

PROGRAMME

LUNDI 11 MAI, MATIN

- ⇒ Cinétique chimique appliquée à la combustion.
- ⇒ Présentation des méthodes ab initio pour l'étude des réactions élémentaires impliquées dans les processus de combustion en phase gazeuse.

MARDI 12 MAI, MATIN

- ⇒ Modélisation cinétique des mécanismes complexes et simulations.
- ⇒ Présentation des principaux cycles thermodynamiques dans lesquels intervient le processus de combustion.

MERCREDI 13 MAI, MATIN

- ⇒ Combustion dans les moteurs à combustion interne (adaptation moteur-carburant).
- ⇒ Modélisation thermodynamique des milieux réactifs.
Critères de choix d'un modèle thermodynamique.

LUNDI, MARDI, MERCREDI, APRÈS-MIDI

- ⇒ Calcul de grandeurs thermodynamiques et cinétiques (calculs ab initio).
- ⇒ Etude expérimentale d'une réaction de combustion.
Mesure expérimentale d'une vitesse de flamme.
- ⇒ Etude énergétique d'un cycle thermodynamique.

Rencontre avec Michel Dirand, professeur ENSIC et Président de l'épreuve des TIPE.

Coordinateur : Romain Privat

Responsable scientifique du stage : Prof. R. Fournet

Enseignants : B. Sirjean, O. Herbinet, P-A Glaude, R. Privat, J-N Jaubert.

L'inscription au stage est gratuite. L'ENSIC prend à sa charge les frais de transport ainsi que les déjeuners des participants.

Les candidatures sont acceptées dans l'ordre d'arrivée.

Plus d'informations et inscription en téléchargeant le bulletin sur le site Internet : www.ensic.univ-lorraine.fr

Contact : Christine Le Gall - Service Communication
03.83.17.52.93
christine.legall@univ-lorraine.fr



STAGES DE PERFECTIONNEMENT 2015

Physico-chimie de la combustion : de la molécule aux machines thermiques

11, 12 et 13 mai 2015

Cinétique chimique

Thermodynamique

Chimie quantique

La combustion est un processus physico-chimique omniprésent dans nos sociétés qui est à l'origine d'environ 90 % de la production d'énergie mondiale. Dans un contexte d'augmentation régulière du coût de l'énergie et d'injonction à réduire les émissions polluantes, l'optimisation énergétique et environnementale des procédés dans lesquels les réactions de combustion occupent un rôle central, devient un enjeu d'avenir majeur. La réponse à apporter à cette problématique passe par une meilleure compréhension à la fois des mécanismes réactionnels et des procédés de conversion d'énergie.

Dans le cadre de ce stage, nous aborderons dans un premier temps le processus de combustion à partir d'une approche physico-chimique qui consistera à placer la réaction au cœur du processus. Nous verrons comment différentes disciplines scientifiques comme la chimie quantique associée à la modélisation moléculaire, la cinétique chimique ainsi que la thermodynamique permettent d'apporter des informations capitales sur la compréhension de la combustion et permettent une meilleure analyse des phénomènes qui s'y déroulent. D'un point de vue théorique, nous utiliserons des outils de la chimie quantique (méthodes *ab initio*) pour étudier des réactions élémentaires intervenant en combustion : étude de chemins réactionnels, identification des états de transition, calcul de la constante de vitesse ... Nous verrons aussi comment il est possible de construire, *a priori*, des mécanismes cinétiques détaillés permettant de prédire à la fois la réactivité globale de la réaction de combustion mais aussi la formation des polluants.

Dans un second temps, nous présenterons les différents cycles thermodynamiques et les procédés associés de production d'énergie dans lesquels la réaction de combustion occupe une place centrale. Les méthodes thermodynamiques utilisées pour modéliser les mélanges réactifs circulant dans les procédés seront discutées.

D'autre part, plusieurs dispositifs expérimentaux dédiés à la mesure des cinétiques en réacteurs « idéaux » (0D ou 1D) seront présentés et permettront de réaliser des expériences dans le cadre des travaux pratiques. Ces approches expérimentales illustreront la méthodologie utilisée pour suivre la réaction de combustion, notamment, à travers l'identification et le dosage d'espèces formées au cours de la réaction.

Enfin, une séance pratique sur ordinateur sera consacrée à la modélisation d'un procédé de conversion d'énergie et à son étude énergétique.

- **Nombre de stagiaires**
20 maximum
- **Date limite d'inscription**
10/04/15
- **Début du stage**
11 mai à 08 h 30
- **Fin du stage**
13 mai à 16 h 30

Public visé : Professeurs de chimie et de physique



ENSIC