

Etude de l'auto-inflammation de l'éthanol à haute pression et basse température

Y. Zhang^{1,2}, H. El Merhubi³, B. Lefort³, A. Kéromnès³,
L. Le Moyne³, H.J. Curran²

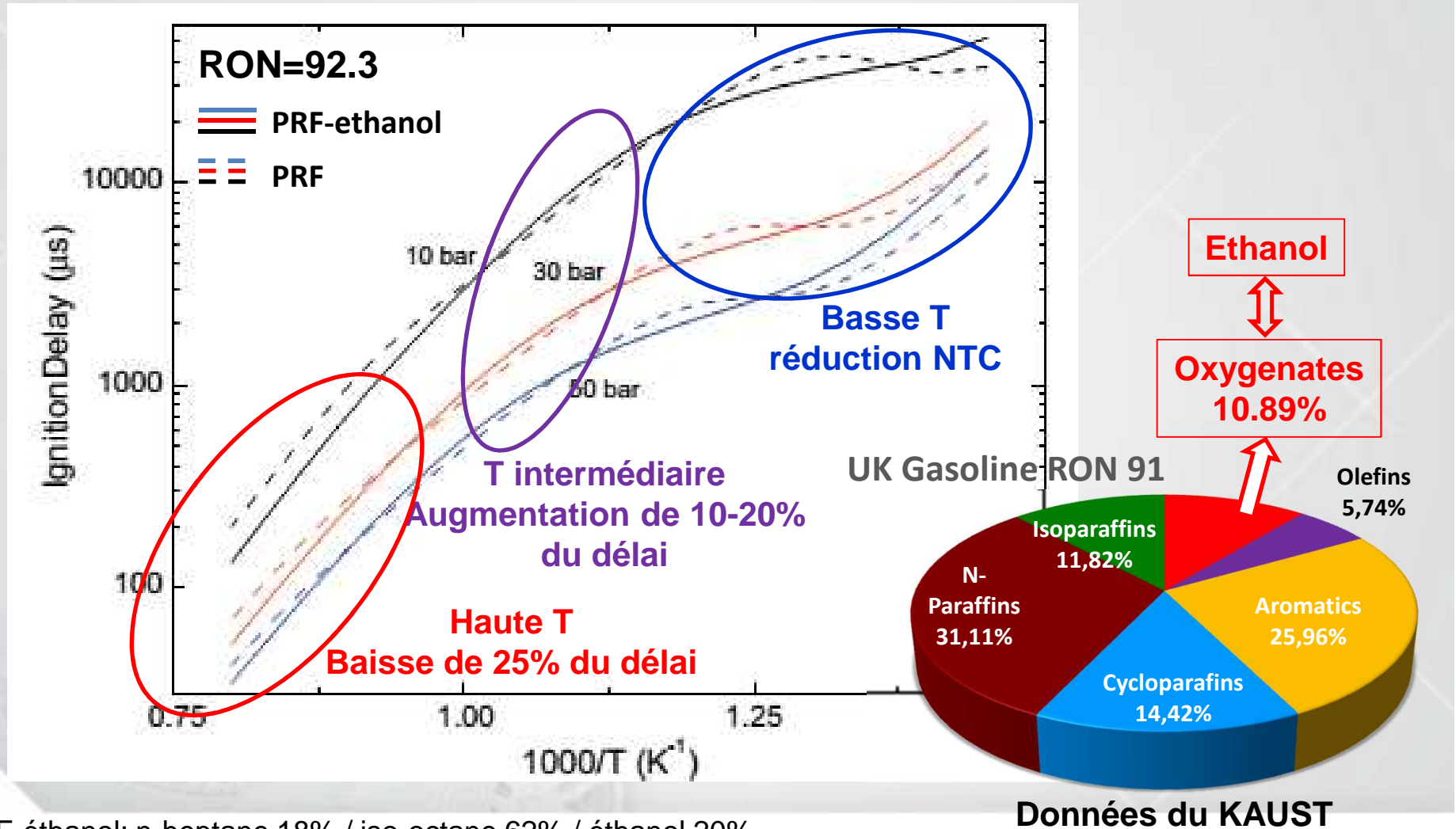
(1) State Key Laboratory of Multiphase Flow in Power Engineering, Xi'an Jiaotong University, Xi'an, Chine

(2) Combustion Chemistry Centre, National University of Ireland, Galway, Irlande

(3) DRIVE EA 1859, Université de Bourgogne Franche-Comté, Nevers, France

Contexte

Effet de l'éthanol sur la réactivité des mélanges « Surrogates »

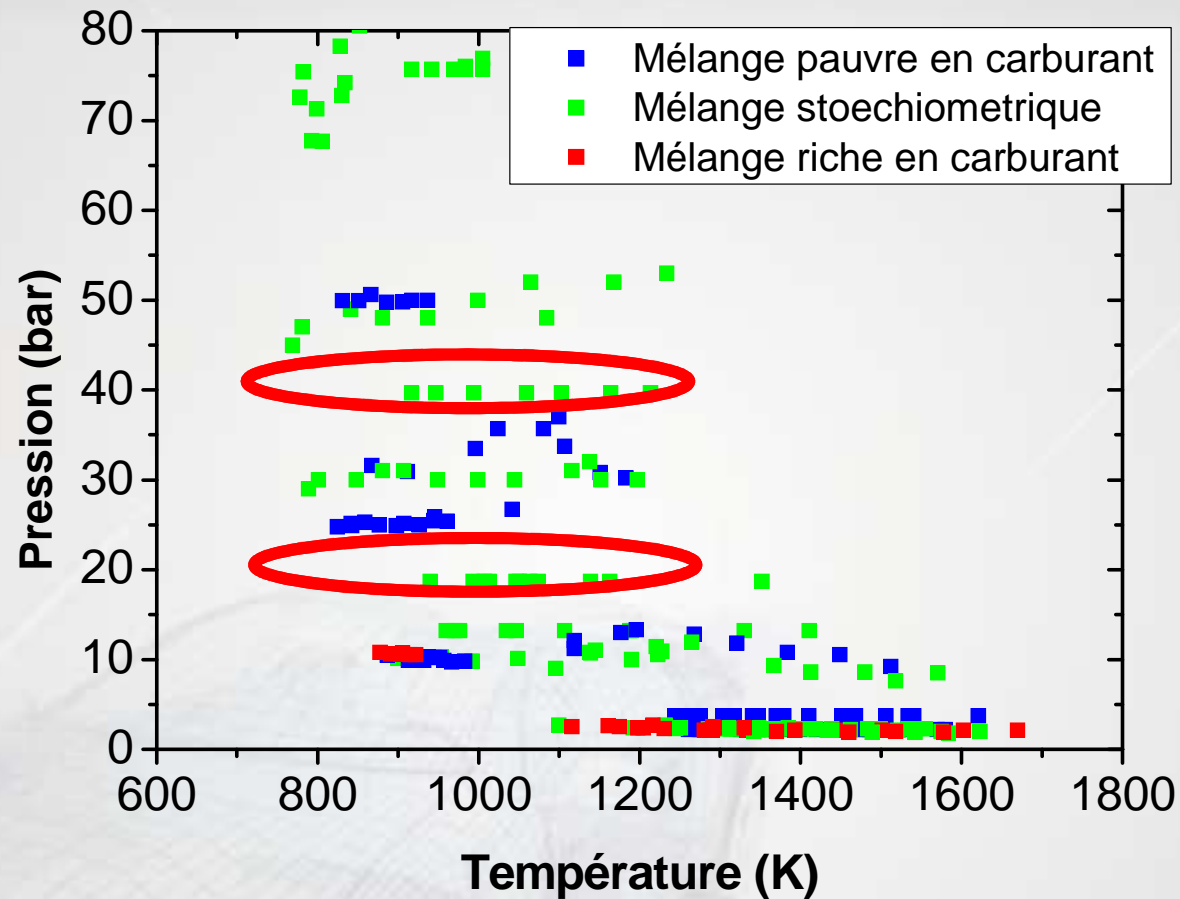


PRF-éthanol: n-heptane 18% / iso-octane 62% / éthanol 20%

PRF: n-heptane 7,7% / iso-octane 92,3%

[1] Haas et al., CNF, 2009: 116: 2346-2350

Contexte

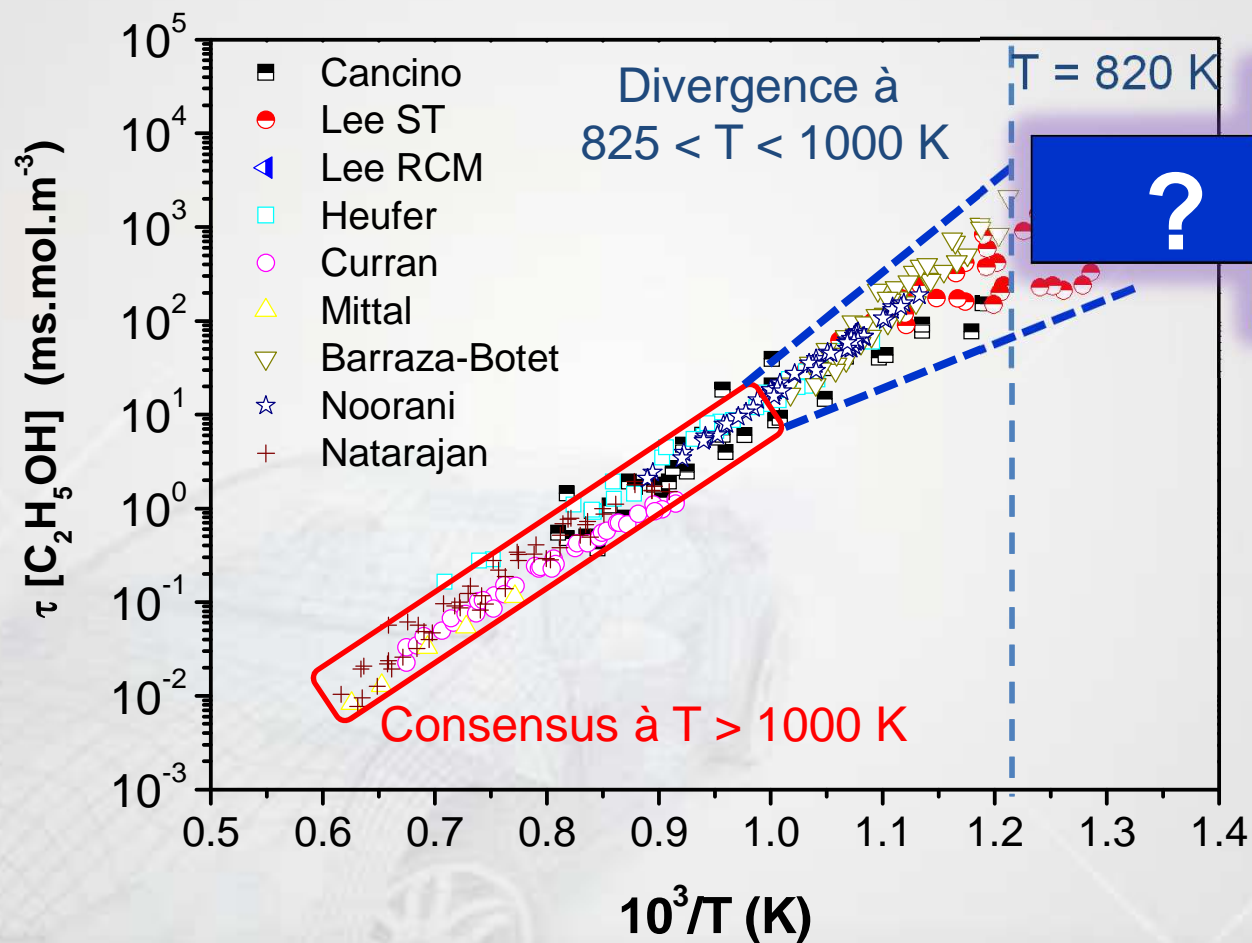


Données principalement disponibles à basse pression (< 10 bar)

*Besoin de données dans les conditions réelles :
Haute pression et carburant dans l'air*

Motivation

Questionnement des résultats à basse T



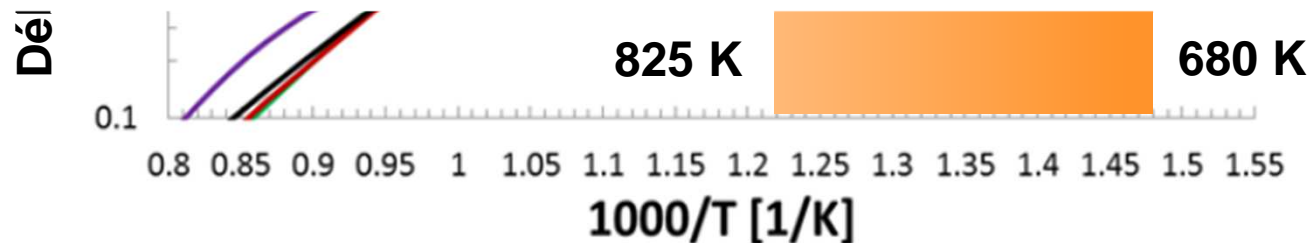
Stratégie expérimentale

Simulation à richesse 1 à volume constant (Mécanisme de Mittal et al.)



But de cette étude

- ❑ Fournir de nouvelles données expérimentales pour identifier la fiabilité des modèle d'éthanol aux basses températures
- ❑ Comprendre si quelques réactions à basse température sont manquantes pour l'éthanol



Les dispositifs expérimentaux



Machine à Compression Rapide (NUI Galway)

Pression : 10 – 40 bar

Température : 600 – 1100 K

Temps de compression : 15 ms

Données : Délai d'auto-inflammation 2 – 200 ms



Tube à Choc (DRIVE)

Pression : 10 – 40 bar

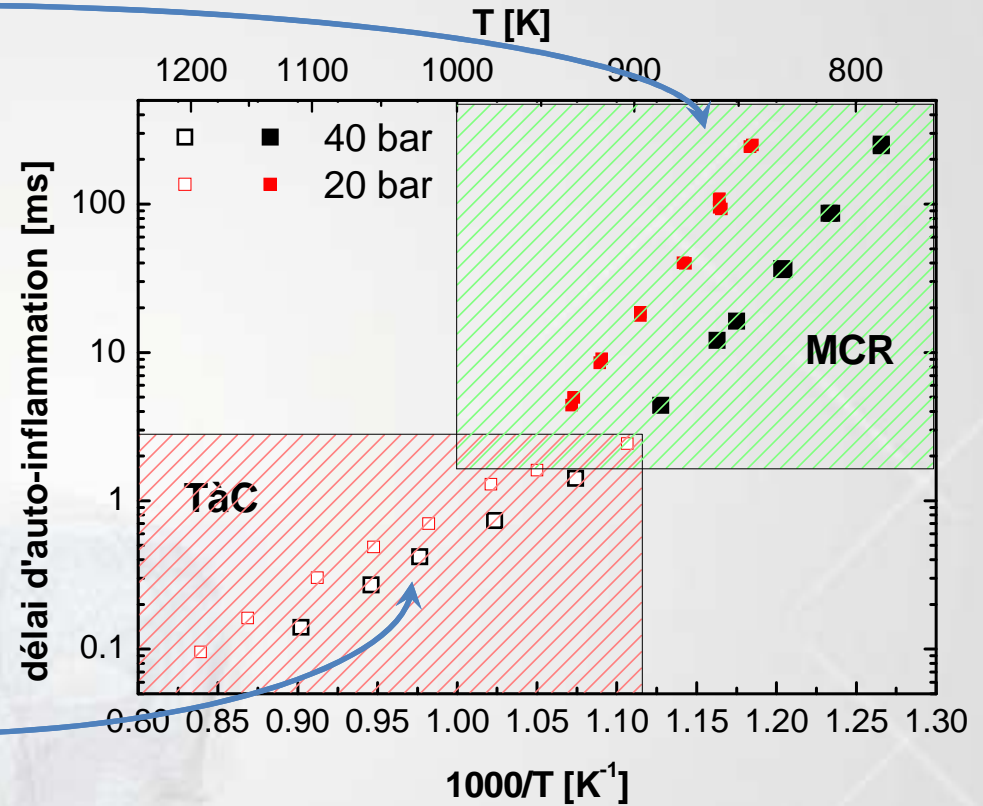
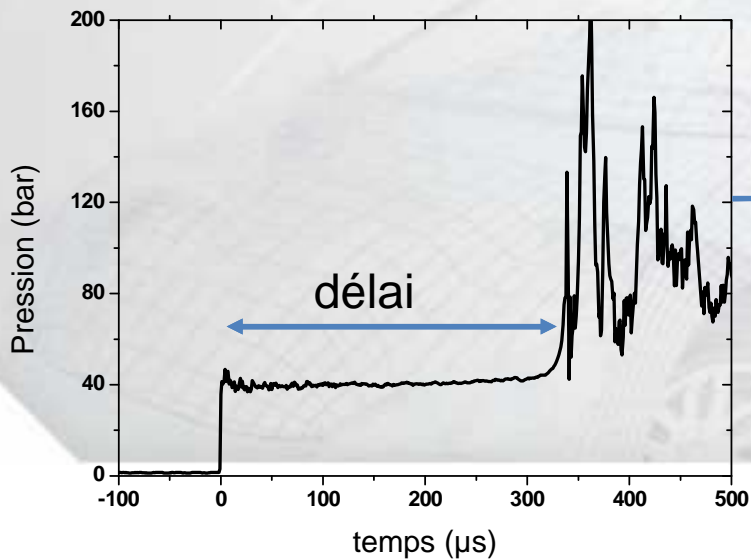
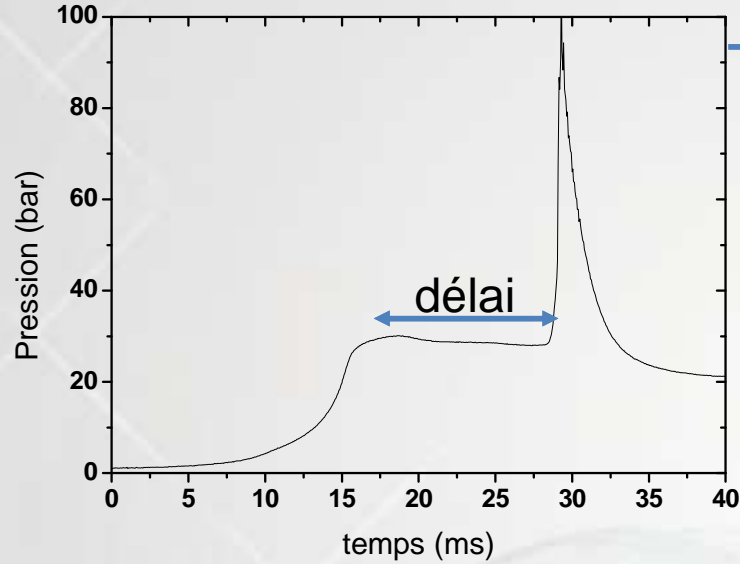
Température : 850 – 1800 K

Vitesse de l'onde de choc : 700 – 1000 m / s

Données : Délai d'auto-inflammation 40 – 2000 μ s

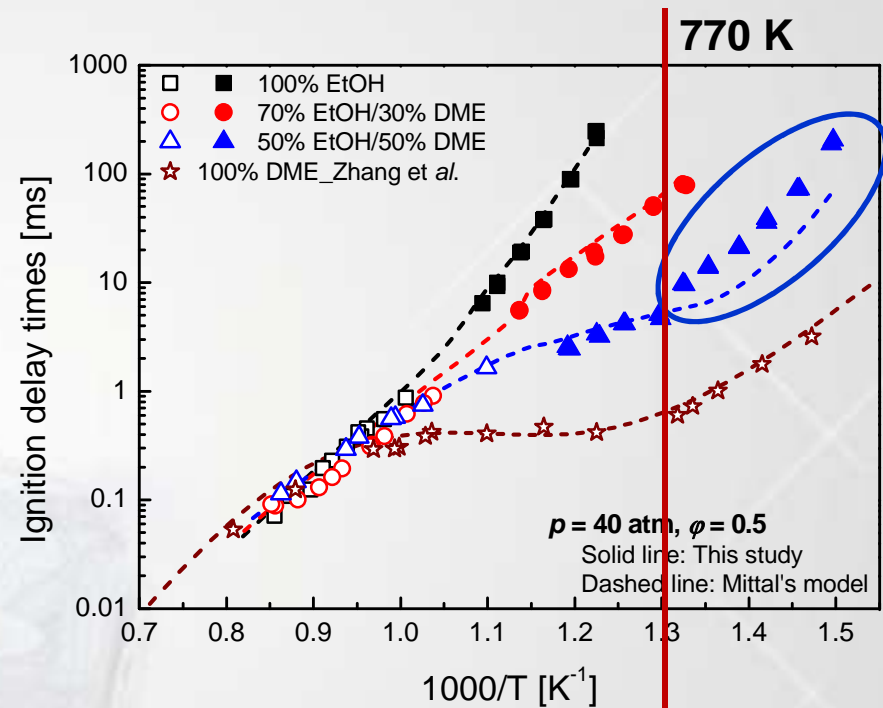
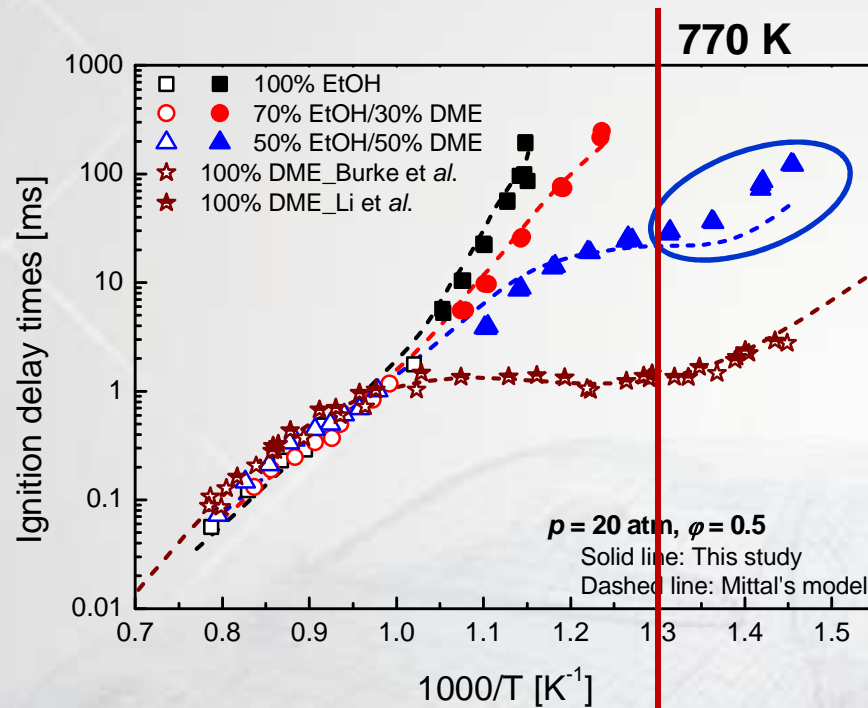
Les dispositifs expérimentaux

Mélange carburant dans l'air ($O_2 + 3,76 N_2$)



Performance du modèle initial

Mécanisme initial : combinaison des mécanismes de Mittal (éthanol) et Burke (DME) issus de AramcoMech 1.3



Prédiction d'une trop grande réactivité des mélanges 50% DME + 50% éthanol pour $T < 770 \text{ K}$

[1] Mittal et al., CNF, 2014, 161: 1164-1171.

[2] Burke et al., CNF, 2015, 162: 345-330.

[3] Zhang et al, PCI, 2017, 36, 413-421.

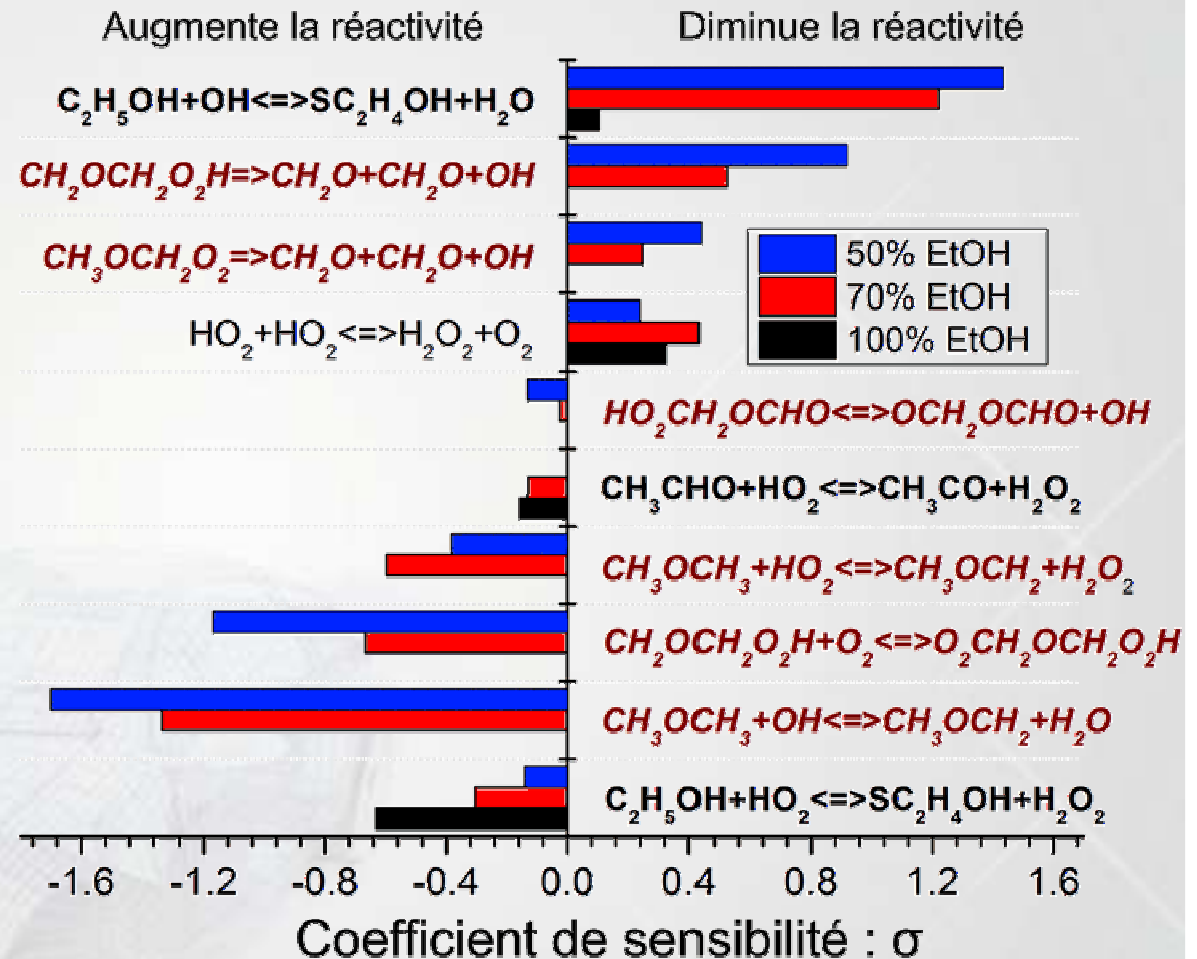
[4] Li et al, IJCK, 2001, 33,859-867.

Cinétique chimique

Analyse de sensibilité
à 770 K et 20 bar

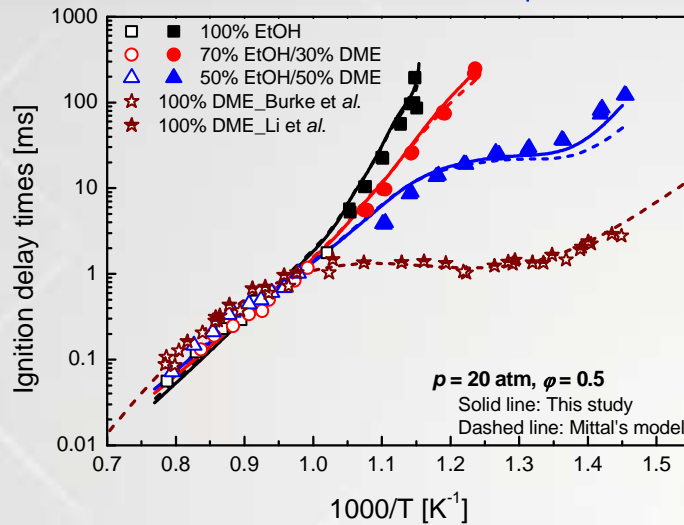
$$k = A T^n e^{-Ea/RT}$$

$$\sigma = \frac{\ln(\tau_{x2}/\tau_{\div 2})}{\ln(k_+/k_-)} = \frac{\ln(\tau_{x2}/\tau_{\div 2})}{\ln(4)}$$

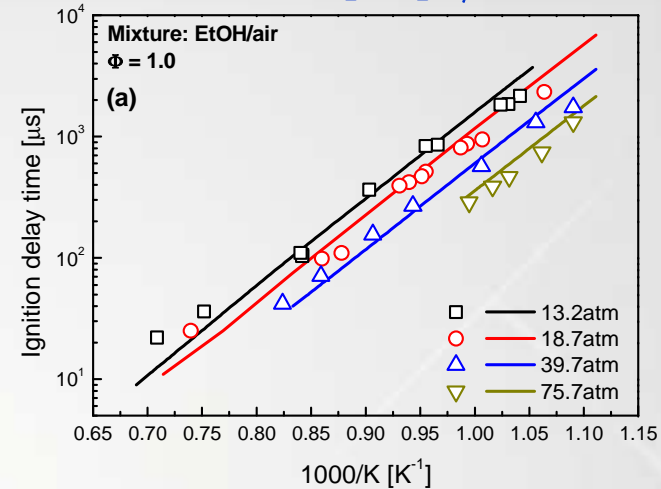


Performance du nouveau mécanisme

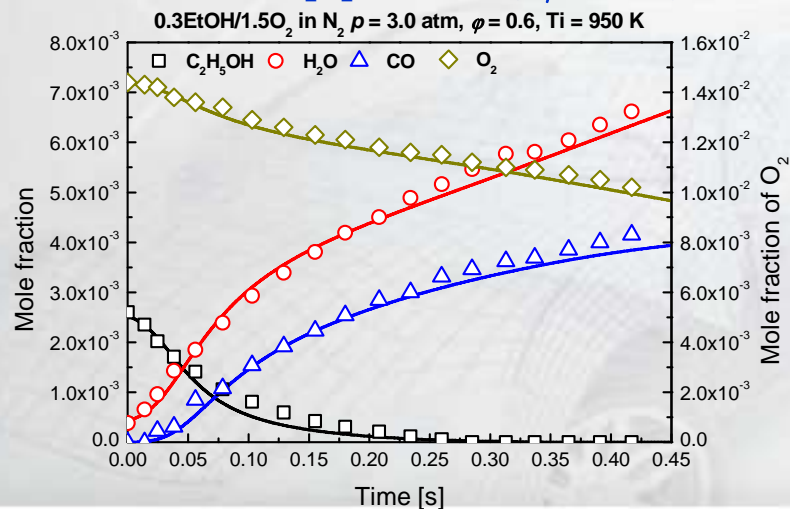
EtOH/DME 20 atm, $\phi = 0.5$



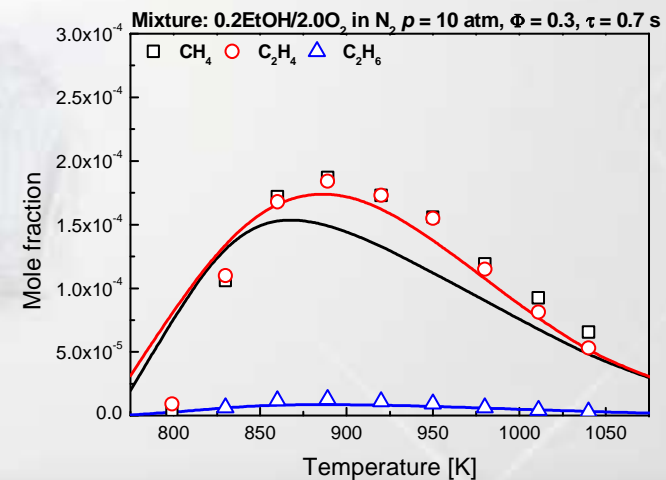
EtOH data [1,2], $\phi = 1.0$



EtOH FR data [3] 1.3 atm, $\phi = 1.3$, 950 K

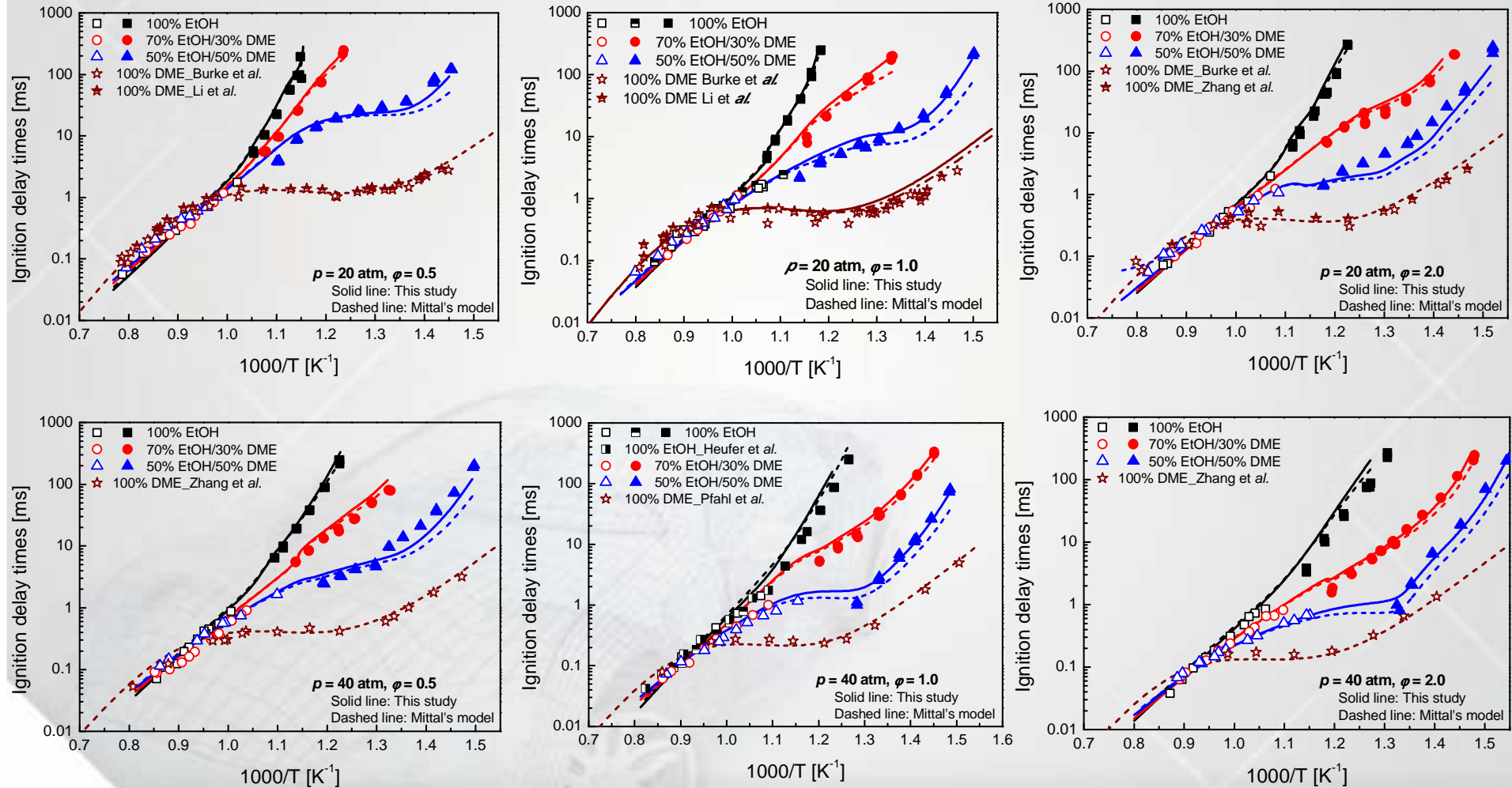


EtOH JSR data [4] 10 atm, $\phi = 0.3$

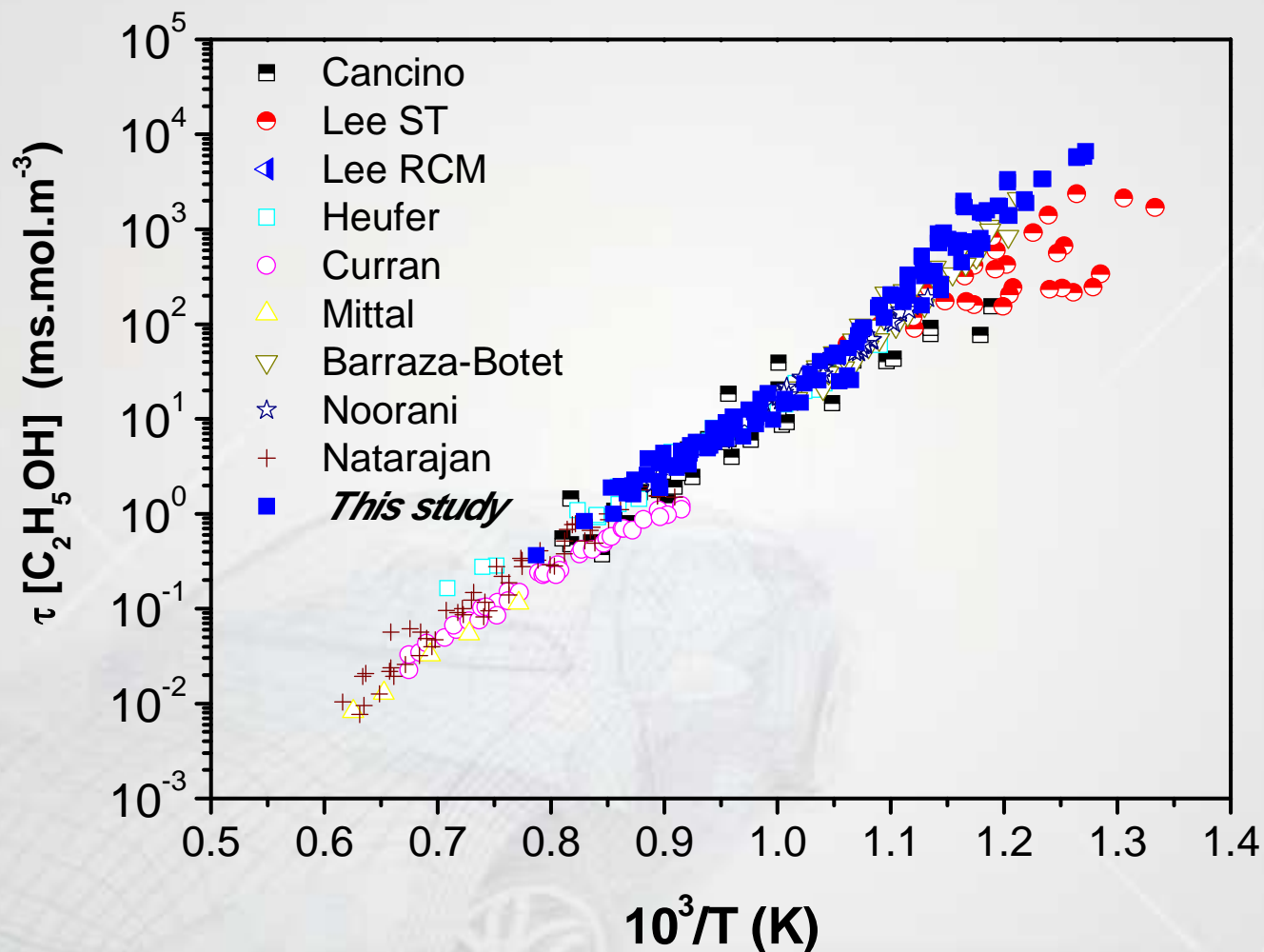


- [1] K.A. Heufer and H. Olivier, Shock Waves, 2010, 20: 307-316.
 [2] C. Lee et al, Z.P.C., 2012, 226, 1-28.
 [3] N. Leplat, et al., Combustion and Flame, 2011, 158: 705-725.
 [4] Li et al., 5 th US Combustion Meeting, 2007

Impact du mélange à basse température



Réduction de l'incertitude à basse T



Conclusion

- Nouveaux résultats expérimentaux en tube à choc et MCR pour étudier la chimie basse température de l'éthanol
- Mécanisme de Mittal performant pour l'éthanol mais pas pour les mélanges 50% DME + 50% éthanol
- Amélioration du mécanisme avec les constantes de réactions issues des derniers résultats expérimentaux et de la modélisation
- Conservation de la performance du mécanisme sur les autres résultats de la littérature

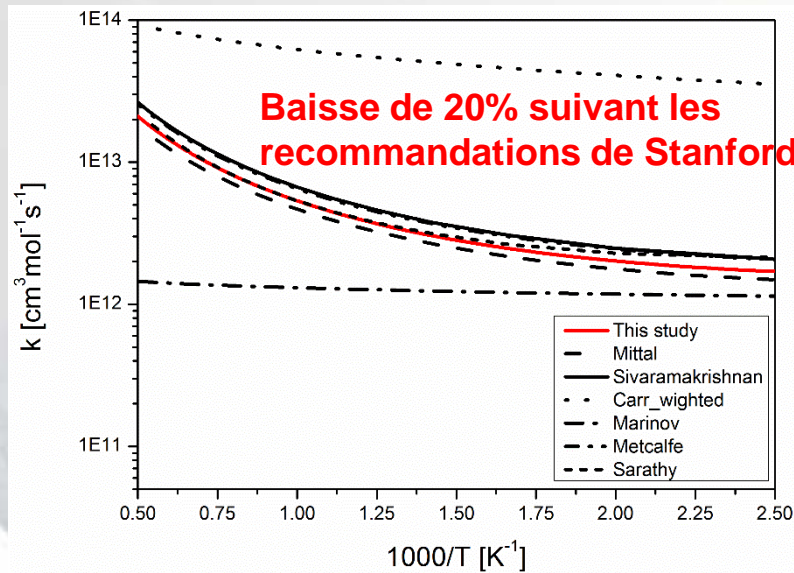
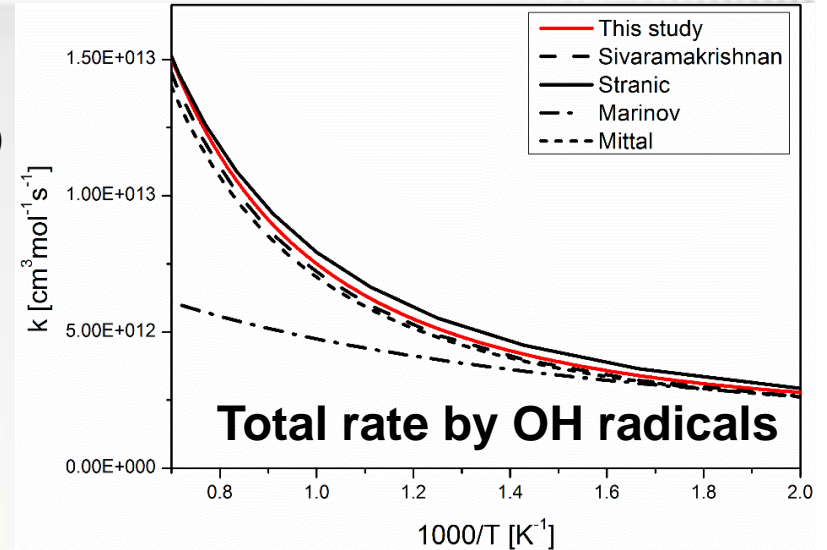
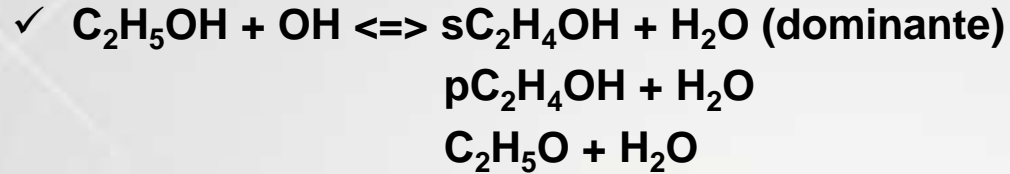
Merci de votre attention

REGION
BOURGOGNE
FRANCHE
COMTE

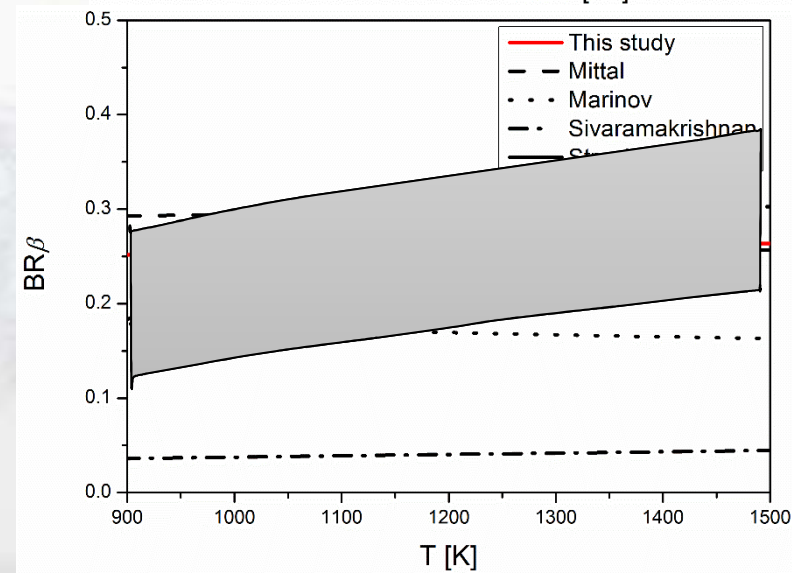


Mécanisme cinétique

Réactions d'initiation



(a) $sC_2H_4OH + H_2O$



(b) Rapport entre les branches 1 et 2

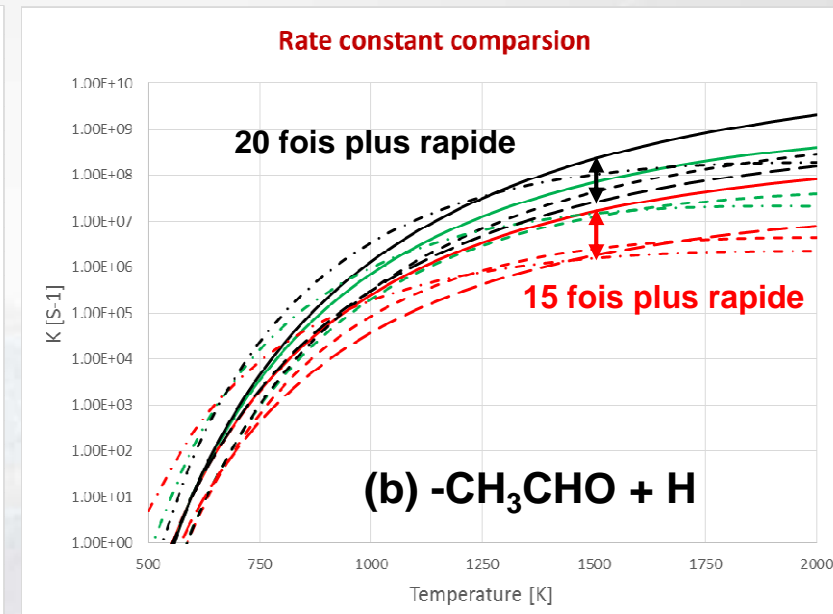
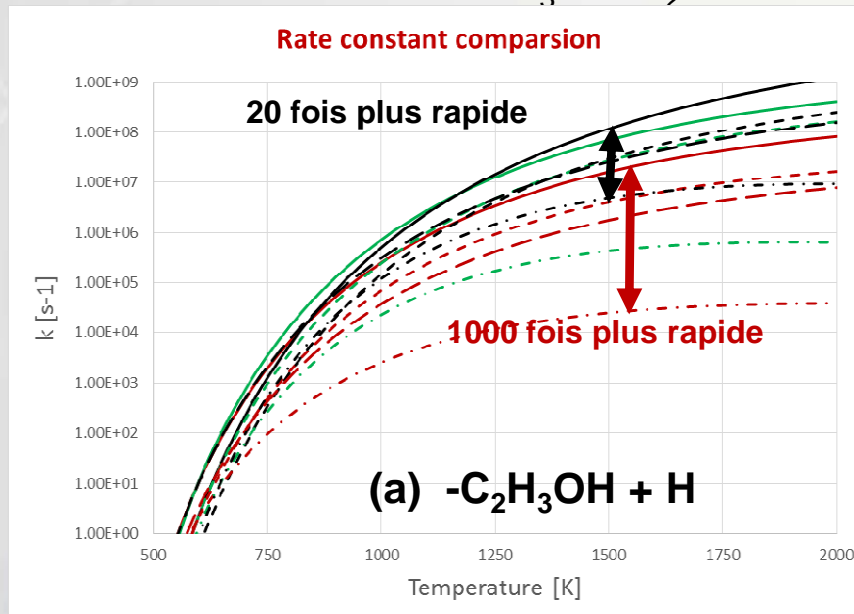
Mécanisme cinétique

- **Décomposition du radical**

- ✓ $\text{SC}_2\text{H}_4\text{OH} \rightleftharpoons \text{CH}_3\text{CHO} + \text{H}$ (dominant)
- $\text{C}_2\text{H}_3\text{OH} + \text{H}$ (dominant)
- $\text{C}_2\text{H}_5\text{O}$
- $\text{CH}_3 + \text{CH}_2\text{O}$

— 1 bar
— 10 bar
— 100 bar

— Dames [1]
- - Xu et al. [2]
- - - Metcalfe [3]
- · - Cai [4]



Très fortes disparités

Choix de Metcalfe pour la précision en tube à choc et réacteur

- [1] Dames., IJCK, 2014, 46(3): 176-188.
 [2] Xu et al., ChemPhysChem, 2009, 10(6): 972-982.
 [3] Metcalfe et al., IJCK, 2013: 45 (10): 638-675.
 [4] Cai et al., Energy & Fuels, 2012, 26(9): 5550-5568.