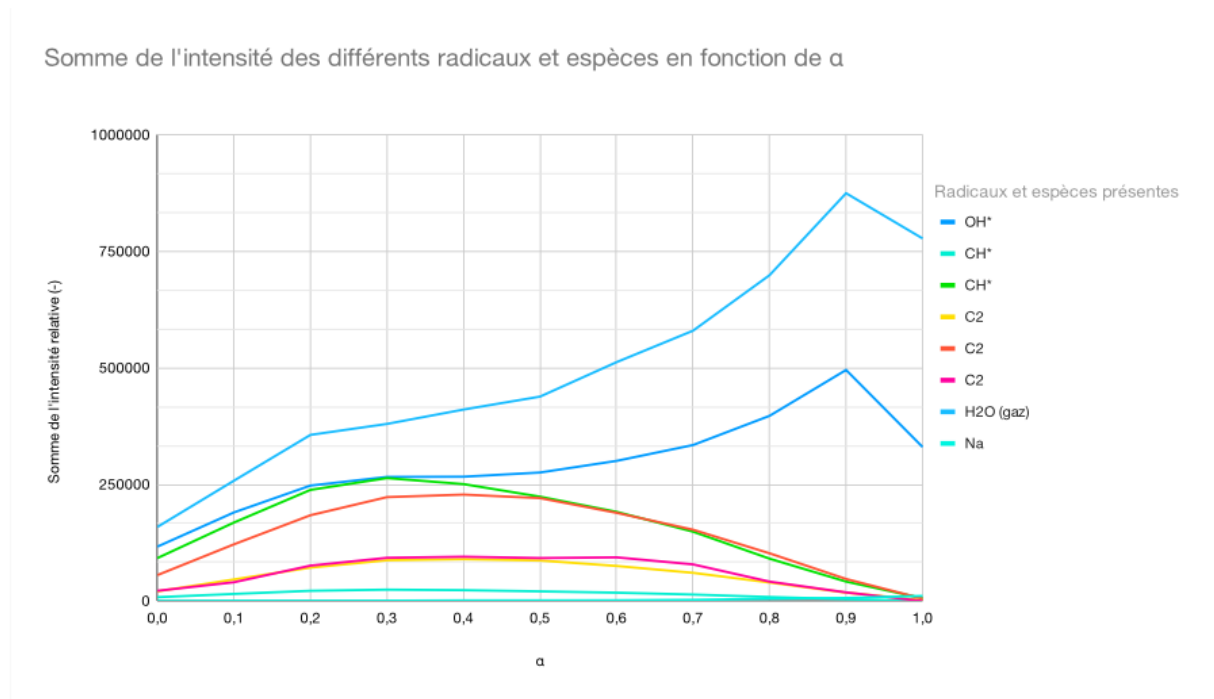
Ci-dessous le diagramme recapitulatif pour observer l'évolution de l'intensité des pics des différents radicaux et espèces en fonction du temps.

Evolution selon α de l'intensité en fonction de la longueur d'onde sur le bas de la flamme

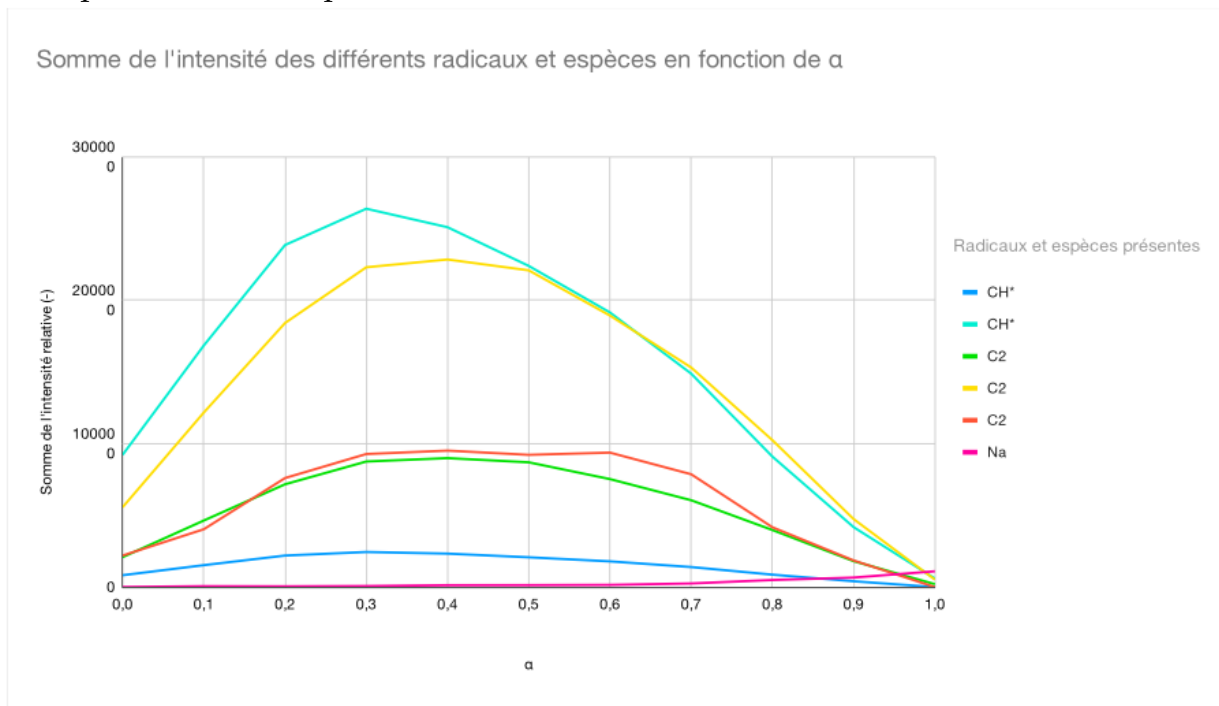


Evolution des pics des différents radicaux et espèces en fonction de α

Haut de la flamme

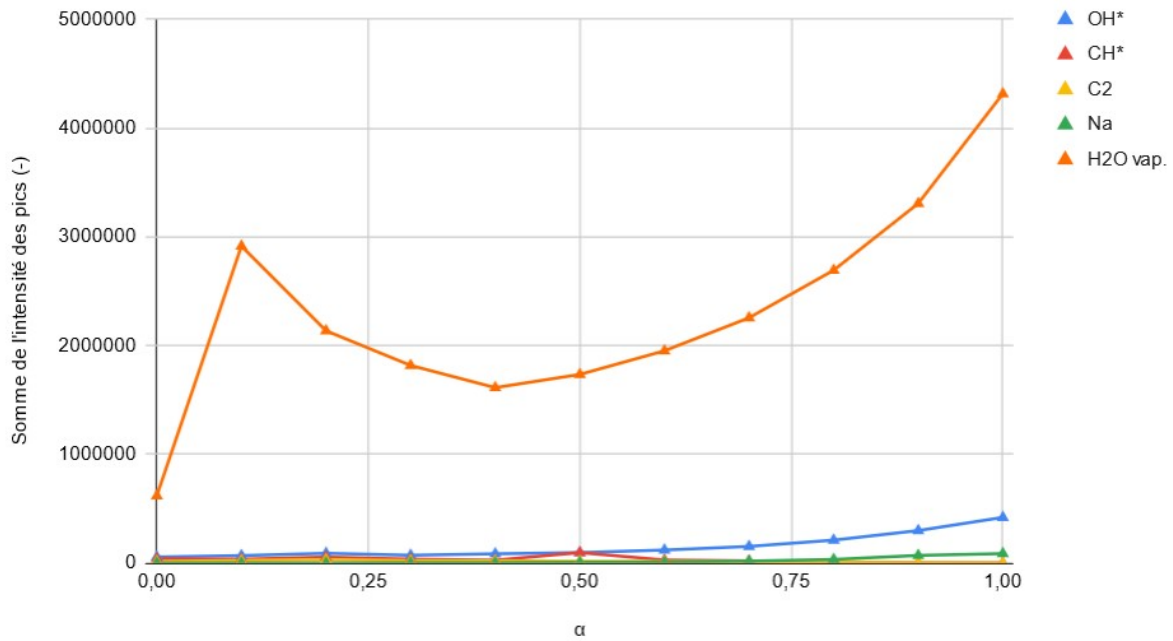


Pour plus de clarté les pics du H2O et du OH* ont ensuite été retirés.



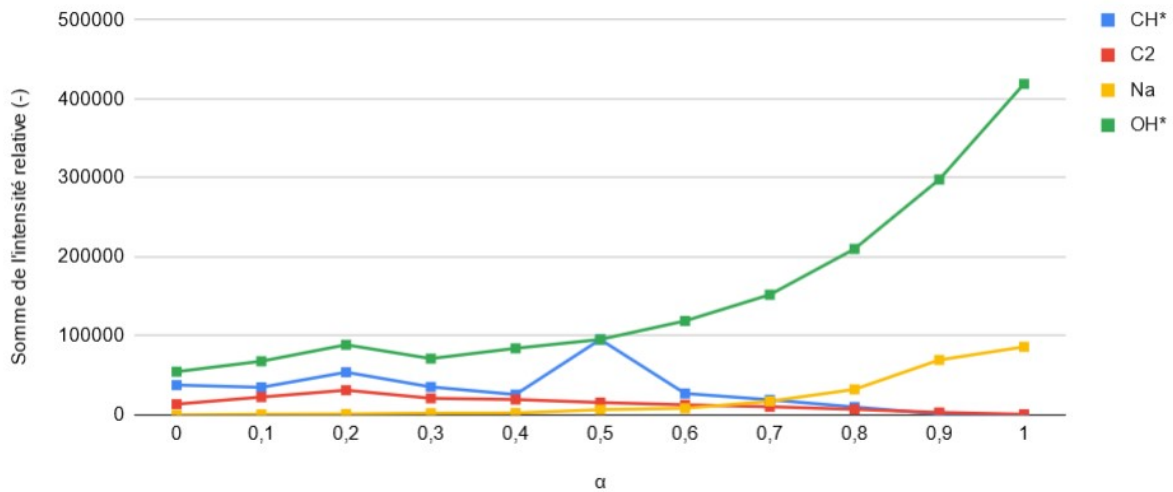
Bas de la flamme

Somme de l'intensité des différents radicaux et espèces en fonction de α



Pour plus de clarté les pics du H2O et du OH* ont ensuite été retirés.

Somme de l'intensité des différents radicaux et espèces (sans la vapeur d'eau)



Pour encore plus de clarté le premier diagramme a été adimensionné.

Somme de l'intensité des différents radicaux et espèces (adimensionnée)

