Mécanismes cinétiques de combustion des gaz de pyrolyse des végétaux



Valérie Leroy Paul Antoine Santoni Eric Leoni



Contexte

Modélisation sommaire des codes actuels

 $\mathrm{CO} + \frac{1}{2} \, \mathrm{O_2} \rightarrow \mathrm{CO_2}$

Grishin (1985) : Premier modèle physique puis Porterie et al. (2000) ; Sero-Guillaume et Margerit (2002)

Mécanismes cinétiques inadaptés

Gri-Mech 3.0 (US Gas Research Institute) CH₄

Jallais CH₄

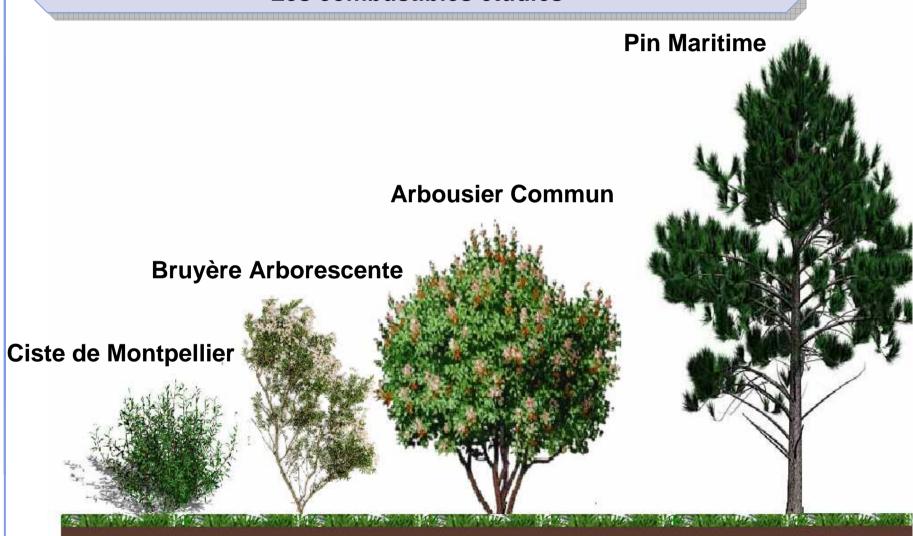
Ethanol, H₂, CO...

Mélange gazeux complexe

T > 500K CH₄, CO, CO₂, H₂, C₂H₂, C₂H₄ + autres hydrocarbures proportions variables selon le combustible

Contexte

Les combustibles étudiés

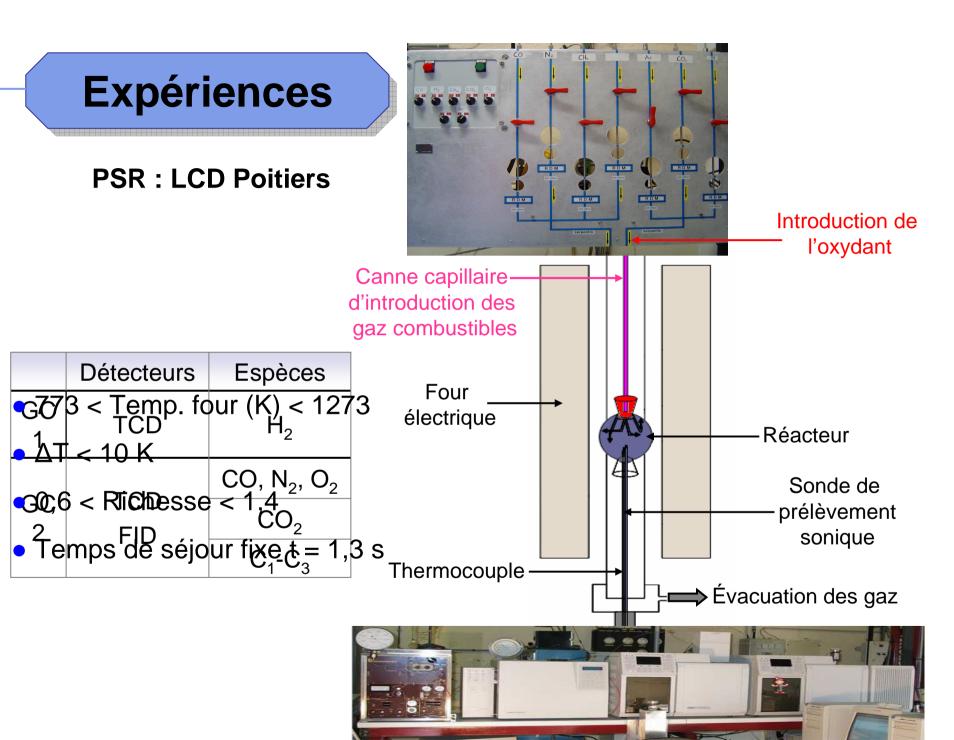


Expériences

PSR: LCD Poitiers

Détecteurs

Espèces



Expériences

Mélange gazeux complexe

Le mélange gazeux est majoritairement composé de CH₄, CO et CO₂ quel que soit le végétal. (Expé. en Four Tubulaire au LCD)

Pin Maritime

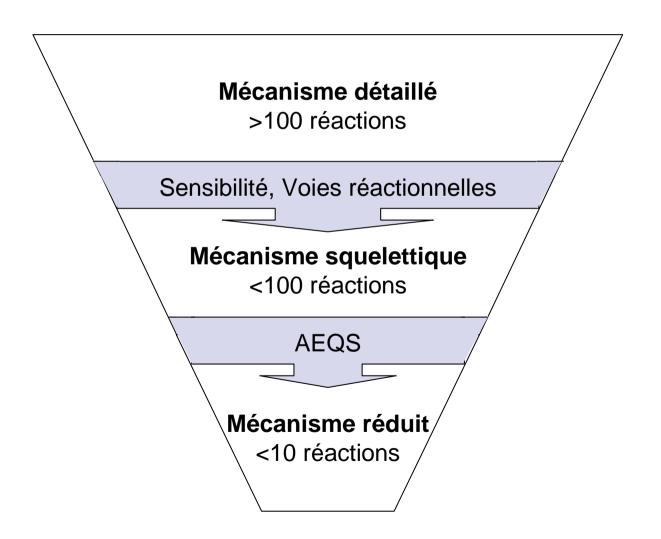
Facteur dilution: 9,2

Pourcentages volumiques en entrée du PSR

Richesse	CH ₄	СО	CO ₂	02	N ₂	Ar
0,6	2,00	3,33	5,57	9,44	37,76	41,90
1,0				5,66	22,66	60,78
1,4				4,05	16,18	68,87

Simulations Chemkin® Mécanisme Données d'entrée réactionnel Code de calcul PSR Interpréteur fichier $\dot{m}\left(Y_{k}-Y_{k}^{*}\right)-\dot{\omega}_{k}W_{k}V=0$ **CHEMKIN** binaire Données Profil de fractions thermodynamiques molaires

Approche de modélisation



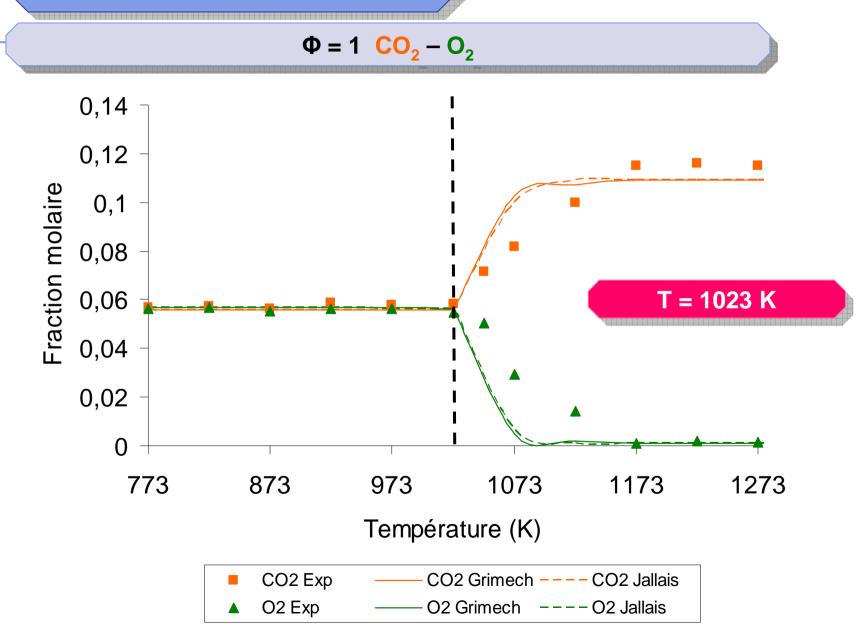
Mécanismes détaillés

- Gri-Mech 3.0 (325 réactions et 53 espèces)
 - Description de l'oxydation du méthane et de la chimie de l'azote
- Jallais (322 réactions et 40 espèces)
 - Description de l'oxydation du méthane

Rarement utilisés pour des mélanges

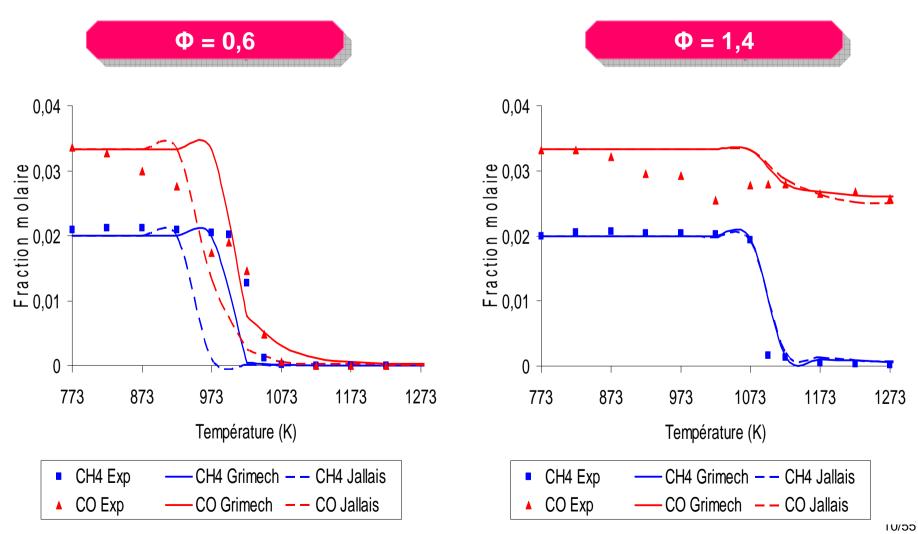
$$H_2/O_2$$
 CO_2 CH_2O_2 CH_4 C_2H_4 C_2H_2 $> C_2$

Mécanismes détaillés

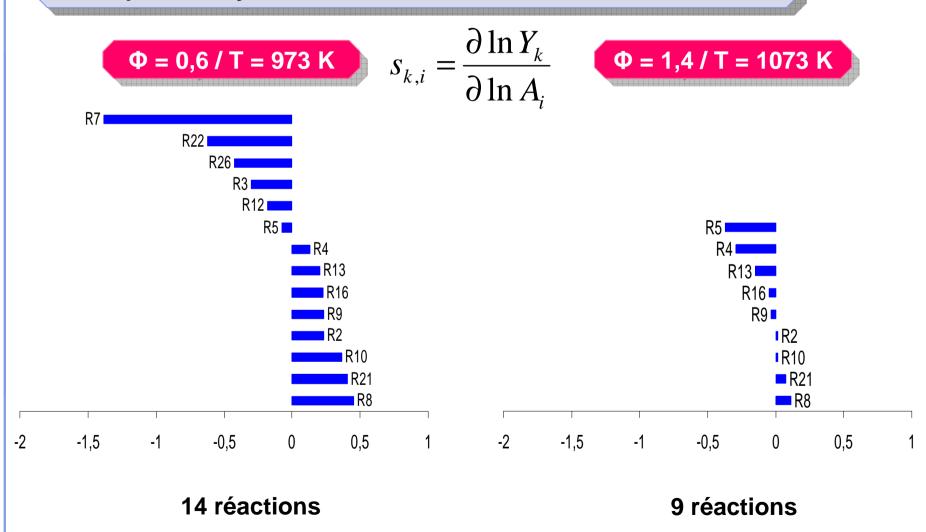


Mécanismes détaillés

CH₄ - CO



Exemple d'analyse de sensibilité de la fraction molaire de CH4



Exemple d'analyse des voies réactionnelles

Contribution à la consommation du radical CH₃

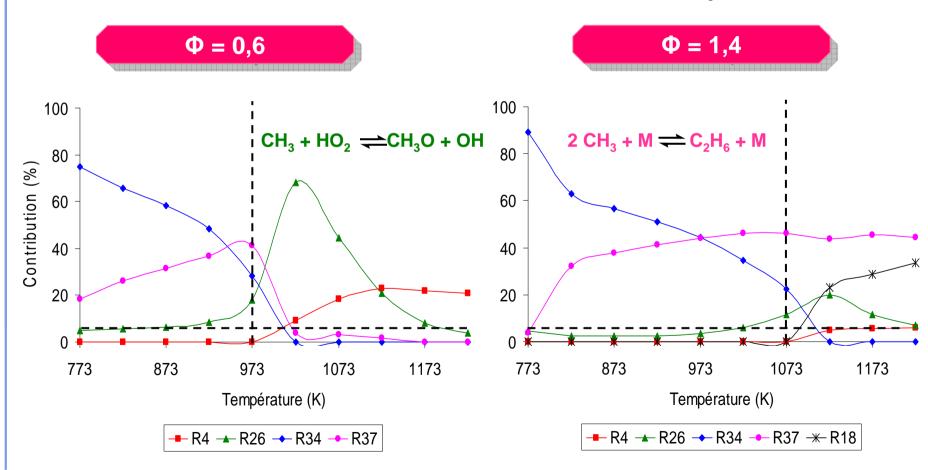
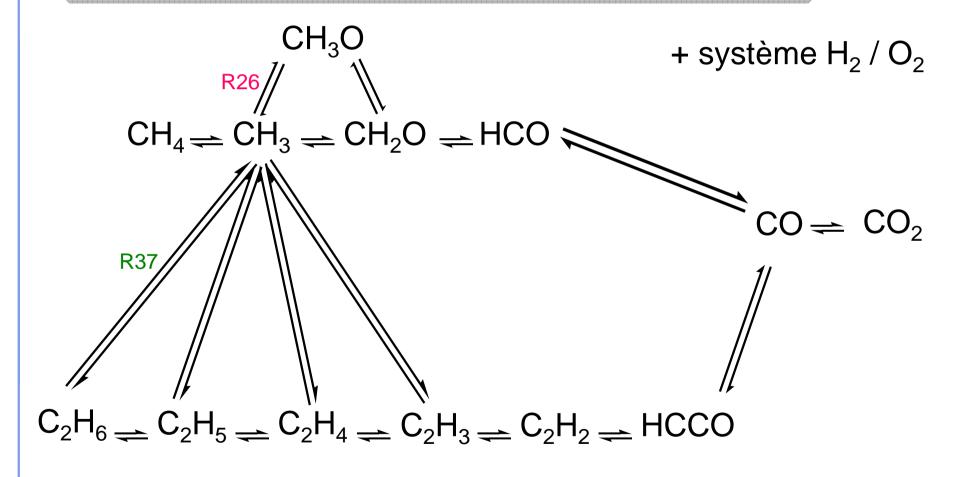
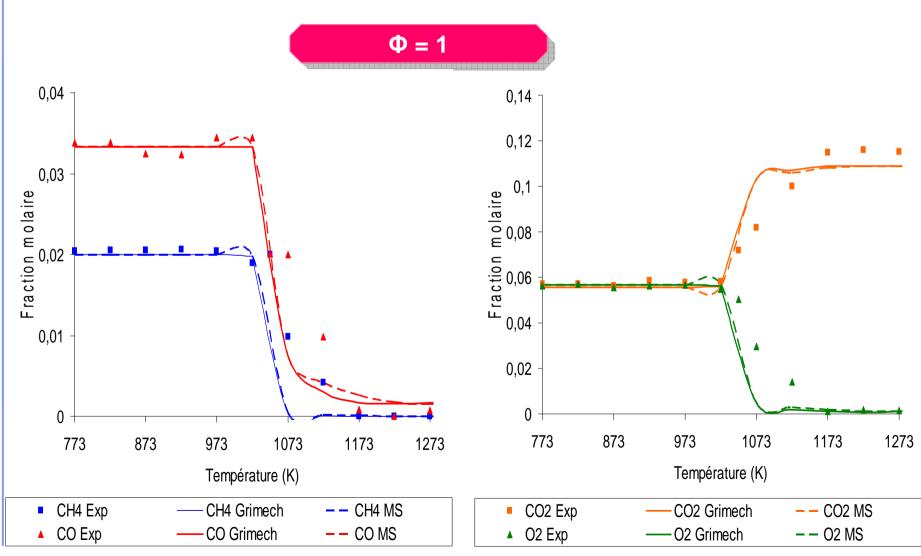


Schéma réactionnel



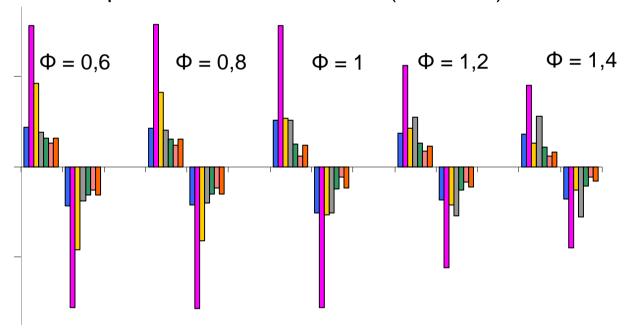
49 réactions élémentaires et 20 espèces



Mécanisme réduit

Espèces en AEQS

Taux de production/consommation (mol L-1s-1)



13 équations algébriques

$$L(Y_{HCO}) = \omega_5 + \omega_7 + \omega_{18} + \omega_{29} + \omega_{36} + \omega_{40} - \omega_{45} - \omega_{46} = 0$$

AEQS

Mécanisme réduit

Combinaisons linéaires des L(Y_{AEQS}) :

$$L(Y_{CO}) = (\omega_3 + \omega_{17} - \omega_{22} + \omega_{28} - \omega_{33} - \omega_{40} - \omega_{41} - \omega_{42}) - (\omega_{30} + \omega_{35} + \omega_{37})$$

$$\omega_I$$

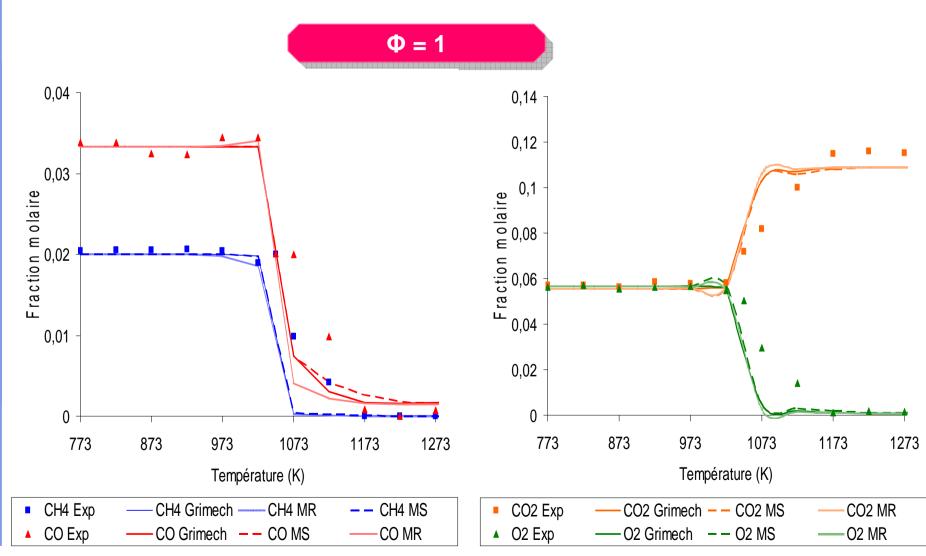
20 – 13 = 7 espèces instationnaires

7 équations différentielles

(I)
$$CH_4 + 2H + H_2O \stackrel{\omega_I}{\Longrightarrow} CO + 4H_2$$

(II) $CO + H_2O \stackrel{\omega_{II}}{\Longrightarrow} CO_2 + H_2$
(III) $H + H + M \stackrel{\omega_{III}}{\Longrightarrow} H_2 + M$
(IV) $O_2 + 3H_2 \stackrel{\omega_{IV}}{\Longrightarrow} 2H + 2H_2O$

Mécanisme réduit



Conclusion

Mildafetti.

325 réactions élémentaires

53 espèces 53 EDO

1 minute

MuSauci.

49 réactions élémentaires

20 espèces

20 EDO

4 réactions globales

7 espèces + 13 en AEQS

7 EDO +

13 Eq. Alg. NL

1 seconde

Perspectives

- □ Etudier d'autres compositions et des mélanges plus complexes
- Utiliser le MS et le MR dans un code d'écoulement réactif
- Analyser la formation des suies et des NOx

6th Mediterranean Combustion Symposium

- Porticcio Ajaccio (Corse)
- 7 11 juin 2009
- 1^{er} mars: soumission full papers
- 15 avril : résumés « work in progress »
- Soumission et enregistrement sur le site de l'ICHMT : http://www.ichmt.org/mcs-6
- Contacts: MCS6@univ-corse.fr