



**RE.CO.R.D.**

**ETUDE N° 91-0201/3A**

**SYNTHESE DE L'ETUDE**

**FRANÇAIS**

**INFLUENCE DE LA PRESENCE DE DERIVES HALOGENES SUR LA  
CINETIQUE DE COMBUSTION D'UN HYDROCARBURE**

**septembre 1994**

**Ch. VOVELLE - Laboratoire de Combustion et Systèmes Réactifs CNRS ORLEANS**

<p><b>OBJECTIFS DE LA RECHERCHE</b></p>	<p>Étudier les mécanismes de combustion d'un <b>combustible modèle</b> (le méthane) en présence, ou non, <b>de dérivés chlorés simples</b> avec pour objectif, l'optimisation des paramètres de conduite d'un incinérateur en regard de l'impact sur l'environnement.</p>
<p><b>RÉSUMÉ DES ACQUIS TECHNIQUES et SCIENTIFIQUES</b></p>	<p>a) Un dispositif expérimental original a été utilisé pour l'étude des flammes avec pour combustible de référence, <b>le méthane</b> et ajout de composés chlorés (HCl, CH<sub>3</sub>Cl, CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>).</p> <p>b) L'étude des mécanismes réactionnels a été abordée par l'analyse des réactifs, des produits principaux, des composés intermédiaires et des sous produits chlorés (CH<sub>3</sub>Cl, CH<sub>2</sub>Cl, ClOH, ClO, Cl, HCl). On a constaté que la présence de composés chlorés dans la flamme de méthane conduit à un accroissement des espèces intermédiaires insaturées (C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>,...) généralement considérées comme précurseurs des suies et autres "lourds".</p> <p>c) La confrontation des profils de fractions molaires simulés aux profils mesurés a permis de valider un <b>mécanisme cinétique détaillé</b>. Certaines voies réactionnelles de formation de HCl, Cl<sub>2</sub> et C<sub>2</sub>H<sub>2</sub> sont proposées.</p>
<p><b>ANALYSE DU CONTENU DE L'ÉTUDE</b> Points forts / Points faibles</p>	<p><b>Points Forts :</b></p> <p>Ce travail a permis la mise au point de modèles <b>prédictifs</b> performants et validés sur le comportement thermique de molécules simples.</p> <p><b>Points faibles</b></p> <p>Les systèmes simples faisant l'objet de ces études sont évidemment éloignés de la réalité industrielle. Il reste donc à étendre l'utilisation de ces modèles à des cas réels plus complexes.</p>

<b>CONCLUSIONS GÉNÉRALES APPLICATION PRATIQUE ET DOMAINE D'UTILISATION</b>	Nous disposons maintenant de <b>modèles cinétiques</b> et thermodynamiques permettant de <b>prévoir le comportement</b> de dérivés halogénés dans une flamme et ainsi d'optimiser les paramètres de conduite d'un incinérateur.
<b>MOTS CLEF</b>	Incineration - Dérivés halogénés - Hydrocarbures - Cinétique- Thermodynamique - Mécanismes - Modélisation - HCl - Cl <sub>2</sub> - C <sub>2</sub> H <sub>2</sub>

# SOMMAIRE

INTRODUCTION.....	1
I. COMBUSTION DU METHANE.....	5
II COMBUSTION DES HYDROCARBURES CHLORES.....	7
III TECHNIQUES ET METHODES EXPERIMENTALES.....	29
IV TRAITEMENT DES DONNEES.....	43
<b>PRESENTATION ET DISCUSSION DES RESULTATS</b>	
V ETUDE DE LA FLAMME DE METHANE.....	55
VI ETUDE DES FLAMMES AVEC ADDITIFS CHLORES.....	77
VII CONFRONTATION MODELE-EXPERIENCE. FLAMME CH <sub>4</sub> + HCl.....	113
VIII CONFRONTATION MODELE-EXPERIENCE. FLAMME CH <sub>4</sub> + CH <sub>3</sub> Cl.....	135
IX CONFRONTATION MODELE-EXPERIENCE. FLAMME CH <sub>4</sub> + CH <sub>2</sub> Cl <sub>2</sub> .....	157
X INFLUENCE DU CHLORE SUR LA FORMATION DE C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> ET C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> .....	181
CONCLUSION.....	201
REFERENCES.....	203
ANNEXE A1.....	209
ANNEXE A2.....	217
ANNEXE A3.....	221
ANNEXE A4.....	229