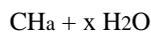


---

### Annexe 3 : Compléments sur ThermoOptim : combustion

La plupart des combustibles sans cendres sont des hydrocarbures. En négligeant les traces d'azote et de soufre, leur molécule comporte essentiellement des atomes de carbone C et d'hydrogène H ainsi qu'un peu d'oxygène O.

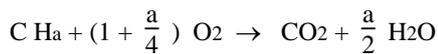
En ramenant la formulation à un atome de carbone, la formule générale d'un combustible est donc  $C H_y O_x$ . Comme la condition  $x \leq y/2$  est toujours vérifiée, on peut considérer que la formule  $C H_y O_x$  devient :



a représente ainsi ce qu'il est convenu d'appeler l'hydrogène disponible pour la combustion rapporté à l'oxydation complète du carbone unitaire.

L'eau contenue dans le combustible ne participe pas à la réaction de combustion. Elle se retrouve dans les fumées.

La combustion complète d'un combustible de formule  $C H_a$  avec de l'oxygène pur serait régie par cette équation : il faut 1 molécule d'oxygène pour former  $CO_2$ , et  $a/4$  molécules d'oxygène pour former  $a/2 H_2O$ .

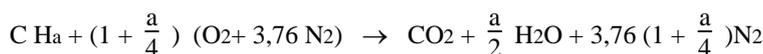


Toutefois, dans les systèmes énergétiques, les combustions sont presque toujours réalisées avec de l'air comme comburant.

L'air sec ayant comme composition volumique approchée 79 % d'azote et 21 % d'oxygène, le rapport azote/oxygène vaut  $79/21 = 3,76$ .

C'est pourquoi l'air peut être représenté par la formulation  $O_2 + 3,76 N_2$ .

La combustion complète avec l'air d'un combustible de formule  $C H_a$  est donc régie par cette équation.



On appelle combustion stœchiométrique une combustion réalisée avec la quantité exacte de comburant permettant de complètement oxyder le combustible.

C'est celle qui conduit à la température de fin de combustion la plus élevée. Nous la considérerons comme combustion de référence.

Cette équation signifie que la combustion stœchiométrique d'une mole de combustible  $C H_a$  nécessite  $(1 + a/4)$  moles de dioxygène et produit 1 mole de dioxyde de carbone et  $a/2$  moles d'eau.

Modéliser et simuler les technologies énergétiques (extraits résumés)

Si le comburant est l'air,  $3,76 (1 + a/4)$  moles d'azote sont aussi mises en jeu, mais, comme elles ne réagissent pas avec le combustible, elles se retrouvent dans les gaz brûlés. On dit que l'azote reste inerte.

Lorsque la combustion est non stœchiométrique, elle peut être caractérisée de plusieurs manières :

Soit par l'excès d'air  $e$ , qui comme son nom l'indique, représente la quantité d'air en excès

Soit par le facteur d'air  $\lambda$ , qui est égal à  $1 + e$

Soit par la richesse  $R$ , rapport du nombre de moles (ou de la masse) de combustible contenu dans une quantité déterminée de mélange, au nombre de moles (ou à la masse) de combustible dans le mélange stœchiométrique.

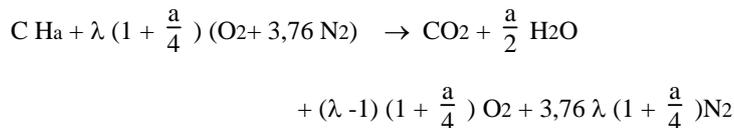
$R = 1$  correspond au mélange stœchiométrique,  $R < 1$  à un excès d'air, et  $R > 1$  à un excès de combustible

Ces trois grandeurs sont reliées par les relations simples :

$$R = \frac{1}{1 + e} \quad \text{et} \quad \lambda = 1 + e = \frac{1}{R}$$

Nous utiliserons préférentiellement  $\lambda$  dans ce qui suit, car c'est le terme multiplicateur de l'air dans l'équation de la combustion

Si  $\lambda$  est supérieur à 1, c'est-à-dire en excès d'air, la combustion complète avec l'air d'un combustible de formule  $\text{CH}_a$  est régie par cette équation :



Thermoptim utilise une généralisation de cette équation pour des combustibles plus complexes que  $\text{CH}_a$ .

La comparaison de ces deux équations permet de comprendre ce qui se passe lorsque l'air est disponible en excès.

Le combustible réagit avec l'oxygène comme dans la réaction stœchiométrique, et tout l'air en excès se retrouve sans réagir dans les gaz brûlés.

$\lambda$  est le terme qui multiplie le nombre de moles d'air dans l'équation de la combustion

Pour  $\lambda = 1$ , la réaction est stœchiométrique

Lors d'une combustion, le maximum de dégagement d'énergie est obtenu lorsque l'eau contenue dans les fumées est suffisamment refroidie pour se retrouver liquéfiée, ce qui impose que leur température soit très basse. La valeur de la chaleur de réaction complète prend alors le nom de pouvoir calorifique supérieur, ou PCS.

Dans le cas le plus général où toute l'eau produite reste à l'état de vapeur, on lui donne le nom de pouvoir calorifique inférieur ou PCI.

Les chaudières à condensation sont celles où l'eau contenue dans les fumées est liquéfiée

Dans ThermoOptim, une transfo combustion est représentée par un composant chambre de combustion comportant deux transfos en entrée, d'une part le comburant, ici de l'air en sortie de compresseur, connecté sur le port bleu, et d'autre part le combustible connecté sur le port rouge (figure A3.1).

Les gaz brûlés en sortent par le port vert, ici connecté à la turbine.

La composition du combustible est définie dans le point aval de la transfo « combustible », dont le corps doit être un gaz pur ou composé.

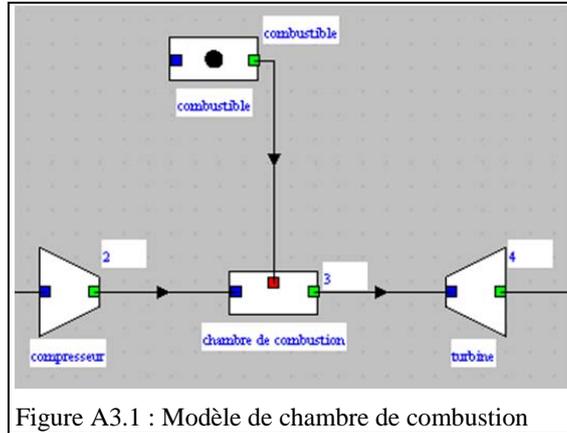


Figure A3.1 : Modèle de chambre de combustion

Celle du gaz naturel de Montoir de Bretagne est affichée figure A3.2.

| nom du composant | fraction molaire | fraction massique |
|------------------|------------------|-------------------|
| CH4 ` méthane    | 0,871            | 0,758966          |
| C2H6 ` éthane    | 0,088            | 0,1437279         |
| C3H8 ` propane   | 0,025            | 0,05987759        |
| C4H10 ` n-butane | 0,008            | 0,02525591        |
| N2               | 0,008            | 0,01217253        |

Figure A3.2 : Déclaration du combustible

L'écran d'une combustion comporte de nombreux paramètres (figure A3.3).

Les trois principaux modes de calcul sont les suivants :

L'option "Calculer lambda" détermine le facteur d'air lambda ( $\geq 1$ ), à partir de la valeur de la température de fin de combustion  $T_c$  imposée.

L'option "Calculer T" détermine  $T_c$  à partir de la valeur de lambda imposée.

Dans les deux cas, le débit de la transfo "combustible" est ajusté pour que le rapport entre les débits volumiques de comburant et de combustible soit égal au facteur d'air.

L'option "Imposer le débit de combustible" détermine lambda et  $T_c$  à partir des caractéristiques du combustible et du comburant.

Le débit masse de la transfo en cours d'évaluation (la combustion) est quant à lui égal à la somme des débits de combustible et de comburant, ce qui signifie que la transfo combustion se comporte, sur le plan hydraulique, comme un mélangeur de débits.

Modéliser et simuler les technologies énergétiques (extraits résumés)

Figure A3.3 : Ecran d'une transfo combustion

Pour les autres paramétrages, lorsque la combustion a lieu en système ouvert, on choisit généralement la pression imposée par le point amont, ce qui signifie que la chambre de combustion est isobare.

Pour une utilisation simple de ThermoOptim, ces paramétrages suffisent.

Nous avons supposé dans ce qui précède que la combustion était complète, alors qu'il arrive que ce ne soit pas le cas, notamment à haute température, et que des imbrûlés apparaissent dans les fumées. On parle alors de dissociation.

Si, partant d'une telle situation, on baisse progressivement la température du milieu réactif, on constate qu'à partir d'un certain seuil sa composition se stabilise et ne varie plus. On dit qu'il y a figeage de la réaction et on appelle température de figeage la valeur de ce seuil.

ThermoOptim peut prendre en compte ce phénomène lorsque le mode dissociation est coché, et si on lui indique d'une part le taux de dissociation du CO<sub>2</sub> en CO, et d'autre part la valeur de la température de figeage (figure A3.4).

type énergie   débit imposé

point amont   débit   système fermé  observée

système ouvert

T (°C)

P (bar)   type CHa

h (kJ/kg)   prémélangé

titre   dissociation

point aval

T (°C)

P (bar)

h (kJ/kg)   Calculer lambda

titre   Calculer T

Imposer le débit de combustible

dissociation imposée

Figure A3.4 : Ecran d'une transfo combustion avec dissociation

Dans cet exemple, le taux de dissociation du CO<sub>2</sub> en CO a été fixé à 5 %, et la valeur de la température de figeage à 900 °C.

| nom du composant | fraction molaire | fraction massique |
|------------------|------------------|-------------------|
| CO <sub>2</sub>  | 0,03215996       | 0,04949052        |
| H <sub>2</sub> O | 0,05980526       | 0,03767364        |
| O <sub>2</sub>   | 0,141611         | 0,1584484         |
| N <sub>2</sub>   | 0,7576949        | 0,7421938         |
| Ar               | 0,00872887       | 0,0121936         |

Figure A3.5 : Composition des fumées sans dissociation

L'impact de ce changement de paramétrage sur la composition des fumées est illustré par les figures A3.5 et A3.6 : du monoxyde de carbone CO et de l'hydrogène H<sub>2</sub> apparaissent en cas de dissociation.

| nom du composant | fraction molaire | fraction massique |
|------------------|------------------|-------------------|
| CO <sub>2</sub>  | 0,03190146       | 0,04922332        |
| H <sub>2</sub> O | 0,05998129       | 0,03788505        |
| O <sub>2</sub>   | 0,1402274        | 0,1573177         |
| N <sub>2</sub>   | 0,755047         | 0,7415677         |
| CO               | 0,001679024      | 0,001648873       |
| H <sub>2</sub>   | 0,002465598      | 0,0001742601      |
| Ar               | 0,008698243      | 0,01218314        |

Figure A3.6 : Composition des fumées avec dissociation