

UNIVERSITÉ DU QUÉBEC

MÉMOIRE PRÉSENTÉ À

L'UNIVERSITÉ DU QUÉBEC À TROIS-RIVIÈRES

COMME EXIGENCE PARTIELLE

DE LA MAÎTRISE EN PHYSIQUE

PAR

WENJUAN XIAO

PROPAGATION DE FLAMMES D'HYDROGÈNE EN PRÉSENCE D'OBSTACLES

JUIN 2001

2050

Université du Québec à Trois-Rivières

Service de la bibliothèque

Avertissement

L'auteur de ce mémoire ou de cette thèse a autorisé l'Université du Québec à Trois-Rivières à diffuser, à des fins non lucratives, une copie de son mémoire ou de sa thèse.

Cette diffusion n'entraîne pas une renonciation de la part de l'auteur à ses droits de propriété intellectuelle, incluant le droit d'auteur, sur ce mémoire ou cette thèse. Notamment, la reproduction ou la publication de la totalité ou d'une partie importante de ce mémoire ou de cette thèse requiert son autorisation.

Remerciements

Le travail présenté dans ce mémoire a été effectué au sein de l'Institut de Recherche sur l'Hydrogène (IRH). Les personnes que j'ai rencontrées à l'IRH m'ont apporté une aide inestimable et m'ont aidé à progresser dans mes études de maîtrise. Ces personnes méritent les remerciements qui leur reviennent.

Tout d'abord, j'aimerais adresser mes remerciements les plus sincères à mon directeur, Monsieur T.K.Bose, professeur au département de physique de l'U.Q.T.R et directeur de l'IRH qui a fait preuve de beaucoup d'attention. Je veux lui témoigner ma gratitude pour le support financier qu'il m'a fourni.

Des remerciements particuliers vont à mon codirecteur, Monsieur Pierre Bénard, professeur au département de physique de l'U.Q.T.R, qui a dirigé ce travail et m'a supporté financièrement. Son appui a été d'une aide précieuse. Ses judicieux conseils et ses explications pertinentes m'ont aidé à apprendre non seulement la théorie mais aussi la façon de mener à bien un travail de recherche.

Je tiens également à remercier mes collègues à l'IRH pour leurs aides amicales et des discussions agréables. Je veux souligner l'aide du docteur Bernard Pons, chercheur chez AVL, Paris et de Jan Kopitz, étudiant au doctorat de l'Université Technique de Munich, Allemagne, qui ont fait des stages de recherche à l'IRH. Ils méritent mes sincères remerciements. Je remercie profondément les professeurs du département de physique pour l'enseignement qu'ils m'ont prodigué, notamment Messieurs Louis Machilldon et Paul Lafrance, pour leurs conseils judicieux.

Des remerciements sont offerts à Monsieur Jacques Goyette, professeur du département de physique, Monsieur Jean-Marie St-Arnaud, professeur du département de physique et directeur adjoint de IRH, et Monsieur Bernard Pons, pour leur contribution précieuse lors de la rédaction de ce mémoire.

Finalement, je désire souligner toute ma gratitude à mon époux Jianhong Xu pour sa compréhension et son soutien extraordinaire.

Résumé

L'utilisation de l'hydrogène, en tant que vecteur énergétique propre et renouvelable, devient de plus en plus attrayante en raison des pressions environnementales et de l'efficacité supérieure des piles à combustibles sur le moteur à combustion interne. Un des obstacles à son introduction dans le marché demeure son utilisation sécuritaire.

L'hydrogène possède en effet une vaste plage de détonabilité et une faible énergie minimale d'allumage à concentration stochiométrique. L'un des problèmes sécuritaires les plus importants réside dans la faculté d'accélération de la flamme dans des géométries confinées en présence d'obstacles. Ces derniers peuvent en effet, en générant de la turbulence, faire passer une déflagration relativement lente à une déflagration rapide ou même une détonation, qui s'accompagnent d'une surpression dangereuse pour les êtres humains et les structures. L'objectif de ce travail est l'étude de la propagation de flammes d'hydrogène dans des mélanges pré-mélangés d'hydrogène et d'air en présence d'obstacles. Nous utilisons la méthode des volumes finis pour effectuer une étude numérique de la propagation de flamme, de même qu'une approche à une équation globale de type Arrhénius dissipation de vortex pour modéliser le taux de réaction chimique. Nous étudions également la limite d'applicabilité d'un schéma réactionnel plus élaboré à cinq équations. La turbulence est un facteur important qui affecte la vitesse de propagation surtout en présence d'obstacles. Selon le taux de blocage (section obstruée sur section totale de la conduite) et l'arrangement des obstacles, l'accélération de flamme peut être importante. Notre étude porte sur une série d'obstacles disposée dans un tuyau étroit.

Nous comparons nos résultats avec les expériences réalisées au laboratoire de thermodynamique de l'Université Technique de Munich (LAT). Les résultats expérimentaux dans le tube PHD à 11% prédisent la même vitesse de flamme que dans le système avec une chambre d'expansion, la croissance de la vitesse de flamme moyenne est approximativement proportionnelle à l'amplitude moyenne des fluctuations de vitesses. Nos résultats reproduisent qualitativement cette hypothèse.

TABLE DES MATIÈRES

	PAGE
Remerciements	i
Résumé	ii
Table des matières	iii
Liste des figures	vii
Liste des tableaux	ix
Notation	x
Introduction	1

Chapitre 1 Propriétés des flammes d'hydrogène

1.1	Problématique de l'étude de propagation de flammes dans le contexte de l'utilisation sécuritaire de l'hydrogène.....	4
1.2	Types et propriétés de flamme d'hydrogène.....	6
1.2.1	Flamme pré-mélangée et flamme diffusive.....	6
1.2.2	Vitesse de front de flamme.....	8

1.3	Propriétés de combustion de l'hydrogène.....	11
1.3.1	Déflagrations et détonations.....	11
1.3.2	Énergie d'allumage.....	13
1.4	Turbulence et propagation de flammes.....	13

Chapitre 2 Équations du mouvement et modèles de combustion

2.1	Modélisation.....	16
2.1.1	Équations du mouvement.....	16
2.1.2	Équation d'état.....	19
2.1.3	Simulations numériques directes.....	20
2.1.4	Moyenne sur la turbulence : moyenne de Reynolds et moyenne de Favre.....	21
2.1.5	Les équations de conservation moyennées avec la pondération de Favre.....	23
2.2	Modèle de turbulence.....	26
2.2.1	Le modèle $k-\varepsilon$	26
2.2.2	Les tensions de Reynolds.....	26
2.3	Modèles de combustion.....	30
2.3.1	Approche d'Arrhénius.....	31
2.3.2	Modèle de dissipation de vortex (EDM).....	34
2.3.3	Le diagramme de Borghi.....	37
2.3.4	Approche de la distribution de probabilité (pdf).....	39

Chapitre 3 Le schéma réactionnel

3.1	Les mécanismes de réaction hydrogène–air.....	46
3.1.1	Réactions élémentaires et réactions générales.....	46
3.1.2	Réactions élémentaires.....	46
3.2	Mécanisme de réaction choisi pour la simulation.....	48

Chapitre 4 Méthodologie

4.1	Solution numérique d'une équation de conservation.....	51
4.1.1	Discrétisation des équations du mouvement.....	51
4.1.2	Conditions initiales et conditions aux frontières.....	52
4.1.3	Maillage adaptatif	52
4.2	Géométrie utilisée dans les simulations.....	53
4.3	Propriétés thermodynamiques des fluides utilisés lors des simulations.....	55

Chapitre 5 Résultats

5.1	Conditions initiales.....	56
-----	---------------------------	----

5.2	Vitesse de flamme et pression.....	59
5.2.1	Effet des obstacles.....	63
5.3	Interaction entre le front de flamme et la pression.....	71
Conclusion		76
Bibliographie.....		78
Appendice I	Exemple de la méthode des volumes finis.....	80
Appendice II	Calcul des fractions de masses aux conditions initiales.....	84
Appendice III	Une formule pour calculer la vitesse du front de flamme.....	86
Appendice IV	Propriétés thermodynamiques des fluides lors des simulations.....	87

Liste des figures

FIGURE	PAGE
1.1 Vitesses de flamme laminaires et de flamme turbulent pré-mélangé.....	10
1.2 Diagramme schématique d'une onde de combustion stationnaire en une dimension (onde de déflagration ou de détonation). ρ , T et P représentent respectivement la densité, la température et la pression.....	11
2.1 Fluctuations turbulentes de la densité et moyenne sur le temps pour un écoulement instantané[4].....	21
2.2 Le diagramme de Borghi [4].....	38
4.1 Le tube à explosion PHD utilisé dans les expériences du LAT.....	54
4.2 Maillage typique utilisé pour effectuer les simulations.....	54
5.1 Vitesse instantanée et pression en fonction du temps pour un tube sans obstacle, pour une concentration de 11 vol.% H ₂	60
5.2 Vitesse de flamme en fonction de la position. Résultats expérimentaux effectuées à LAT en utilisant le tube PHD pour une concentration de 11 vol.% H ₂ en l'absence d'obstacle.....	62
5.3 Contours de température pour trois temps (t=0.005, 0.01 et 0.015 sec respectivement) avec un mélange de 11vol.% d'hydrogène dans l'air et 4 obstacles.....	64
5.4 Contours de k pour un mélange de 11vol.% d'hydrogène dans l'air et 8 obstacles (t=0.03 secondes).....	64
5.5 Vitesse de flamme en fonction de la position du front de flamme avec 16 obstacles	

et 11 <i>vol.%</i> H ₂	66
5.6 Position en fonction du temps avec 16 obstacles et 13 <i>vol.%</i> H ₂ . Le changement brusque de pente se produit peu après la sortie du réseau d'obstacles, et correspond à une forte accélération.....	67
5.7 Pression en fonction du temps avec 16 obstacles et 13 <i>vol.%</i> H ₂ (au milieu du tube : x= 3.25 m).....	68
5.8 Position du front de flamme en fonction du temps: prédiction de l'approche pdf et résultats expérimentaux pour un mélange de 13 <i>vol.%</i> d'hydrogène et d'air[13]	69
5.9 Pression en fonction du temps : comparaison entre la théorie et l'expérience pour l'approche pdf[13].....	70
5.10 Position de front de flamme en fonction du temps avec 4 obstacles et 11 <i>vol.%</i> H ₂	72
5.11 Pression dynamique en fonction de la position pour une concentration de 11 <i>vol.%</i> H ₂ Par volume et pour un tube avec 4 obstacles, à t = 0.035 seconde.....	73
5.12 Pression dynamique en fonction de la position pour une concentration de 11 <i>vol.%</i> H ₂ et pour un tube avec 4 obstacles, à t = 0.04 seconde.....	74
5.13 Pression dynamique en fonction de la position pour la concentration de 11 <i>vol.%</i> et Pour un tube avec 4 obstacles, à t = 0.045 seconde.....	75
A1.1 Illustration d'une partie du maillage[14].....	80
A1.2 Discrétisation des équations du mouvement autour d'une cellule (i,j).....	82

Liste des Tableaux

TABLEAU	PAGE
1.1 Différences qualitatives entre une détonation et une déflagration.....	12
5.1 Conditions initiales imposées au système. Les fractions de masses s'obtiennent des fractions molaires tel qu'indiqué dans l'appendice II.....	57
5.2 Les valeurs de la zone d'allumage pour le système 11 <i>vol. %</i> H ₂ dans l'air.....	58
5.3 Les valeurs d'allumage pour 13 <i>vol. %</i> H ₂ dans l'air.....	59
5.4 Effet des obstacles sur certaines observables.....	65
A4.1 Les coefficients du polynôme pour chaleur spécifique.....	88

Notation

A_L	Surperficie du front de flamme laminaire
a_t	Coefficient de diffusion thermique turbulent
A_T	Surperficie du front de flamme turbulente en moyenne
A_r	Le facteur pré-exponentiel du taux Arrhénius
B_i	La force volumétrique sur espèces pour un système de composantes multiples
B_k	Le rapport d'obstruction
c	La variable d'évolution
c_l	La vitesse du son local
c_p	Chaleur spécifique
d	La distance de l'obstacle la plus proche
D_a	Nombre de Damkholer turbulent
D_t	Diffusion turbulente
$D_{i,j}$	Coefficient de diffusion de masse binaire
e	L'énergie interne spécifique
\hat{e}	Vecteur de l'unité
E_0	L'énergie d'allumage
e_{ij}	Tenseur de taux
E_k	Énergie d'activation pour la k ième réaction
F_c	Le terme de correction dû à la turbulence
f_k	La force par unité de masse sur la i ième espèce
G_b	Terme source d'énergie cinétique turbulente dû aux effets de gravité.
G_K	Un terme source associé à la production d'énergie cinétique turbulente
h_t	L'enthalpie total
h	L'enthalpie par unité de masse
l_l	L'épaisseur d'une flamme laminaire
J_i	Flux de masse de l'espèce i
k	Énergie cinétique turbulente
K_a	Le nombre de Karlovitz turbulent
K_A	Le paramètre d'Arrhenius
l	l'échelle de longueur associée aux plus gros vortex
L	Largeur caractéristique du système
l_T	L'échelle de largeur de Taylor
m_i	La masse de la i ième espèce
M_i	Masse moléculaire de l'espèce i
M_t	Nombre de Mach turbulent
\bar{n}	Vecteur normal à la face considérée
N_G	Le nombre de maillage
P	Pression totale du système

$P_{0(c)}$	La distribution Gaussienne
P_{π}	Le nombre de Prandtl turbulent pour l'énergie
$p_{(\Phi)}$	La fonction de la densité de probabilité
\bar{q}	Vecteur de flux thermique
\dot{Q}	Le source d'énergie due à la réaction chimique
$\bar{q}_{(\bar{r})}$	Un observable physique sur place \bar{r}
$\bar{q}_{(\bar{r},t)}$	Un observable physique sur place \bar{r} et à l'instant t
R_e	Nombre de Reynolds
R_T	Nombre de Reynolds turbulent
$\hat{R}_{i,r}$	Le taux de formation de l'espèce i dans la réaction r
R_u	Constante universelle des gaz
S	La module du tenseur des contraintes
\bar{S}	La moyenne du taux de la tension
S_{ct}	Nombre de Schmidt turbulent
\bar{S}_{ij}	Contraintes
T	Température adiabatique
\bar{t}	Vecteur tangent à la face considérée
t_0	L'échelle du temps associée aux processus chimiques
t_l	L'échelle du temps associée à la combustion laminaire
t_k	l'échelle du temps de Kolmogorov
u_i	Composante de vitesse dans la direction i
u_i'	La fluctuation de vitesse dans la moyenne de Favre
\tilde{u}_i	La moyenne de Favre de la composante de vitesse
V_T	La vitesse de fluide turbulente
v'	Racine moyenne carrée de la fluctuation de vitesse
V'	Fluctuation de vitesse turbulente caractéristique
V_L	Vitesse de flamme laminaire
\bar{W}	La valeur moyenne pondérée de la masse molaire du mélange
W_i	Le poids de moléculaire i ième espèce
X_i	Fraction molaire de l'espèce i
Y_i	Fraction de masse de l'espèce i
Y_k	La fraction de masse de la k ième espèce
Y_M	Contribution de fluctuation dilatation
α_i	Coefficient de diffusion thermique pour l'espèce i
β_i	Force de volume dans la direction i
ρ	Densité de fluide
ε	Taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulent
ϕ	Richesse
ω_i	Taux de réaction chimique
μ_t	Viscosité turbulente
v_T	Coefficient de transport

τ_{ij}	Tenseur visqueux
η	Viscosité de cinématique
μ	Viscosité laminaire
λ	Conductivité thermique
τ	Le temps caractéristique de réaction
$\tau_{i,j}$	le tenseur des contraintes
$\delta_{i,j}$	Le tenseur de unité
ν''_{ik}	Le coefficient stochiométrique de produit
ν'_{ik}	le coefficient stochiométrique de réactant
Γ_i	Le moment par volume de unité sur la direction
σ_k	Le nombre de Prandtl turbulent pour k
σ_ϵ	Le nombre de Prandtl turbulent pour ϵ
η_r	Le terme de corrélation
ϵ_c	La dissipation du scalaire
$\theta_{(c)}$	La fonction de Haveside
β_r	L'exposant de la température du taux Arrhénius
σ_k	Le nombre de Prandtl turbulent pour k
σ_ϵ	Le nombre de Prandtl turbulent pour ϵ
μ_t	La viscosité turbulent
β	Le coefficient d'expansion thermique

Introduction

Une combustion accidentelle peut se produire à la suite de toute fuite d'hydrogène dans l'atmosphère. Les causes de la fuite peuvent être multiples, comme par exemple, l'ouverture d'une valve de sécurité due à la fatigue du matériel ou à certains types d'accidents mécaniques. Les processus de combustion accidentelle sont des sujets de première importance qui doivent être étudiés dans le contexte de la considération en sécurité des diverses technologies utilisant l'hydrogène. L'expérience montre que la combustion est généralement incomplète lorsque la concentration d'hydrogène se situe entre 4 *vol.%* H₂ et 8 *vol.%* H₂ dans l'air. Le mélange avec plus que 70 *vol.%* H₂ semble être très sensible à l'extinction[1]. On doit noter que la combustion dans un mélange d'hydrogène et d'air au-dessus de la stochiométrie (soit 28 *vol.%* H₂ dans l'air) peut conduire à des combustions multiples successives puisqu'il n'y a pas suffisamment d'air pour oxyder tout l'hydrogène présent.

L'étude du comportement des flammes d'hydrogène constitue un domaine important de recherche pour asseoir l'hydrogène en tant que vecteur énergétique. La majorité des incidents impliquant une combustion accidentelle d'hydrogène semble avoir été initialisée par une faible source d'allumage. Une étincelle dans un mélange hydrogène-air confiné ou partiellement confiné peut conduire à des dommages sévères aux structures environnantes. Par exemple, ce peut être une étincelle due à la décharge électrique statique. L'effet de la friction combiné avec la présence d'une fuite et/ou d'une pénétration d'oxydant dans le mélange peut provoquer l'allumage. Pour une température donnée, l'énergie d'allumage a une valeur minimum qui se trouve à la concentration stochiométrique. Pour un mélange d'air et d'hydrogène, la concentration stochiométrique d'hydrogène dans l'air est d'environ 28 *vol.%* H₂. Cet énergie minimum d'allumage est de 0.019 mJ près du point stochiométrique. L'énergie d'allumage est une fonction de la concentration d'hydrogène dans l'air. Par exemple, cette énergie vaut $E_0 = 0.3$ (mJ) à 15 *vol. %* H₂ et $E_0 = 0.4$ (mJ) pour 13 *vol.%* H₂. La limite de flammabilité pour les mélanges hydrogène et air varie entre 4 *vol.%* et 75 *vol.%* de H₂[2].

En général, lorsqu'une fuite accidentelle d'hydrogène se produit suivie d'un allumage du mélange combustible, il existe des obstacles et des structures favorisant la turbulence. La possibilité que le phénomène d'accélération de flamme se produise devient l'un des problèmes de sécurité le plus important. L'accélération initiale de la flamme après l'allumage détermine le processus global de combustion qui suit, et peut déterminer si une transition de la déflagration à la détonation se produit.

Des expériences montrent qu'une source d'allumage intense ou la présence d'obstacles peuvent causer la transition d'une flamme laminaire à une flamme turbulente. La flamme accélérée est dangereuse puisqu'elle s'accompagne d'ondes de compression qui se transforment en puissantes ondes d'impact. Avec des conditions aux frontières appropriées et un certain degré de confinement, les processus de combustion turbulente rapides dégénèrent souvent en explosion si la vitesse de flamme dépasse 800 m/s[3]. Ces dernières années, plusieurs études sur l'accélération de flamme initiale dans les régions avec obstacles ont été réalisées. Cependant, il n'y a pas encore une loi qui permet de décrire le développement de la flamme, en particulier pour les processus de combustion rapide d'hydrogène dans l'air.

Une théorie analytique complète de la propagation de flammes sous conditions turbulentes n'est pas encore disponible; une étude expérimentale complète et détaillée de cette problématique ne semble pas avoir été effectuée à ce jour. Les techniques de simulations numériques présentent donc un intérêt évident dans ce domaine, puisqu'elles permettent d'isoler le phénomène physique désiré, de faire varier des paramètres précis et de connaître en détails toutes les propriétés de l'écoulement. Cette étude sera consacrée à un aspect particulier mais critique de la sécurité de l'utilisation de l'hydrogène, c'est-à-dire la propagation de flammes. Ce domaine s'intéresse entre autres à la transition de déflagration à détonation, la flamme supersonique, le comportement de la surpression, et la caractérisation de l'accélération de flamme sous conditions turbulentes. Les objectifs spécifiques de ce travail sont d'étudier les changements de la vitesse, de la température et de la surpression sous conditions turbulentes induites par des obstacles et de valider certains modèles de combustion. Le plan de ce travail est le suivant. Nous discuterons d'abord les propriétés et procédures de combustion de l'hydrogène

(chapitre 1), Puis nous déduisons les équations du mouvement décrivant le processus de combustion et nous décrivons les modèles de combustion (chapitre 2), et le schéma réactionnel (chapitre 3). Puisque les équations du mouvement sont non-linéaires, une technique de solution par volume fini est adoptée pour obtenir une solution numérique (chapitre 4). Finalement, nous décrivons et discuterons des résultats des simulations dans le chapitre 5. En fin, on va donner notre conclusion.

Chapitre 1 Propriétés des flammes d'hydrogène

Les processus de combustion non-stationnaires sont caractérisés par un front de réaction en mouvement après l'allumage du mélange de gaz combustible. Les risques associés aux flammes non-stationnaires sont dûs à l'augmentation de la température causée par les réactions exothermiques et à la surpression locale associée au front de flamme. Cependant, l'augmentation de température ne présente souvent pas un problème sérieux pour des structures ou des bâtiments parce que le front de flamme se propage relativement vite et que les structures possèdent une capacité thermique élevée qui absorbe rapidement le surplus de chaleur. Par conséquent, la surpression du front de flamme constitue le problème principal.

1.1 Problématique de l'étude de propagation de flammes dans le contexte de l'utilisation sécuritaire de l'hydrogène

En général, on peut dire que le maximum de la surpression accompagnant la flamme est d'autant plus élevé que la vitesse du front de réaction est plus rapide. Cependant, on doit noter que la charge appliquée aux structures par un front de réaction non stationnaire n'est pas déterminée uniquement par le maximum de la surpression. En effet, elle dépend aussi du temps durant lequel la surpression est présente, c'est-à-dire, l'intégrale de la surpression sur sa durée. Beaucoup de scénarios d'accident reposent sur une combustion accidentelle initialisée par une faible source d'amorçage. À partir de la source d'amorçage avec vitesse très basse, la flamme peut être largement accélérée sous l'influence de la turbulence créée par des obstacles dans le chemin de propagation de la flamme. Par conséquent, une flamme de propagation lente initialement peut atteindre une vitesse très élevée, bien au-dessus de la vitesse du son avec on

de pression causant des sérieux dommages aux installations, bâtiments, etc. Pour cette raison, le phénomène d'accélération de flamme a une importance vitale dans l'analyse de sécurité.

On distingue deux modes de combustion non-stationnaire : la déflagration et la détonation. La propagation résulte du transfert de chaleur par conduction thermique et diffusion de la zone chaude de réaction à la zone préchauffée dans la partie non-brûlée du gaz. Pour les flammes laminaires, la vitesse de flamme est limitée par le taux de transfert de chaleur et l'expansion des gaz. En effet, les gaz derrière le front de flamme sont bloqués, soit par une frontière géométrique soit par les gaz brûlés de la flamme qui se propagent dans la direction inverse. Un courant d'expansion est produit dans le gaz non brûlé devant le front de flamme. Si le courant rencontre des obstacles comme des tubes, des escaliers ou des murs, de la turbulence est générée. La turbulence augmente l'efficacité du transfert de chaleur dans la zone de combustion et par conséquent augmente le taux de réaction par unité d'aire sur la surface du front de flamme. L'augmentation du taux de réaction résulte une augmentation de l'expansion volumétrique et par conséquent, un courant d'expansion plus fort devant la flamme se forme, ainsi provoquant une turbulence plus violente dans la section non brûlée. Une réaction positive est ainsi formée.

Avec une composition de mélange suffisamment réactive et la présence d'une forte turbulence générée, une déflagration peut effectuer une transition et devenir une détonation. Dans une détonation, la vitesse de détonation typique d'un mélange air et hydrogène est près de 2 km/sec, soit d'environ 3 ordres de grandeur supérieurs à la vitesse de flamme d'une combustion laminaire[3]. Les détonations produisent un maximum très fort et distinctif de surpression. La surpression, qui dépend de la concentration initiale d'hydrogène, est environ vingt à trente fois plus grande que la pression initiale.

Si un front de flamme non stationnaire se propage vers un obstacle ayant une petite ouverture, comme par exemple une porte ou une fenêtre sur un mur, un jet turbulent est formé à travers l'ouverture. Quand le front de flamme atteint l'ouverture, une accélération violente de

flamme se produit. Par ce mécanisme, une accélération de flamme extrêmement puissante peut être atteinte sur une très courte distance.

Une déflagration lente peut être fortement accélérée sous l'influence de la turbulence causée par des obstacles dans la trajectoire de la flamme. Un front de flamme qui se propage initialement lentement peut donc atteindre une vitesse très élevée, accompagnée par une onde de pression. Dépendant de la géométrie, i.e., du degré de confinement, de la forme des obstacles, du rapport de blocage de ces derniers, de la composition du mélange et des conditions initiales thermodynamiques, il est possible d'avoir des déflagrations rapides et même des détonations. Dans le cas de flammes supersoniques, des surpressions allant jusqu'à 15 fois la pression initiale ont été observées expérimentalement[1].

1.2 Types et propriétés de flamme d'hydrogène

1.2.1 Flamme pré-mélangée et flamme diffusive

Une flamme pré-mélangée se produit lorsqu'on allume un mélange d'hydrogène et d'air initialement parfaitement mélangé. La zone de flamme sépare le mélange de gaz frais des gaz brûlés. Dans le cas de la combustion de l'hydrogène, l'eau est le principal produit de réaction. L'autre type de flamme, souvent appelée flamme diffusive, se produit lorsque le mélange des réactifs initialement séparés s'effectue par diffusion et détermine la zone de réaction. Une flamme diffusive parfaite a une chimie rapide qui s'ajuste rapidement à la fraction de mélange. Généralement, ceci indique que le carburant et l'oxydant sont introduits dans la chambre de combustion par des entrées différentes. Notre travail porte sur les flammes pré-mélangées d'hydrogène.

La distinction entre une flamme pré-mélangée et diffusive peut toujours être faite lorsque l'échelle de temps associé au mélange du carburant et de l'oxydant ainsi que l'échelle de temps associée à la cinétique chimique sont distinctes. La flamme diffusive idéale a une cinétique chimique qui ajuste rapidement les compositions locales du mélange. La composition du mélange change constamment. Mais une flamme pré-mélangée idéale est complètement mélangée avant que le processus de combustion ne commence. Il existe une interface entre les réactants et les produit de combustion, séparant les zone brûlées et non-brûlées. Cette interface se propage avec une vitesse de flamme. La flamme turbulente pré-mélangée est le mode principal de combustion dans un moteur à combustion interne et dans le moteur à réaction.

Par contre, une flamme diffusive est alimentée par la diffusion de carburant et d'oxydant vers la flamme et la diffusion des produits de combustion hors de la flamme. Dans ce cas, la flamme ne se propage pas, elle est donc stationnaire. Les produits de combustion se retrouvent des deux côtés de la flamme, alors que dans le cas d'une flamme pré-mélangée, il y a une séparation claire entre la zone où on trouve les produits de combustion (région brûlée) et le mélange combustible (région non-brûlée).

1.2.2 Vitesse de front de flamme.

Contrairement aux flammes diffusives où on ne peut généralement diviser spatialement les réactants des produits de réaction, une flamme pré-mélangée a son réactant sur un côté de flamme et les produits de réactions sur l'autre côté. L'interface entre les deux zones se propagent avec une vitesse bien définie appelée vitesse de flamme. Le modèle de Zeldovich et Frank-Kamenetskii [4] permet de trouver une solution analytique de l'équation de conservation de la masse et de l'équation de l'énergie. Ce modèle prédit une vitesse de flamme laminaire prémélangé égale à [4] :

$$V_L = \sqrt{\frac{D}{\tau}}, \quad (1-1)$$

où, $\tau = 1 / k_A = [A \exp(-E / RT)]^{-1}$ est le temps caractéristique de réaction et où $D (= \lambda / \rho c_p)$ est le coefficient de diffusion thermique, ici, k_A est le paramètre de Arrhénius.

Pour un écoulement laminaire, la vitesse v_L de la flamme et les scalaires (par exemple λ, μ, D) décrivant le processus de combustion ont des valeurs bien définies. Par contre, un écoulement turbulent se caractérise par des fluctuations du champ de vitesse. Ces fluctuations sont causées par des vortex produits par les forces de cisaillement dans le fluide. Le nombre de vortex est le résultat d'une compétition entre un processus de génération de vortex et un processus de destruction de vortex, provoqué par la dissipation visqueuse. Le terme de génération de vortex domine le terme de dissipation visqueuse lorsqu'on excède une valeur critique du nombre de Reynolds R_e . Une transition d'un écoulement laminaire à un écoulement turbulent du fluide se produit alors.

On définit le nombre de Reynolds de la façon suivante :

$$R_e = \frac{\rho v l}{\mu}, \quad (1-2)$$

où μ est viscosité de fluide, v la vitesse de fluide, ρ est la densité et l est une largeur caractéristique du système, lors de l'écoulement dans un tube, une longueur caractéristique correspond au diamètre du tube, par exemple.

Le nombre critique de Reynolds dans un tube est d'environ 2000 pour un écoulement laminaire. Si le nombre de Reynolds de la turbulence est encore plus élevé ($R_e > 6000$), les propriétés de l'écoulement turbulent ne dépendent plus des propriétés moléculaires du fluide turbulent (λ, μ et D) [5]. Il a des possibilités qu'une détonation de flamme se produise. Lorsque le nombre de Reynolds se situe entre 2000 et 6000, une déflagration lente ou une déflagration rapide prend place [5].

Une déflagration est formée de deux zones : la zone préchauffée et la zone de réaction, séparées par le point d'allumage. La propagation est le résultat du transfert de chaleur par

conduction et diffusion thermique des zones chaudes de réaction à la zone préchauffée. Pour une flamme laminaire, une vitesse de flamme est limitée par les taux de transfert de chaleur, avec des valeurs typiques situées entre 0.2 ~3 m/sec selon la concentration d'hydrogène et la température initiale du mélange[2].

Lorsqu'une onde de combustion prend place dans un milieu infini elle se propage généralement comme une onde sphérique adiabatique, la circulation de chaleur (de la zone brûlée à la zone non brûlée) diverge jusqu'à ce que le rayon de la sphère atteigne une grandeur que l'on peut comparer à la largeur de l'onde de combustion; la divergence de flux de chaleur devient alors négligeable. L'onde de combustion peut alors être considérée comme une onde plane adiabatique. Dans ce cas là, les vecteurs de fluide et diffusion sont parallèles l'un par rapport à l'autre dans une petite surface tout en étant normaux à celle-ci. À ce moment, la propagation de l'onde de combustion est décrite essentiellement par la vitesse de flamme laminaire. Le graphique de la vitesse de flamme en fonction de la concentration montre que la vitesse est environ 0.10-0.13 m/s autour de 11 vol.% H₂ et 0.15-0.20 m/s autour de 13 vol.% H₂ dans un mélange d'hydrogène, d'oxygène et d'azote[2].

Si une propagation de flamme turbulent prémélangé est décrite habituellement par une vitesse de flamme turbulente v_T . Damkohler a proposé un modèle pour exprimer la vitesse de flamme turbulente en fonction de la vitesse laminaire v_L [4]. Dans son approche, il considère qu'une flamme turbulente est une flamme laminaire « ridée » par les fluctuations turbulentes. Il propose que la vitesse de la flamme turbulente v_T soit reliée à la vitesse laminaire en considérant la conservation de la masse[4] :

$$\rho v_T A_T = \rho v_L A_L , \quad (1-3)$$

où A_L signifie la superficie du front de flamme laminaire, A_T est la superficie du front de flamme moyen turbulent (voir la figure 1.1). On peut alors écrire:

$$v_T = v_L A_L / A_T \quad (1-4)$$

Nous pouvons déduire géométriquement la relation suivante entre la vitesse turbulente et la vitesse laminaire :

$$A_L / A_T = 1 + v' / v_L, \quad (1-5)$$

où v' est une racine moyenne carrée de la fluctuation de vitesse due à la turbulence[6] :

$$v' = \sqrt{2k\sqrt{\rho}}, \quad (1-6)$$

où k est l' énergie cinétique des fluctuations turbulentes et ρ est la densité de l'écoulement de la zone non-brûlée. Grâce aux équation (1-3) et (1-4), on trouve que :

$$v_T = v_L + v' = v_L(1 + v' / v_L). \quad (1-7)$$

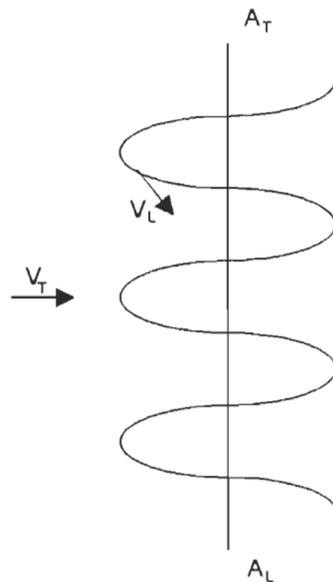


Figure 1.1. Vitesses de flamme laminaire et de flamme turbulente pré-mélangée.

1.3 Propriétés de combustion de l'hydrogène

1.3.1 Déflagrations et détonations

Un diagramme schématique d'une onde de combustion en une dimension est montré sur la figure 1.2. Dans cette figure, nous suivons un mouvement d'une onde de combustion plane en une dimension traversant un très long canal de section constante. L'onde de combustion se déplace vers la gauche à vitesse constante u . Dans un repère qui suit le mouvement de l'onde, le gaz stationnaire non brûlé devant l'onde de combustion peut être considéré comme un gaz qui se déplace à vitesse u_1 vers le front de l'onde. L'indice 1 désigne les conditions de gaz non brûlés devant l'onde. L'indice 2 représente les conditions de gaz brûlés derrière l'onde. Les vitesses u_1 et u_2 sont définies dans un système de coordonnées fixes par rapport à l'onde stationnaire. Pour plusieurs types de propagation dans une onde de combustion, les différences entre une déflagration et une détonation sont données dans le tableau 1.1 ci-dessous[3].

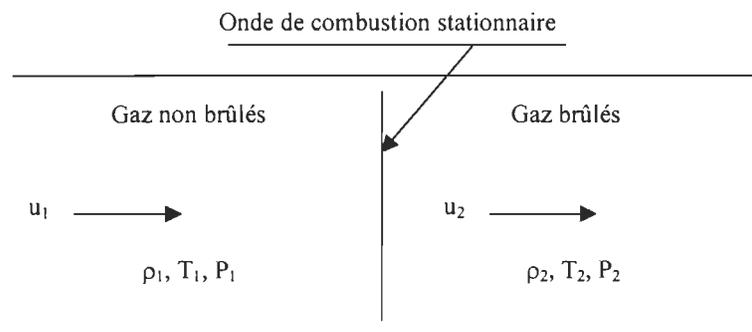


Figure 1.2. Diagramme schématique d'une onde de combustion stationnaire en une dimension (onde de déflagration ou de détonation), où ρ , T et P représentent respectivement la densité, la température et la pression.

Tableau 1.1. Différences qualitatives entre une détonation et une déflagration.

	Déflagration	Détonation
u_1/c_1	0.0001-0.3	5-10
u_2 / u_1	4-6(accélération)	0.4-0.7 (décélération)
P_2 / P_1	0.98(explosion légère)	13-55 (compression)
T_2/T_1	4-16 (addition de chaleur)	8-21 (addition de chaleur)
ρ_2 / ρ_1	0.06-0.25	1.7-2.6

* c_1 note la vitesse du son local.

Un tuyau contenant un mélange combustible de gaz avec un ou deux bouts ouverts permettra la propagation d'une onde de combustion. Si on allume près d'un bout ouvert, l'onde atteindra généralement une vitesse régulière et ne s'accélérera généralement pas pour devenir une détonation. Une déflagration peut cependant être accélérée par la turbulence provoquée par la présence d'obstacle sur sa trajectoire. Si le mélange est amorcé à un bout fermé, ce dernier agit comme un piston pour le front de flamme. Par contre-action, le front de réaction sera poussé vers les gaz non brûlés. Cette onde peut s'accélérer et conduire à la détonation. Nous étudierons cette situation en tentant d'éviter la transition vers la détonation. La détonation s'accompagne d'un maximum distinctif important dans le profil de surpression. Cette surpression est généralement très importante, dépendamment de la concentration initiale d'hydrogène, peut atteindre vingt à trente fois la pression initiale, lorsque cette vitesse de flamme atteint celle du son, la flamme va créer une onde de choc de surpression qui représente un danger pour les structures solides.

Un front de flamme de déflagration est composé de deux zones : une zone préchauffé et une zone de réaction. Une propagation résulte du transfert de chaleur par conduction thermique et de la diffusion. Le rapport de la vitesse de propagation et de la vitesse du son local varie

entre 0.0001~0.3 (voir tableau 1.1). Il est possible qu'une déflagration se propage à des vitesses près de la vitesse de son. Ce front de flamme est appelé déflagration rapide caractérisé par une onde de pression et température. Une surpression jusqu'à 15 fois la pression initiale est observée. Une déflagration avec une composition suffisamment riche en carburant qui rencontre un super niveau élevé de turbulence va probablement subir une transition jusqu'à une détonation. Une vitesse typique de détonation dans un mélange d'hydrogène et air est environ 2000 m/sec, soit de 2 ordres de grandeur plus élevés que celui d'un écoulement laminaire (référez tableau 1.1 pour les autres paramètres). Un front de flamme de détonation est constitué de trois zones : une onde choc, une zone d'induction et la zone de réaction. La surpression générée par le choc en tête peut entraîner des dommages sérieux sur les équipements, etc.

1.3.2 Énergie d'allumage

L'hydrogène est facilement inflammable. L'énergie minimale que l'on doit fournir pour allumer un mélange est de 0.019 mJ pour une concentration stochiométrique du mélange d'air et d'hydrogène. La concentration stochiométrique d'un tel mélange est d'environ 28 vol.% H₂ dans l'air. L'énergie d'allumage varie en fonction de la concentration d'hydrogène. Par exemple, cette énergie est de 0.3 mJ à une concentration de 15 vol.% d'hydrogène, et de 0.4mJ pour 13 vol.% H₂[2]. Autour de la concentration stochiométrique, l'énergie allumage atteint sa valeur minimale. Elle augmente lorsqu'on s'éloigne de ce point.

1.4 Turbulence et propagation de flammes

L'écoulement turbulent est accompagné de fluctuations rapides de l'enveloppe de la flamme. La turbulence permet l'augmentation de l'efficacité des processus de diffusion de matière et de chaleur, augmentant entre autre, le rythme de mélange du combustible avec

l'oxydant, l'évacuation des produits de combustion du front de flamme et l'efficacité des processus de diffusion thermique. À la stoechiométrie, la diffusion thermique effective peut être 100 fois plus grande que la diffusion moléculaire qui se produit dans un écoulement laminaire [3]. À cause de l'augmentation des coefficients de transports, la vitesse de la flamme turbulente est beaucoup plus grande que la vitesse de la flamme laminaire.

Pour une déflagration lente, la flamme est en général laminaire. Elle possède un front de flamme bien défini et ses quantités scalaires peuvent être considérées comme stationnaires dans un repère qui se déplace à la vitesse de la flamme. À partir d'une certaine vitesse, l'écoulement devient turbulent et le front de flammes s'élargit .

Comparée à la zone de réaction d'une flamme laminaire, celle de la flamme turbulente est en général plus large. Des processus de convection, provoqués par les vortex turbulents, accélèrent significativement le processus de mélange. La surface entre la zone de réaction et la zone non brûlée s'en trouve accrue. La vitesse de la flamme v_T augmente donc lorsque le nombre de Reynolds (voir équation 1-2) augmente.

La turbulence étant déterminante pour la propagation de flamme, on doit considérer les différents facteurs qui l'influencent. Un tourbillon provoque une ondulation du front de flamme et agrandit sa surface, provoquant une augmentation de la zone de réaction et une intensification du processus de combustion. Ceci résulte en une accélération de la flamme. Les tourbillons augmentent également les coefficients de transport et améliorent le mélange des réactants, provoquant une accélération de la flamme. La géométrie du volume de combustion est un paramètre important pour l'accélération de la flamme. Les trois facteurs géométriques sont : la taille relative des obstacles, la distance entre les obstacles successifs et le degré de confinement de l'espace de chambre de combustion [6].

L'effet des obstacles sur la propagation est généralement caractérisé par le rapport d'obstruction qui est défini comme le rapport de la surface bloquée par les obstacles et la section de la chambre perpendiculaire à l'écoulement. En général, la vitesse de flamme est plus grande pour un plus grand rapport d'obstruction. Mais il ne faudra pas conclure qu'un rapport d'obstruction plus élevé signifie systématiquement un plus grand potentiel de danger. En effet, l'expérience montre que lorsque la turbulence est trop intense, la flamme peut s'éteindre[1].

La distance entre les obstacles successifs est un facteur important pour l'accélération de la flamme. Une flamme accélérée par un obstacle tend à ralentir s'il n'y a plus d'obstacle à rencontrer. Pour une accélération maximale fixée de flamme, plus élevé est le rapport d'obstruction, plus longue sera la distance nécessaire entre les obstacles successifs. Le troisième facteur géométrique est le degré de confinement d'une chambre de combustion. Lorsque le degré de confinement d'une chambre de combustion est réduit, l'accélération de la flamme est moindre selon les expériences.

Un autre paramètre important est la concentration de carburant dans le mélange. Dans notre cas, c'est la concentration d'hydrogène. La concentration d'hydrogène est un facteur influant fortement la vitesse de flamme. Lorsqu'elle dépasse 16 *vol.%* H₂ en volume, une détonation peut être provoquée[1]. La concentration et l'intensité de la turbulence déterminent la nature des processus de combustion. Nous considérons seulement le cas avec des concentrations variant de 10 *vol.%* H₂ à 13 *vol.%* H₂. Dans cette plage, une détonation ne devrait pas se produire.

Un dernier paramètre important pour l'accélération de flamme est l'état initial du mélange. L'état initial est caractérisé par des paramètres thermodynamiques tels que la pression, la température et le degré de la turbulence du mélange non-brûlé. Selon certaines mesures expérimentales dans les tubes à explosion, la variation de la pression initiale ne cause pas un changement significatif du comportement de la flamme. Quant à la température initiale, lorsque la température du gaz non-brûlé est élevée, la probabilité que la flamme s'éteigne en présence de fluctuations turbulentes intenses est faible.

Chapitre 2 Équations du mouvement et modèles de combustion

2.1 Modélisation

Pour un mélange gazeux donné, la température, la pression et le volume sont reliés entre eux par une équation d'état de gaz appropriée. Il y a cinq variables fondamentales pour décrire un gaz en mécanique des fluides : les trois composantes de la vitesse, et deux propriétés thermodynamiques parmi la pression, la température, la densité, l'enthalpie, l'entropie, etc. L'état du fluide est complètement déterminé lorsque nous précisons le vecteur vitesse \vec{V} et deux propriétés thermodynamiques en fonction du temps et de l'espace. Nous avons donc besoin de cinq équations indépendantes. Soit les trois composantes des équations du mouvement, l'équation de la continuité et l'équation de l'énergie. Souvent une équation d'état est aussi introduite afin de permettre l'écriture de l'équation de l'énergie en termes de trois variables (température, densité et pression) au lieu de deux. Ainsi, nous avons six variables et six équations décrivant un écoulement laminaire [3].

En ce qui concerne l'écoulement turbulent, il faut rajouter de nouvelles variables et de nouvelles équations (par exemple, les termes de stress de Reynolds, les paramètres k et ϵ , etc) pour fermer le système d'équation.

2.1.1 Équations du mouvement

Considérons d'abord un écoulement laminaire. Dans la notation de tenseurs cartésiens, le système d'équations suivant décrit l'état du fluide.

L'équation de continuité :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j) = 0. \quad (2-1)$$

L'équation du mouvement :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_i u_j) = -\frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} + B_i, \quad (2-2)$$

où B_i est la force volumétrique sur les espèces pour un système de composantes multiples, défini par:

$$B_i = \rho \sum_{k=1}^n (Y_k f_k), \quad (2-2.1)$$

où f_k est la force par unité de masse sur la k -ième espèce et Y_k est la fraction de masse de la k -ième espèce, et,

$$\tau_{ij} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij}, \quad (2-2.2)$$

est le tenseur des contraintes, avec μ , la viscosité dynamique.

L'équation de l'énergie :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho h_t) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j h_t) = \frac{\partial P}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (u_i \tau_{ij} - q_j) + \dot{Q}. \quad (2-3)$$

Ici , on néglige le travail de la force de gravité sur l'espèce. h_t est la somme de l'enthalpie qui relie l'énergie cinématique:

$$h_t = h + \frac{u_i u_i}{2}, \quad (2-3.1)$$

où h est l'enthalpie par unité de masse :

$$h = \sum_{i=1}^N h_i Y_i, \quad (2-3.2)$$

$$h_i = \Delta h_{f,i}^0 + \int_{T^0}^T C_{p,i} dT, \quad (2-3.3)$$

et si l'enthalpie est reliée à l'énergie par la relation, alors :

$$h = e + \frac{P}{\rho}. \quad (2-3.4)$$

ici, e est l'énergie interne spécifique.

Dans l'équation (2-3), \bar{q} est la contribution de la conduction en terme de l'énergie flux :

$$\bar{q} = -\lambda \nabla T + \rho \sum_{i=1}^N h_i Y_i V_i = -\lambda \nabla T + \sum_{i=1}^N \Gamma_i Y_i h_i. \quad (2-3.5)$$

La source d'énergie \dot{Q} dans l'équation (2-3) inclut la source d'énergie due à la réaction chimique [3] :

$$\dot{Q} = \sum_{k=1}^N \left[\frac{h_k^0}{w_k} + \int_{T_k}^T C_{p,k} dT \right] \omega_i, \quad (2-3.6)$$

\dot{Q} pourrait également contenir un terme de source de radiation et de transfert de chaleur entre des phases continues et discrètes. Pour un mélange gazeux, il faut également spécifier une équation pour décrire le transport et la transformation des espèces les unes dans les autres. Pour une espèce i , ω_i est le taux de réaction chimique.

équation de fraction de masse Y_i :

$$\frac{\partial(\rho Y_i)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_k}(\rho u_k Y_i) = \frac{\partial}{\partial x_k}(\Gamma_k \frac{\partial Y_i}{\partial x_k}) + \omega_i, \quad (2-3.7)$$

avec $i = 1, 2, \dots, N$ où N est le nombre total d'espèces chimiques. La fraction de masse est définie comme suit :

$$Y_i = \frac{m_i}{\sum_{j=1}^N m_j}, \quad (2-3.7.1)$$

m_j est la masse de la j -ième espèce.

Notons qu'en vertu de la conservation de la masse, nous n'avons besoins que de $N-1$ équations sur la fraction de masse, la dernière pouvant s'obtenir de la contrainte :

$$\sum_{i=1}^N Y_i = 1. \quad (2-3.7.2)$$

Dans l'équation (2-3.7), ω_i ($\text{Kg.m}^{-3}.\text{sec}^{-1}$) représente le terme source associé à une réaction chimique, qui est souvent donné par une expression de type [7]:

$$\omega_i = W_i \sum_{k=1}^M (v_{ik}'' - v_{ik}') B_k T^{\beta_k} \exp \left[-\frac{E_k}{R_u T} \prod_{j=1}^N \left(\frac{X_j P}{R_u T} \right)^{v_{jk}'} \right], \quad (2-4)$$

Ici, M est le nombre total de réactions chimiques, ν''_{ik}, ν'_{ik} sont les coefficients stochiométriques des produits et réactants, B_k est un coefficient obtenu expérimentalement.

2.1.2 Équation d'état

L'équation d'état du gaz idéal est :

$$P = \rho R_u T \sum_{i=1}^N \frac{Y_i}{W_i}. \quad (2-5)$$

La fraction de masse Y_i est reliée à la fraction molaire par l'expression suivante :

$$X_i = \frac{Y_i/W_i}{\sum_{j=1}^N Y_j/W_j}. \quad (i = 1, 2, \dots, N). \quad (2-5.1)$$

2.1.3 Simulations numériques directes.

Le système d'équations ci-dessus peut être utilisé pour décrire une flamme laminaire. On pourrait aussi l'utiliser pour décrire une flamme turbulente. Cependant, une simulation numérique directe du système d'équation basé sur une discrétisation de ce dernier nécessiterait un temps de calcul très long et serait très exigeant en terme de mémoire d'ordinateur. Ceci est principalement dû au fait que la résolution requise pour décrire un écoulement turbulent implique une séparation d'échelle de distance élevée. On peut démontrer en effet que le nombre de points requis pour un maillage suffisamment fin pour décrire les échelles des fluctuations turbulentes est, en trois dimensions :

$$N_G \approx \left(\frac{Re}{10} \right)^{9/4}. \quad (2-6)$$

Le nombre de Reynolds est de l'ordre de 10^3 - 10^6 ou plus sur un problème pratique. Il est clair qu'une simulation numérique directe n'est pas un outil pratique actuellement pour effectuer des simulations représentatives de conditions expérimentales. Malgré ces difficultés, une simulation numérique directe est possible lorsque le nombre de Reynolds est faible (i.e., $Re < 1000$) sur un petit domaine en 3 dimensions[7].

2.1.4 Moyenne sur la turbulence : moyenne de Reynolds et moyenne de Favre.

Une façon de simplifier considérablement le problème dans la cas de la modélisation de la turbulence est de résoudre les équations sur lesquelles nous avons effectué au préalable une moyenne de Reynolds des observables physiques (pression, température, champ de vitesse, etc.). Soit un observable physique q dont la moyenne dans le temps est obtenue par l'intégration sur un long intervalle de temps (infiniment long en théorie). La moyenne de Reynolds (moyenne dans le temps) s'exprime comme ci-dessous[3] :

$$\bar{q}_{(\bar{r})} = \lim_{\Delta t \rightarrow \infty} \frac{1}{\Delta t} \int_0^{\tau} q_{(\bar{r},t)} dt. \quad (2-7)$$

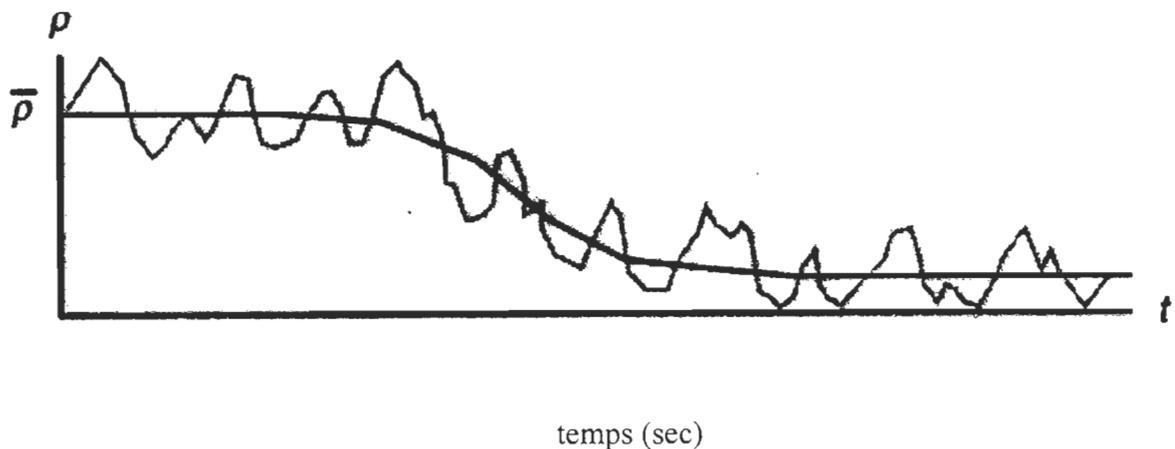


Figure 2.1. Fluctuations turbulentes de la densité et moyenne sur le temps pour un écoulement instantané[4].

La valeur de la fonction q est la somme de sa moyenne et de sa fluctuation (indiquée par l'apostrophe)

$$q_{(\bar{r},t)} = \overline{q_{(\bar{r})}} + q'_{(\bar{r},t)}, \quad (2-8)$$

où $q'_{(\bar{r},t)}$ est une fluctuation due à la turbulence. Sa moyenne est nulle:

$$\overline{q'_{(\bar{r},t)}} = 0. \quad (q \text{ peut être } \rho, P, h_t, T, u_i, Y_i, \text{ etc.}). \quad (2-8.1)$$

Par définition, un écoulement compressible affiche une grande variation de densité. Pour de tels processus, il est plus utile, afin de simplifier les équations, d'introduire une autre moyenne qui s'appelle 'moyenne de Favre' définie par :

$$\tilde{q} = \frac{\overline{\rho q}}{\bar{\rho}}, \quad \text{où } \overline{\rho \tilde{q}} = \overline{\rho q}. \quad (2-9)$$

La moyenne de Favre est donc une moyenne de Reynolds pondérée par la densité. Par analogie, n'importe quelle propriété q peut encore être représentée comme la somme de sa valeur moyenne et de sa fluctuation :

$$q_{(\bar{r},t)} = \tilde{q}_{(\bar{r})} + q''_{(\bar{r},t)}, \quad (2-10)$$

avec :

$$\overline{\rho q''} = 0. \quad (2-11)$$

Ici, q représente une observable telle que u_i , Y_i , h_t et T . Mais la moyenne de Reynolds est généralement utilisée pour la pression (P) et la densité (ρ) afin d'éviter de compliquer l'écriture des équations de conservation.

2.1.5. Les equations de conservation moyennées avec la pondération de Favre.

On substitue les observables par la somme de leur moyenne de Favre et de leur fluctuation dans les équations de conservation de la mécanique des fluides et dans l'équation d'état du gaz. On effectue ensuite une moyenne de Reynolds sur les équations du mouvement. Le système d'équations ci-dessous est alors obtenu (voir [3]) :

L'équation de la continuité :

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i) = 0. \quad (2-12)$$

L'équation de conservation de la quantité de mouvement :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j) = - \frac{\partial \bar{P}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\tau}_{ij} - \overline{\rho u_i'' u_j''}). \quad (2-13)$$

ici, on a négligé le terme B_i qui représente les forces externes volumétriques. Le dernier terme du côté droit de l'équation (tenseur des stress de Reynolds) représente le stress turbulent dû à la diffusion turbulente de la quantité de mouvement. Il provient de la moyenne de Favre et doit être modélisé pour fermer le système d'équations. Ce problème sera abordé dans la prochaine section. La moyenne du tenseur visqueux des contraintes s'écrit :

$$\bar{\tau}_{ij} = \mu \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \delta_{ij}. \quad (2-13.1)$$

L'équation de l'énergie devient :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\tilde{h}_t) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\tilde{u}_j\tilde{h}_t) &= \frac{\partial\bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\tilde{u}_j\bar{\tau}_{ij} + \overline{\tau_{ij}u_i''} - \overline{\rho h_i''u_j''}) + \\ &+ \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\lambda \left(\frac{\partial\tilde{T}}{\partial x_j} + \frac{\partial\overline{T''}}{\partial x_j} \right) + \sum_{k=1}^N \Gamma_k h_k \left(\frac{\partial\tilde{Y}_k}{\partial x_j} + \frac{\partial\overline{Y_k''}}{\partial x_j} \right) \right) + \bar{Q}. \end{aligned} \quad (2-14)$$

L'enthalpie totale h_t moyennée, donnée par l'expression (2-1) devient :

$$\tilde{h}_t = \tilde{h} + \frac{1}{2}\tilde{u}_i\tilde{u}_j + \frac{1}{2}\frac{\overline{\rho u_i''u_i''}}{\bar{\rho}}, \quad (2-14.1)$$

sa fluctuation étant définie par :

$$h_t'' = h'' + \tilde{u}_i u_i'' + \frac{1}{2}u_i''u_i'' - \frac{1}{2}\frac{\overline{\rho u_i''u_i''}}{\bar{\rho}}. \quad (2-14.2)$$

On obtient l'expression pour \tilde{h}_t par la procédure suivante : on multiplie les deux cotés de $h_t = h + (u_i u_i)/2$ par ρ , puis on substitue la vitesse par $u_i = \tilde{u}_i + u_i''$. Effectuant la moyenne de Reynolds du tout on obtient :

$$\overline{\rho h_t} = \bar{\rho}h + \frac{1}{2}\bar{\rho}\tilde{u}_i\tilde{u}_j + \frac{1}{2}\overline{\rho u_i''u_i''}, \quad (2-14.3)$$

et puisque $\overline{\rho h_t} = \bar{\rho}\tilde{h}_t$ et $\bar{\rho}h = \bar{\rho}\tilde{h}$ (par définition de la moyenne de Favre), on trouve (2-14.1).

L'équation (2-14) peut être réécrite de la façon suivante :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\tilde{h}_t) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\tilde{u}_j\tilde{h}_t) &= \frac{\partial\bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\lambda \frac{\partial\overline{T''}}{\partial x_j} + \sum_{k=1}^N \Gamma_k h_k \frac{\partial\overline{Y_k''}}{\partial x_j} \right) + \\ &+ \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\tilde{u}_i (\bar{\tau}_{ij} - \overline{\rho u_i''u_j''}) + \overline{u_i''\tau_{ij}} - \overline{\rho u_j''h} \right) + \bar{Q}. \end{aligned} \quad (2-15)$$

La moyenne du produit de trois fluctuations est négligée. Une telle approche nécessite en théorie la solution d'une infinité d'équations décrivant toute la hiérarchie des corrélations des fluctuations. Une solution numérique ne peut jamais modéliser tous les termes de corrélation d'ordres supérieurs. En pratique, elles doivent être tronquées pour fermer le système d'équations. Les fluctuations du tenseur des contraintes s'écrivent :

$$\tau_{ij}'' = \mu \left(\frac{\partial u_i''}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j''}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu \sum_{k=1}^N \frac{\partial u_k''}{\partial x_k}. \quad (2-15.1)$$

La source d'énergie \bar{Q} est associée au taux de réaction chimique. L'équation de l'énergie moyennée est aussi reliée à une moyenne du taux de réaction chimique. L'équation de la fraction de masse de l'espèce chimique i en moyenne de Favre est :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{Y}_i) + \frac{\partial}{\partial x_k} (\bar{\rho} \tilde{Y}_i \tilde{u}_k) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\Gamma_i \frac{\partial \tilde{Y}_i}{\partial x_k} - \overline{\rho Y_i'' u_k''} \right) + \bar{\omega}_i. \quad (2-16)$$

Les termes $\overline{\rho Y_i'' u_k''}$ et $\bar{\omega}_i$ doivent être modélisés pour fermer le système d'équations. Nous en discuterons dans la section prochaine.

Considérons maintenant la moyenne de l'équation d'état :

$$P = \rho R T \sum_{i=1}^N \frac{Y_i}{W_i}, \quad (2-16.1)$$

nous obtenons alors l'équation suivante :

$$\bar{P} = R \sum_{i=1}^N (\bar{\rho} \tilde{Y}_i + \overline{\rho T'' Y_i''}) \frac{1}{W_i}. \quad (2-17)$$

Si les masses molaires ne sont pas très différentes, on peut négliger les fluctuations dans la moyenne de la masse molaire (le deuxième terme de l'équation (2-17)). Le résultat de l'approximation mène alors à l'équation suivante :

$$\bar{P} = \bar{\rho} R \bar{T} / \bar{W}, \quad (2-17.1)$$

où \bar{W} marque la valeur moyenne pondérée de la masse molaire du mélange.

2.2 Modèle de turbulence

2.2.1 Le modèle k- ε

Tel que mentionné ci-dessus, le système d'équations moyennées sur la turbulence mène à l'apparition de termes de corrélations, pour lesquels on doit trouver une expression pour fermer le système d'équations. Une possibilité serait de trouver une équation pour ces termes de corrélation. Cependant, une telle approche fait apparaître explicitement des termes de fluctuations d'ordres supérieurs. La solution des équations du mouvement moyennées implique donc une infinité d'équations pour les corrélations de fluctuations turbulentes. Une meilleure approche consiste à modéliser les termes de corrélation tel que $\overline{\rho u_i'' \phi''}$. Pour ce faire, nous appliquerons le modèle k- ε qui permet de tronquer la série d'équations au prix de l'introduction de deux nouvelles variables thermodynamiques dans le système d'équations : l'énergie cinétique turbulente k, définie par[4] :

$$\tilde{k} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 \frac{\overline{\rho u_i'' u_i''}}{\bar{\rho}}, \quad (2-18)$$

et le taux dissipation turbulent ε , défini par :

$$\varepsilon = \eta \sum_{i,j=1}^3 \left(\overline{\frac{\partial u_j}{\partial x_i} \frac{\partial u_j}{\partial x_i}} \right), \quad (2-19)$$

où $\eta = \mu/\rho$ est la viscosité cinématique laminaire.

Une approche telle que le modèle k- ε est dite « à deux équations ». L'une des équations est nécessaire pour déterminer \tilde{k} et l'autre, formulée empiriquement, pour ε . L'équation de l'énergie cinétique peut être déduite comme une équation de conservation. Les équations décrivant \tilde{k} et ε sont [7] :

$$\bar{\rho} \frac{\partial \tilde{k}}{\partial t} + \bar{\rho} \tilde{u}_i \frac{\partial \tilde{k}}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial \tilde{k}}{\partial x_i} \right) + G_k + G_b - \rho \varepsilon - Y_M, \quad (2-20)$$

$$\bar{\rho} \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \bar{\rho} \tilde{u}_i \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_i} \right) + C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{\tilde{k}} (G_k + C_{\varepsilon 3} G_b) - C_{\varepsilon 2} \bar{\rho} \frac{\varepsilon^2}{\tilde{k}}. \quad (2-21)$$

On sait que ε est une quantité moyenne par définition (2-19), donc, il n'est pas nécessaire d'utiliser la moyenne de Favre. Les paramètres $C_{\varepsilon 1}$, $C_{\varepsilon 2}$ et $C_{\varepsilon 3}$ sont des constantes empiriques ($C_1 = 1.44$, $C_2 = 1.92$, $\sigma_k = 1.0$ et $\sigma_\varepsilon = 1.3$), $C_{\varepsilon 3}$ est évalué comme une fonction de la direction du fluide local relativement à la direction de la force gravitationnelle. $C_{\varepsilon 3}$ n'est pas spécifié mais est calculé en utilisant la relation suivante[7] :

$$C_{\varepsilon 3} = \tanh \left| \frac{v}{u} \right|, \quad (2-21.1)$$

où v est la composante parallèle de la vitesse du fluide et u est la composante perpendiculaire de celle-ci. G_k est un terme source associé à la production d'énergie cinétique turbulente. Ce terme est défini comme :

$$G_k = -\overline{\rho u_i u_j} \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \quad (2-21.1)$$

On peut poser une forme pour G_k [7] ,

$$G_k = \mu_t S^2, \quad (2-21.2)$$

où le coefficient de viscosité turbulent est défini comme :

$$\mu_t = \rho C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \text{ avec } C_\mu = 0.09 \text{ (déterminé empiriquement)}. \quad (2-21.3)$$

Lorsque S est le module du tenseur des contraintes, défini comme :

$$S \equiv \sqrt{2S_{ij}S_{ij}} \quad (2-21.4)$$

alors S_{ij} est donnée par [8]:

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right). \quad (2-21.5)$$

Le terme G_b est associé à la production d'énergie cinétique turbulente par la gravité

$$G_b = \beta g_i \frac{\mu_t}{Pr_t} \frac{\partial T}{\partial x_i}, \quad (2-21.6)$$

où Pr_t est le nombre de Prandtl turbulent associé à l'énergie. La valeur recommandée de Pr_t est 0.85.

Le paramètre β dans l'expression (2-21.6) est défini par :

$$\beta = -\frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_P, \quad (2-21.7)$$

qui est le coefficient d'expansion thermique.

Le terme source Y_M est modélisé selon une proposition [8] :

$$Y_M = 2\rho\varepsilon M_t^2, \quad (2-21.8)$$

où M_t est le nombre de Mach turbulent, défini comme :

$$M_t = \sqrt{\frac{k}{c_i^2}}, \quad (2-21.9)$$

où c_i ($\equiv \sqrt{\gamma RT}$) est la vitesse du son de local .

2.2.2 Les tensions de Reynolds

Après avoir introduit le modèle k- ε , nous chercherons à modéliser les tensions de Reynolds $\overline{\rho u'' q''}$ en fonction de la variable dépendante q, qui peut représenter Y_i , u_i ou h. Les modèles de turbulence actuels interprètent $\overline{\rho u'' q''}$ comme un terme associé au transport turbulent de l'observable q, en se basant sur une hypothèse de transport par gradient qui rend le terme proportionnel à la pente de la valeur moyenne de la propriété [4].

$$\overline{\rho u'' q''} = -\bar{\rho} v_T \text{grad} \bar{q}_i, \quad (2-22)$$

où v_T est un coefficient de transport. En termes des variables k et ε , v_T s'écrit

$$v_T = C_v \frac{\tilde{k}^2}{\varepsilon}, \quad (2-22.1)$$

où C_v (= 0.09) est une constante empirique. Dans l'approche k-ε, tous les termes de corrélations de type $\overline{\rho u_i'' q''}$ sont réécrits en terme de dérivées spatiales de l'observable q :

$$\overline{\rho u_i'' q''} = -\frac{\bar{\rho} v_T}{\sigma_T} \frac{\partial \tilde{q}}{\partial x_i}, \quad (2-23)$$

où σ_T est, selon le scalaire q, le nombre de Prandtl ou le nombre de Schmidt turbulent. Ceci mène aux identités suivantes, qui doivent être substituées dans l'équations.(2-22) :

$$\overline{\rho u_i'' Y_k''} = -\frac{\bar{\rho} v_T}{Sc_T} \frac{\partial Y_k}{\partial x_i} \quad (k=1, 2, \dots, N), \quad (2-23.1)$$

$$\overline{\rho u_i'' h''} = -\frac{\bar{\rho} v_T}{Pr_t} \frac{\partial h}{\partial x_i}, \quad (2-23.2)$$

$$\overline{\rho u_i'' u_j''} = -\bar{\rho} v_T \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) + \frac{2}{3} \left(\bar{\rho} v_T \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} + \bar{\rho} \tilde{k} \right) \delta_{ij}, (i \neq j). \quad (2-23.3)$$

Le nombre de Prandtl turbulent Pr_t (=0.85 typiquement) est défini par l'équation suivante :

$$Pr_t = \mu_t / a_t, \quad (2-23.4)$$

c'est-à-dire le rapport entre la viscosité cinétique turbulente et le coefficient de diffusion thermique turbulent. Le nombre de Schmidt turbulent Sc_t , (=0.75 typiquement) est donné par l'expression :

$$Sc_t = \mu_t / D_t, \quad (2-23.5)$$

qui est le rapport entre la viscosité cinétique turbulente et le coefficient de diffusion turbulent.

Le terme $\frac{\partial}{\partial x_i} \overline{u_i \tau_{ij}}$ dans l'équation de l'énergie (2-15) est modélisé comme :

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \overline{u_i \tau_{ij}} \approx \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} v_T \frac{\partial}{\partial x_j} \tilde{k}). \quad (2-23.6)$$

mais ce terme est négligé lorsque le nombre de Mach est inférieur à 1 car son influence sur le système d'équations est faible dans ce cas.

2.3 Modèles de combustion

Afin de clore complètement le système d'équations nous devons maintenant trouver une expression pour évaluer le terme associé aux réactions de combustion (ω_i). Nous chercherons donc à trouver une façon de tenir compte de la valeur moyenne, $\overline{\omega_i}$, dans les équations moyennées des fractions de masse des espèces chimiques et l'équation de l'énergie.

2.3.1 Approche d'Arrhénius

D'abord, nous considérons les réactions chimiques élémentaires qui se produisent au niveau moléculaire. La variation de concentration molaire d'une espèce "A" lors d'une réaction chimique impliquant trois espèces s'écrit :

$$\frac{d[A]}{dt} = -k[A]^a[B]^b[C]^c. \quad (2-24)$$

Ici, a, b et c représentent l'ordre de la réaction par rapport aux espèces A, B et C, et k est le coefficient du taux du réaction. Pour des réactions chimiques élémentaires, l'ordre de réaction est toujours constant pour une espèce donnée et, se trouve être déterminée par le nombre de molécules impliquées dans la réaction chimique considérée. Ainsi, la loi du taux est facilement dérivée si l'équation d'une réaction élémentaire r est donnée par[4] :



où R représente le nombre des réactions chimiques dans un schéma réactionnel donné, N est le nombre d'espèces impliquées dans la r ième réaction. Si ω_r est le taux de réaction de la r ième réaction, le taux de formation de l'espèce i dans la réaction r est donné par l'expression suivante

$$\hat{R}_{i,r} = \left(\frac{\partial c_i}{\partial t} \right)_r = k_r (v''_{ri} - v'_{ri}) \prod_{j=1}^N c_j^{v'_{rj}}, \quad (i = 1, \dots, N), \quad (2-25)$$

où C_i est la concentration de l'espèce i. v'_{ri} et v''_{ri} dénotent les coefficients stochiométriques des réactants ou produits de réaction des N espèces différentes. Ici nous supposons que les réactions chimiques sont irréversibles. Le coefficient k_r est la constante du taux de réaction chimique pour la réaction r, donnée par l'expression d'Arrhénius

$$k_r = A_r T^{\beta_r} \exp(-E_r / R_u T), \quad (2-26)$$

où A_r est le facteur pré-exponentiel (qui varie selon l'ordre de la réaction), β_r est l'exposant de la température (sans dimensions), E_r est l'énergie d'activation de la réaction r (en J/Kmol), R_u est la constante universelle du gaz (J/Kmol-K).

Finalement, le taux de réaction chimique ω_i de l'espèce chimique i du schéma réactionnel est donné comme la somme des taux des R réactions où l'espèce i participe :

$$\omega_i = M_i \sum_{r=1}^R \widehat{R}_{i,r} = M_i \sum_{r=1}^R k_r (v_{ii}'' - v_{ii}') \prod_{j=1}^N c_j^{v_{ij}'}, \quad (2-27)$$

où M_i est le poids moléculaire de l'espèce, c_i est la concentration molaire de l'espèce i et $\widehat{R}_{i,r}$ est donné par l'expression d'Arrhénius. En termes des fractions de masse, on obtient l'expression suivant :

$$\omega_i = M_i \sum_{r=1}^R k_r (v_{ii}'' - v_{ii}') \prod_{j=1}^N \left(\frac{\rho Y_j}{M_j} \right)^{v_{ij}'}. \quad (2-27.1)$$

On doit maintenant effectuer la moyenne de cette expression sur les fluctuations provoquées par la turbulence :

$$\overline{\omega_i} = M_i \sum_{r=1}^R \overline{k_r (v_{ii}'' - v_{ii}') \prod_{j=1}^N \left(\frac{\rho Y_j}{M_j} \right)^{v_{ij}'}} \quad (2-27.2)$$

explicitant k_r . On trouve :

$$\overline{\omega_i} = M_i A_r \sum_{r=1}^R \overline{T^{\beta_r} \exp(-E_r / R_u T) (v_{ii}'' - v_{ii}') \prod_{j=1}^N \left(\frac{\rho Y_j}{M_j} \right)^{v_{ij}'}} \quad (2-27.3)$$

Pour un écoulement turbulent, la valeur moyenne $\overline{\omega_i}$ n'est pas, en principe, égale à chaque terme en moyenne. L'expression suivante n'est pas valide,

$$\overline{\omega_i} \neq M_i A_r \sum_{r=1}^R \widetilde{T}^{\beta_r} \exp(-E_r / R_u \widetilde{T}) (v_{ii}'' - v_{ii}') \prod_{j=1}^N \left(\frac{\widetilde{\rho Y_j}}{M_j} \right)^{v_{ij}'}. \quad (2-27.4)$$

Ce terme est en fait le premier terme d'un développement ayant la forme suivante .

$$\overline{\omega_i} = M_i A_r \sum_{r=1}^R \tilde{T}^{\beta_r} \exp(-E_r / R_u \tilde{T}) (v_n'' - v_n') \prod_{j=1}^N \left(\frac{\tilde{p} \tilde{Y}_j}{M_j}\right)^{\nu_j} [1 + F_c], \quad (2-27.5)$$

où le terme de correction F_c est donné par

$$F_c = F_c(\tilde{T}, \tilde{T}^2, \tilde{Y}_j, \overline{Y_j T}, \overline{Y_i Y_k}, \dots), \quad (i, j, k = 1, \dots, N), \quad (2-27.6)$$

qui est difficile à évaluer à cause de sa non-linéarité. Le terme de correction F_c peut même dominer celui du premier ordre. Une approximation ambitieuse néglige le terme de correction :

$$F_c = 0. \quad (2-27.7)$$

et mène au résultat (2-27.4) devenu une égalité. Afin d'étudier l'effet d'une cinétique détaillée, nous ferons cette approximation et verrons sa limite de validité.

2.3.2 Modèle de dissipation de vortex (EDM)

Une approche de type Arrhénius, qui ne tient pas compte des fluctuations turbulentes, cessera d'être valide lorsque le nombre de Reynolds sera suffisamment élevé. L'approche EDM, développée par Magnussen et Hjertager[9], permet de décrire le taux de réaction lorsque les fluctuations turbulentes dominent la cinétique de réaction. Considérons une flamme pré-mélangée.

D'après le modèle EDM, pour un tel cas, le carburant et l'oxygène réagissent dans les mêmes vortex. Pendant que les réactions chimiques se produisent, les vortex sont séparés par des vortex qui contiennent les produits de combustion. Le modèle EDM relie le taux de

réaction chimique aux taux de dissipation des vortex qui contiennent les réactants et les produits. Dans l'équation (2-29), le taux de réaction est déterminé par la concentration du produit de combustion ainsi et par le choix de la plus petite valeur, dans l'équation (2-29) entre les deux derniers termes, comme le taux de réaction chimique que l'on retrouve dans l'équation de fraction de masse et l'équation d'énergie[7].

$$\widehat{R}_{i,r} = v'_{i,r} M_i A \rho \frac{\varepsilon}{k} \min \left[\frac{Y_R}{v'_{Rr} M_R}, B \frac{\sum_p Y_p}{\sum_j^N v''_{jr} M_j} \right], \quad (2-29)$$

où Y_p représente la fraction de la masse des produits de combustion, Y_R représente la fraction de la masse d'un produit particulier qui a la plus petite fraction de masse, $v_{i,r}$ est le coefficient stochiométrique du réactant i dans la réaction r . A et B sont des constantes empiriques fixées habituellement à 4.0 et 0.5 respectivement pour des hydrocarbures.

Parce que le rapport k/ε est relié à l'échelle de temps des fluctuations turbulentes. Donc, on peut conclure que plus les fluctuations turbulentes sont rapides, plus le taux ω_i est faible.

$$\omega_i = M_i \sum_{r=1}^R \widehat{R}_{i,r}. \quad (2-30)$$

En effet, on trouve (2-30) comme le terme $\overline{\omega_i}$ dans l'équation de fraction de masse et l'équation de l'énergie pour le modèle EDM. Car jusqu'au maintenant il était impossible de modéliser tous les termes de fluctuations dans (2-27.6).

L'équation (2-29) est utilisée pour les problèmes de flammes pré-mélangée ou de flammes diffusives. Son avantage est que le modèle de dissipation de vortex permet de connaître le taux de réaction sans connaissance précise des paramètres d'Arrhénius qui peuvent être difficiles à obtenir dans le cas de carburants industriels .

Le logiciel de simulation FLUENT permet de calculer le taux de réaction soit par une approche de type Arrhénius, le modèle EDM de dissipation de vortex, ou une approche mixte où le taux global est déterminé par le minimum des deux. Cette approche permet de traiter les régions laminaires avec une approche d'Arrhénius et les régions turbulentes avec l'approche de la dissipation de vortex.

Notons que pour l'approche mixte Arrhénius-EDM, un critère de sélection plus physique serait basé sur le nombre de Damkohler D_a . Ce dernier D_a est le rapport entre l'échelle de temps associée aux fluctuations turbulentes et l'échelle du temps associé aux processus chimiques ,

$$D_a = \frac{t_0}{t_L} = \frac{l_0 v_L}{v' l_L}, \quad (2-31)$$

l_0 est l'échelle de longueur associée aux plus gros vortex; l_L est l'épaisseur d'une flamme laminaire; v' est une fluctuation turbulente typique du champ de vitesse.

2.3.3 Le diagramme de Borghi

Le diagramme de Borghi (figure 2.2) décrit l'évolution du comportement d'un front de flamme d'un système pré-mélangé en fonction du rapport de l'intensité des fluctuations turbulentes de vitesse sur la vitesse de flamme laminaire et de la longueur associée aux processus turbulents par rapport à la largeur d'une flamme laminaire sur une échelle logarithmique double [4].

Le diagramme de Borghi comporte plusieurs régimes. La combustion laminaire se produit lorsque le nombre de Reynolds turbulent est inférieur à 1 ($R_1 = R_T^{-2} < 1$, R_T est l'échelle de grandeur de la turbulence basée sur l'échelle de grandeur de Taylor l_T qui exprime $l_T = l_0 / \sqrt{R_1}$ et décrit la séparation d'échelle des fluctuations turbulentes). Le nombre de Reynolds turbulent est défini par [5] :

$$R_T = \frac{\rho \sqrt{k} d}{\mu} \quad (2-31.2)$$

d est la distance de l'obstacle la plus proche, μ est la viscosité laminaire tandis que k est défini comme auparavant.

Le domaine de combustion turbulente ($R_l = R_T^2 > 1$) comporte trois zones, selon le nombre de Damkholer et le nombre de Karlovitz turbulent K_a , défini par [4]:

$$K_a = \frac{t_L}{t_k} \text{ avec } t_k = \sqrt{\frac{\nu}{\varepsilon}}. \quad (2-32)$$

Le nombre de Karlovitz K_a est le rapport entre l'échelle de temps associée à la combustion laminaire ($t_L = l_L / v_L$) et l'échelle du temps de Kolmogorov, associée aux plus petits vortex. La région définie par $K_a \leq 1$ est le régime des flammelettes. Ce régime est caractérisé par des flammes localement laminares incrustées dans un écoulement essentiellement turbulent. Lorsque le nombre de Damkholer $D_a > 1$, nous sommes dans le régime du réacteur parfaitement mélangé. Entre les deux zones, on trouve la zone de réaction distribuée E_l où une partie des vortex est incrustée dans le front de flamme[10].

Dans la zone du réacteur parfaitement mélangé ($D_a < 1$), les processus chimiques sont lents comparés au mouvement turbulent. Toutes les espèces chimiques sont localement bien mélangées et les réactions chimiques se produisent essentiellement avec un taux décrit par l'approche de la fonctionnelle de distribution de probabilité (pdf) qui sera discutée dans la prochaine section.

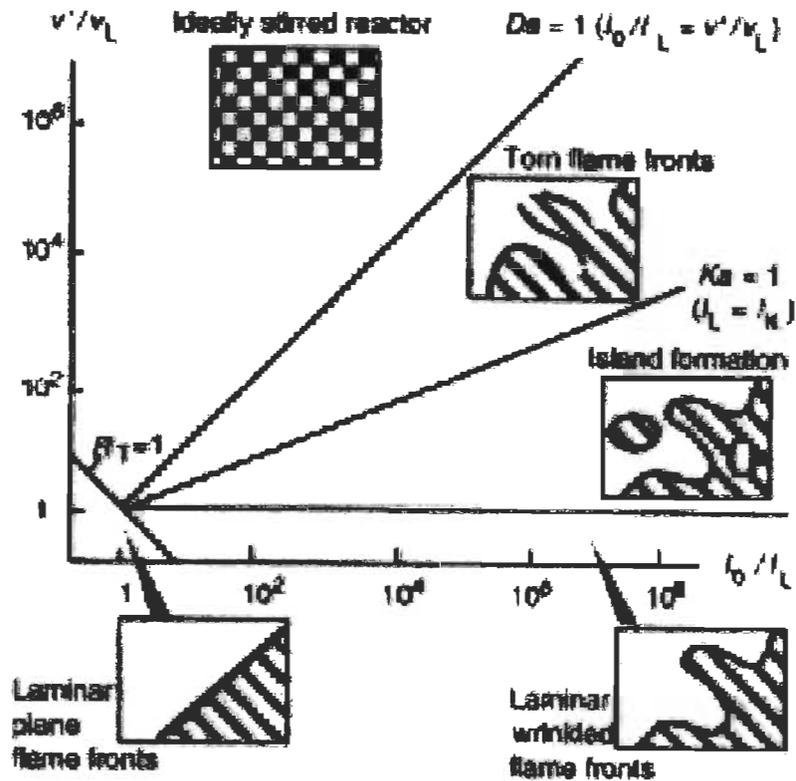


Figure 2.2. Le diagramme de Borghi [4].

Dans la zone de réaction mince et réaction distribuée, les plus petits vortex ont une taille comparable avec l'épaisseur de la flamme laminaire. La structure du front de flamme est donc perturbée par les processus des mélanges turbulents, un processus qui amène le gaz non brûlés aux conditions thermodynamiques chimiques. Dans ce régime, le taux net de consommation du carburant est influencé par la surface de réaction effective [10]. Le modèle approprié pour ce régime est possiblement le modèle pdf. Par contre, puisque le modèle de dissipation de vortex (EDM) est déjà disponible dans FLUENT, nous allons utiliser les deux modèles pour

les comparer. On peut noter que plusieurs logiciels commerciaux utilisent plutôt le modèle mixte EDM/Arrhénius.

2.3.4 Approche de la distribution de probabilité (pdf)

Chaque modèle a ses limites. Par exemple, les approches de type EDM ont le défaut d'être essentiellement phénoménologiques. Elles ne tiennent pas compte avec rigueur de l'interaction entre la turbulence et les réactions chimiques, ni d'effets tels que la formation d'espèces intermédiaires et les processus de dissociation. Elles ne décrivent pas de façon détaillée le couplage entre la turbulence et la chimie. L'approche pdf tente de tenir compte explicitement des fluctuations turbulentes en introduisant dans les équations de Navier-Stokes (équations de conservation) la fonction de distribution du spectre de fluctuation turbulente.

La densité de probabilité $P(\Phi)$ est définie comme la probabilité $P(\Phi)d\Phi$ qu'une observable physique Φ se situe dans une région $d\Phi$ autour d'une valeur particulière $\Phi(x_i, t)$. Si Φ dépend des variables ρ, T, Y_1, \dots, Y_N , la valeur moyenne de Φ peut être exprimée comme :

$$\bar{\Phi}(x_i, t) = \int_{\rho} \int_T \int_{Y_1} \dots \int_{Y_N} \Phi(\rho, T, Y_1, \dots, Y_N) P(x_i, t, \rho, T, Y_1, \dots, Y_N) d\rho dT dY_1, \dots, dY_N, \quad (2-33)$$

où, pour les fluides compressibles ,

$$\tilde{\Phi}(x_i, t) = \frac{1}{\bar{\rho}} \int_{\rho} \int_T \int_{Y_1} \dots \int_{Y_N} \Phi(\rho, T, Y_1, \dots, Y_N) \rho(x_i, t) P(x_i, t; \rho, T, Y_1, \dots, Y_N, \rho, T) d\rho dT dY_1, \dots, dY_N. \quad (2-34)$$

Les intégrales multiples peuvent être ramenées à une intégrale sur une seule variable grâce à la variable d'évolution c définie comme suit [3] :

$$c = \frac{Y_p}{Y_{p,\infty}}, \quad (2-34.1)$$

où l'indice p représente le produit de réaction. Dans les travaux présentés ici, le système considéré est le mélange H₂-air et le produit de réaction est l'eau. L'indice ∞ dénote un état complètement brûlé. La valeur c= 0 implique que le mélange est non-brûlé alors que c=1 implique que la réaction est terminée.

On peut exprimer toutes les variables thermodynamiques avec une équation en fonction de c. Considérons d'abord les espèces Y₁, Y₂, ...Y_N. Puisque la somme des fractions de masse est égale à un (par conservation de la masse pendant la réaction chimique), et que l'azote (N₂) est inerte, la concentration d'azote moyenne sera complètement déterminée par les réactants et les produits de réaction pendant le processus de combustion hydrogène et l'air :

$$Y_1 + Y_2 + \dots + Y_{N-1} = 1 - Y_{N2}, \quad (2-34.2)$$

$$Y_{N2,\infty} = Y_{N2,0} = 1 - Y_p. \quad (2-34.3)$$

Les équations ci-dessus nous permettent d'exprimer les fractions de masse des réactants et des produits en fonction de la variable d'évolution c.

Pour la température T et la densité ρ, nous pouvons également trouver une relation impliquant la variable d'évolution c. En effet, l'enthalpie h peut s'exprimer en terme de l'enthalpie de formation Δ_p du produit [3]:

$$h = C_p T = C_p T_0 + \Delta_p Y_p = C_p T_0 + \Delta_p Y_{p,\infty} \cdot c, \quad (2-35)$$

d'où on obtient

$$T = T_0 \left[1 + \frac{\Delta_p Y_{p,\infty}}{T_0 C_p} c \right] = T_0 (1 + \tau c), \quad (2-35.1)$$

en supposant que la masse molaire, la chaleur spécifique C_p et la pression du mélange sont constants pendant le processus de combustion.

Grâce à la loi des gaz parfaits, nous obtenons pour la densité :

$$\rho = \frac{Mp}{R_m T} = \frac{Mp}{R_m T_0 (1 + \tau c)} = \frac{p_0}{1 + \tau c}. \quad (2-36)$$

Puisque tous les observables physiques peuvent être exprimés en terme de c , la valeur moyenne s'obtient en intégrant sur c seulement. Puisqu'une valeur de c nous permet de spécifier (approximativement) l'ensemble des observables physiques, nous passons d'une distribution de probabilité conjointe à une distribution de probabilité simple, fonction d'une seule variable. Puisqu'on s'intéresse à la moyenne de Reynolds du taux de réaction chimique, cette dernière s'écrit :

$$\overline{\omega_i} = \int_0^1 \omega_{i(c)} P_{(c;X_i,T)} dc, \quad (2-37)$$

alors que la moyenne de Favre devient :

$$\tilde{\omega}_i = \frac{1}{\rho_0} \int_0^1 \omega_{i(c)} P_{(c)} P_{(c;X_i,t)} dc. \quad (2-38)$$

On peut souvent spécifier une distribution de probabilité par deux paramètres (par exemple la distribution gaussienne et la distribution bêta). Pour définir complètement ce type

de distribution de probabilité, nous aurons besoin de deux paramètres \tilde{c} (la valeur moyenne de la variable d'évolution c) et $\frac{\overline{\rho c''^2}}{\bar{\rho}}$ (la fluctuation de la variable d'évolution c), qui doivent être calculées à l'aide de deux équations. La valeur de \tilde{c} peut être obtenue de l'équation du mouvement de la fraction de masse du produit de réaction, puisque $\tilde{c} = \tilde{Y}_p / Y_{p,\infty}$,

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{c})}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_k}(\bar{\rho}\tilde{u}_k\tilde{c}) = \frac{\partial}{\partial x_k}((\Gamma_k P_i + \frac{\eta_t}{S_{ct}})\frac{\partial\tilde{c}}{\partial x_k}) + \frac{\bar{\omega}_i}{Y_{p,\infty}}. \quad (2-39)$$

On peut obtenir une autre équation de transport pour $\tilde{a} = \frac{\overline{\rho c''^2}}{\bar{\rho}}$ à partir de (2-39) (voir [5])

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\tilde{a}) + \frac{\partial}{\partial x_k}(\bar{\rho}\tilde{u}_k\tilde{a}) = \frac{\partial}{\partial x_k}(\frac{u_t}{S_{ct}}\frac{\partial\tilde{a}}{\partial x_k}) + 2\frac{u_t}{S_{ct}}(\frac{\partial\tilde{c}}{\partial x_k})^2 - 2\bar{\rho}\varepsilon_c + 2\overline{c''W_i}, \quad (2-40)$$

où la dissipation du scalaire ε_c est modélisée par

$$\varepsilon_c = C_c \frac{\varepsilon}{u_i^2} \tilde{a} \quad \text{avec } C_c=2. \quad (2-40.1)$$

L'équation (2-40) devient :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\tilde{a}) + \frac{\partial}{\partial x_k}(\bar{\rho}\tilde{u}_k\tilde{a}) = \frac{\partial}{\partial x_k}(\frac{u_t}{S_{ct}}\frac{\partial\tilde{a}}{\partial x_k}) + 2\frac{u_t}{S_{ct}}(\frac{\partial\tilde{c}}{\partial x_k})^2 - 2\bar{\rho}\frac{\varepsilon}{k}\tilde{a} + 2\overline{c''\omega_i}. \quad (2-41)$$

La valeur moyenne de la variable d'évolution c est donnée par l'équation

$$\tilde{c} = \frac{1}{\bar{\rho}} \int_0^1 dc P_{(c;x_i,t)} c \rho_{(c)} = \frac{1}{\bar{\rho}} \int_0^1 dc P_{(c;x_i,t)} c \frac{\rho_0}{1 + \tau c}. \quad (2-42)$$

On peut éliminer la valeur moyenne de la densité de cette expression de la façon suivante :

$$1 + \tau \tilde{c} = 1 + \frac{\rho_0}{\rho} \int_0^1 dc P_{(c; X_1, T)} \frac{\tau c}{1 + \tau c}, \quad (2-42.1)$$

$$1 + \tau \tilde{c} = 1 + \frac{\rho_0}{\rho} \int_0^1 dc P_{(c; X_1, t)} \frac{\tau c}{1 + \tau c} = 1 + \frac{\rho_0}{\rho} \int_0^1 dc P_{(c; X_1, t)} \left(1 - \frac{1}{1 + \tau c} \right), \quad (2-42-2)$$

$$1 + \tau \tilde{c} = 1 + \frac{\rho_0}{\rho} \int_0^1 dc P_{(c; X_1, t)} \left(1 - \frac{1}{1 + \tau c} \right) = 1 + \frac{\rho_0}{\rho} \left(1 - \int_0^1 dc P_{(c; X_1, t)} \left(\frac{1}{1 + \tau c} \right) \right), \quad (2-42.3)$$

$$1 + \tau \tilde{c} = 1 + \frac{\rho_0}{\rho} \int_0^1 dc P_{(c; X_1, t)} \left(1 - \frac{1}{1 + \tau c} \right) = 1 + \frac{1}{\rho} \left(\rho_0 - \int_0^1 dc P_{(c; X_1, t)} \left(\frac{\rho_0}{1 + \tau c} \right) \right), \quad (2-42.4)$$

$$1 + \tau \tilde{c} = 1 + \frac{\rho_0}{\rho} \int_0^1 dc P_{(c; X_1, t)} \left(1 - \frac{1}{1 + \tau c} \right) = 1 + \frac{1}{\rho} (\rho_0 - \bar{\rho}), \quad (2-42.5)$$

$$1 + \tau \tilde{c} = 1 + \left(\frac{\rho_0}{\rho} - 1 \right), \quad (2-42.6)$$

donc :

$$\bar{\rho} = \frac{\rho_0}{1 + \tau \tilde{c}}. \quad (2-43)$$

Ainsi, l'équation (2-42) peut se réécrire

$$\tilde{c} = (1 + \tau\tilde{c}) \int_0^1 dc P_{(c;x_i,t)} \frac{c}{1 + \tau c}. \quad (2-44)$$

La deuxième équation intégrale nécessaire s'obtient en examinant les fluctuations de la variable d'évolution c :

$$\frac{\overline{\rho c''^2}}{\bar{\rho}} = \frac{1}{\bar{\rho}} \int_0^1 dc P_{(c;x_i,t)} (c^2 - \tilde{c}^2) \rho_{(c)} = (1 + \tau\tilde{c}) \int_0^1 dc P_{(c;x_i,t)} (c^2 - \tilde{c}^2) \frac{c}{1 + \tau c}. \quad (2-45)$$

On peut déterminer $P(c)$ grâce à (2-39), (2-41), (2-42) et (2-45) si on pose une forme de P telle que

$$P(c; x_i, t) = P(c; \tilde{c}, \frac{\overline{\rho c''}}{\bar{\rho}}). \quad (2-46)$$

Le choix de la distribution de probabilité a un caractère arbitraire. Par exemple, on peut poser une distribution gaussienne tronquée[3],

$$p(c) = P_0(c; x_i, t) [\theta_{(c)} - \theta_{(c-1)}] + A(x_i, t) \delta(c) + B(x_i, t) \delta(1-c), \quad (2-47)$$

où $\theta_{(c)}$ est la fonction de Heaveside et $P_0(c)$ est la distribution Gaussienne ,

$$P_0(c; \bar{x}, t) = \frac{1}{\delta\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{1}{2} \left(\frac{(c-\mu)}{\delta}\right)^2\right), \quad (2-48)$$

où A et B sont définis par :

$$A = \frac{1}{\delta\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^0 \exp\left(-\frac{1}{2} \left(\frac{(c-\mu)}{\delta}\right)^2\right) dc, \quad (2-49)$$

$$\text{et } B = \frac{1}{\delta\sqrt{2\pi}} \int_0^{\infty} \exp\left(-\frac{1}{2}\left(\frac{(c-\mu)^2}{\delta}\right)\right) dc. \quad (2-50)$$

Il y a également une distribution en fonctions de Dirac et une distribution en fonction β . Ce dernier type de pdf a l'avantage d'être défini naturellement de 0 à 1 et de bien représenter les résultats expérimentaux. La distribution β -pdf est définie comme[4] :

$$P(c) = c^{a-1}(1-c)^{b-1} / \int_0^1 c^{a-1}(1-c)^{b-1} dc, \quad (2-51)$$

où a et b peuvent être déterminés à partir des valeurs \bar{c} et \bar{c}^2 . L'intégrale dans le dénominateur correspond à la fonction $\beta(a, b)$, qui peut être exprimée en termes de fonctions Gamma $\Gamma(a)\Gamma(b)/\Gamma(a+b)$. Lorsque μ (correspondant à \bar{c}) et σ (correspondant à \bar{c}^2) sont donnés, alors les paramètres de la distribution β sont simplement connus par [4]

$$a = \mu \left[\frac{\mu(1-\mu)}{\sigma} - 1 \right], \quad (2-52)$$

$$b = (1-\mu) \left[\frac{\mu(1-\mu)}{\sigma} - 1 \right]. \quad (2-53)$$

Chapitre 3 Le schéma réactionnel

3.1 Les mécanismes de réaction hydrogène-air

3.1.1 Réactions élémentaires et réactions générales

Une réaction élémentaire se produit à un niveau moléculaire exactement selon l'équation de réaction. La réaction des radicaux hydroxyles (OH) avec l'hydrogène moléculaire (H₂) qui forme de l'eau et un atome d'hydrogène représente une réaction élémentaire.



Inversement la réaction ,



n'est pas une réaction élémentaire. Des investigations détaillées[4] montrent que l'eau n'est pas produite par une seule collision entre les trois molécules. En effet, plusieurs espèces réactives intermédiaires telles que O, H et OH interviennent dans la réaction chimique. De telles réactions sont appelées réactions nettes ou globales. Les ordres de réaction a, b, c (voir équation (2-24)) ne sont pas normalement des entiers. Ils peuvent aussi être négatifs. Mais une telle extrapolation est assez difficile voir et même parfois complètement fausse.

3.1.2 Réactions élémentaires

Les réactions globales sont une conséquence d'un large nombre de réactions élémentaires. Pour une réaction où l'hydrogène et l'oxygène forment l'eau, il y a environ 40 réactions élémentaires. Selon le contexte, plusieurs de ces réactions peuvent être négligées. Pour plusieurs des réactions élémentaires, un changement des coefficients de taux n'a presque pas d'effet sur une solution dépendante du temps. Si on calcule tous les ordres pour le taux de réaction global, c'est une tâche qui demande beaucoup de temps mais qui n'est pas nécessaire puisqu'il n'y a que quelques réactions importantes qui affectent fortement les taux de réaction chimique globale. Ces quelques étapes importantes de réaction sont des réactions limites de taux [4]. C'est pour cette raison que nous choisirons les réaction suivantes pour résoudre notre problème.

Si une équation d'un schéma réactionnel complet est donnée par



alors la loi de taux pour la formation de l'espèce i dans la réaction r est donnée par l'expression

$$\left(\frac{\partial c_i}{\partial t}\right)_r = K_r (v''_{ri} - v'_{ri}) \prod_{j=1}^N c_j^{v_{ij}}, \quad (3-4)$$

où c_j représente les concentrations des différentes espèces.

Typiquement le coefficient de taux des réactions chimiques dépendent fortement et de façon non linéaire de la température[4], cette dépendance de la température peut être décrite par une formule simple (loi d'Arrhénius),

$$K_r = A'_r \exp\left(-\frac{E_r}{R_u T}\right), \quad (3-5)$$

A'_r a ses dépendances en température et en pression , typiquement,

$$A'_r = A_r T^\beta . \quad (3-6)$$

La dépendance en température du coefficient A'_r est normalement faible par rapport à la dépendance exponentielle. L'énergie d'activation E_r correspond à une barrière d'énergie qui doit être franchie pendant la réaction. Elle peut être zéro, si de nouveaux liens sont formés simultanément avec la brisure des anciens liens [4]. La dépendance en pression est reliée avec la concentration du mélange.

3.1 Mécanisme de réaction choisi pour la simulation

Une réaction globale de réaction entre l'hydrogène et l'air est une simplification du mécanisme de réaction ,



Le problème principal concernant l'utilisation de mécanismes de réaction détaillés provient du fait que l'équation de conservation des espèces doit être résolue pour chaque espèce. Ainsi, il est préférable d'utiliser des approches simplifiées des cinétiques chimiques. Ceci peut être réalisé en réduisant le schéma réactionnel. Dans ce travail, nous utiliserons un mécanisme réduit [3]. Aux basses pressions, en supposant qu'il n'y a aucune réaction de mur (Les réactions de la phase gazeuse avec le récipient sont, généralement, des réactions non élémentaires). À partir de cette hypothèse, nous pouvons négliger la dépendance de la pression dans le facteur Arrhénius ce qui fait que toutes les réactions que nous considérons sont des réactions élémentaires. Donc, la réaction $\text{H}_2\text{-O}_2$ peut être représentée par le mécanisme :



avec

$$K_1 \approx 10^{12} \exp(-39.0/R_u T) \text{ cm}^3 / \text{mole. sec},$$

$$K_2 \approx 10^{13.8} \exp(-5.9 / R_u T) \text{ cm}^3 / \text{mole. sec},$$

$$K_3 \approx 10^{14} \exp(-16.5 / R_u T) \text{ cm}^3 / \text{mole. sec},$$

$$K_4 \approx 10^{13} \exp(-9.4 / R_u T) \text{ cm}^3 / \text{mole. sec},$$

$$K_5 \approx 10^{17} \text{ cm}^3 / \text{mole. sec},$$

où nous négligeons la dépendance en température du facteur pré-exponentiel A' (équation (3-6)). Le schéma réactionnel compte donc sept espèces (H_2 , O_2 , H_2O , O , H , OH , N_2).

Les réactions en chaîne sont les types de réactions chimiques les plus courantes. Elles consistent en des séries de réactions consécutives, compétitives et opposées, avec différentes constantes de taux de réaction. Ces réactions chimiques complexes se produisent dans tous les processus de combustion. Dans un processus de réaction, les espèces les plus actives sont appelées les radicaux libres. Les réactions élémentaires sont appelées réactions d'initiation de chaîne ou de terminaison de chaîne selon qu'elles produisent ou qu'elles détruisent les radicaux libres. De plus, selon le rapport du nombre de radicaux libres produits par rapport à ceux du côté des réactants, les réactions élémentaires sont appelées réactions de propagation en chaîne si le rapport est égal à 1, et réactions de branchement en chaîne si le rapport est supérieur à 1.

En ce qui concerne le schéma réactionnel utilisé dans ce travail, décrit par l'équation (3-8), la première réaction est la réaction d'initiation en chaîne, où les espèces réactives (OH) sont formées à partir d'espèces stables. La seconde réaction est une réaction de propagation en chaîne, où les espèces réactives intermédiaires réagissent avec les espèces stables pour former d'autres espèces réactives. La réaction de branchement en chaîne se produit lorsqu'une espèce réactive réagit avec une espèce stable pour former deux espèces réactives (réactions (2) et (3) dans l'équation (3-8)). La réaction de terminaison en chaîne se produit lorsqu'une espèce réactive réagit avec une autre espèce réactive pour former des espèces stables.

Dans un mélange d'hydrogène et d'oxygène, il est plausible que la présence d'une valence libre sous la forme d'un radical OH ou d'un atome H devrait résulter selon la forme de l'équation (3-8) entre (2) et (4). La première réaction (2) est endothermique [3].

À la température de la pièce et même à des températures plus élevées, un mélange d'hydrogène et d'oxygène est très stable même si les atomes d'hydrogène sont introduits par une autre source. À température élevée, la réaction de branchement en chaîne ((2), (3), (4) dans l'équation (3-8)) devient suffisamment plausible lorsque comparée au taux de retrait des atomes H. On assiste alors à la multiplication des valences libres et un emballement des réactions en chaîne qui peut se traduire par une explosion.

Notons que les explosions sont convenablement classifiées en deux catégories distinctes : les explosions en chaîne branchée par lesquelles le taux de réaction augmente sans limite à cause du branchement de chaîne; et les explosions thermiques par lesquelles il y a une augmentation exponentielle dans le taux de réaction provenant d'une réaction chimique exothermique des réactants, et d'une augmentation de la magnitude des constantes du taux de réaction spécifique.

Chapitre 4 Méthodologie

4.1 Solution numérique d'une équation de conservation

Bien que nous ayons modélisé tous les termes qui empêchaient la fermeture du système d'équations, nous ne pouvons toujours pas obtenir une solution complète de ce système d'équations à cause de sa non-linéarité. Une solution analytique des équations de conservation est impossible, sauf dans des cas-limites particuliers (pour certains problèmes en une dimension par exemple). C'est pourquoi nous utiliserons des méthodes numériques basées sur la discrétisation des équations de conservation. Pour les aspects numériques, nous utiliserons le logiciel commercial Fluent 5.1[7]. Le solveur Fluent 5.1 peut traiter les aspects numériques, nous permettant de nous concentrer sur la modélisation.

4.1.1 Discrétisation des équations du mouvement

D'une manière générale, une solution numérique d'un problème défini sur un domaine continu consiste à trouver une solution approchée dépendant d'un nombre fini de paramètres, ou encore de trouver des valeurs approchées de la solution en un nombre fini de points appelé nœuds. On permet ensuite trouver une solution approchée par interpolation entre ces valeurs. Pour que la solution numérique obtenue représente de manière aussi précise que possible la solution analytique, il faut que les paramètres dont elle dépend (ou les valeurs nodales) satisfassent un certain nombre de relations algébriques qui représentent en quelque sorte l'équation que doit satisfaire la fonction sur le domaine continu. L'obtention de ces relations algébriques à partir de l'équation continue s'appelle la discrétisation du problème. Elle peut

être effectuée à l'aide de diverses techniques. Nous avons utilisé la méthode des volumes finis (voir l'appendice I).

4.1.2 Conditions initiales et conditions aux frontières

Afin de solutionner les équations différentielles nous devons spécifier les conditions initiales du problème de même que ses conditions aux limites. Les conditions initiales sont critiques pour un écoulement non-stationnaire comme le problème de combustion que nous considérons. Par exemple, nous imposerons que le profil de température initial $T|_{t=0} = T(x,y,z)$ est $T|_{t=0} = 300$ K dans tout l'espace sauf au point d'allumage. Les conditions initiales spécifiques à notre problème seront discutées dans la section 5.1.

Quant parlons conditions aux frontières, nous supposons que les parois du système sont adiabatiques, c'est-à-dire que la composante normale à la surface des parois du système du flux de chaleur est zéro. Les conditions aux frontières seront décrites plus tard.

4.1.3 Maillage adaptatif

Une procédure d'adaptation du maillage permet de modifier ce dernier en fonction de la solution. Cette procédure peut raffiner ou réduire la finesse d'un maillage, selon la valeur des observables ou du gradient de ces derniers. La procédure d'adaptation permet d'ajouter des cellules là où c'est nécessaire afin d'augmenter la précision des résultats. Il y a donc, lorsqu'on utilise un maillage adaptatif, une rétroaction de la solution sur le maillage. Nous choisissons, pour l'adaptation, de raffiner le maillage en fonction du taux de réaction de la cinquième réaction chimique dans l'équations (3-8). Ce critère d'adaptation permet de raffiner le maillage près du front de flamme.

4.2 Géométrie utilisée dans les simulations

La simulation a été effectuée en considérant le fluide comme compressible et en incluant les effets de viscosité dans l'équation de l'énergie. Nous simulerons la propagation de flammes dans un tube de 6.5 m de longueur avec un diamètre interne de 66 mm. Ce tube représente le tube PHD (pre-heatable detonation tube) utilisée pour les expériences effectuées à l'Université technique de Munich, Allemagne (voir figure 4.1).

L'effet des obstacles sera étudiée en introduisant 0, 1, 4, 8 et 16 obstacles (des anneaux ou orifices) dans le tube. Les obstacles ont 5 mm d'épaisseur et sont séparés de 185 mm de l'un à l'autre. Le premier obstacle est situé à 185 mm à l'extrémité gauche du tube qui est fermé aux deux bouts. Leur rapport d'obstruction, défini comme suit, est par le rapport de la surface de l'obstacles et la surface de section interne de tube explosion. Dans notre cas, le rapport d'obstruction est égal à 60%. Le rayon des anneaux R_a est obtenu du rapport d'obstruction par la formule suivante[7] :

$$\begin{aligned} B_R &= S_{obs} / S_{tub} & (4-1) \\ &= \pi (R_{tub}^2 - R_a^2) / \pi R_{tub}^2 = (0.033^2 - R_a^2) / \pi (0.033)^2 \end{aligned}$$

d'où $R_a = 0.0187$ m si $B_R=0.6$.

Nous pouvons profiter de la symétrie cylindrique pour réduire la taille du maillage. Notons que nous pouvons exploiter la symétrie cylindrique seulement si nous négligeons les effets de gravité. Cette approximation est valable lorsque la concentration d'hydrogène est supérieure à 10%, puisque la vitesse de flamme est assez rapide pour que les effets de bouées

soient négligeables. On n'a alors qu'à créer une tranche rectangulaire bi-dimensionnelle de 33 mm par 6.5 m. Cette simplification permet de ramener à un problème en deux dimensions et d'économiser du temps de calcul, ainsi que de la mémoire d'ordinateur. Puisque nous utilisons la méthode des volumes finis pour résoudre les équations du mouvement, nous avons dû créer les maillages nonstructurés nécessaires aux simulations en utilisant le logiciel GAMBIT. Afin d'examiner des effets thermodynamiques autour de la frontière, cette dernière a été maillée finement. Le nombre de mailles, qui varie en fonction du nombre d'obstacles, se situe entre 4000~10000 de maillage en quadrilatère.

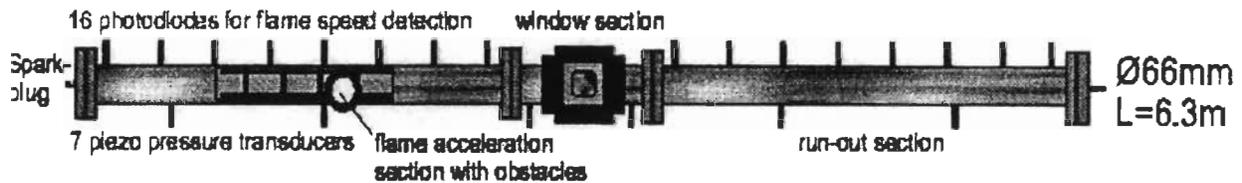


Figure 4.1. Le tube à explosion PHD utilisé dans les expériences du LAT.

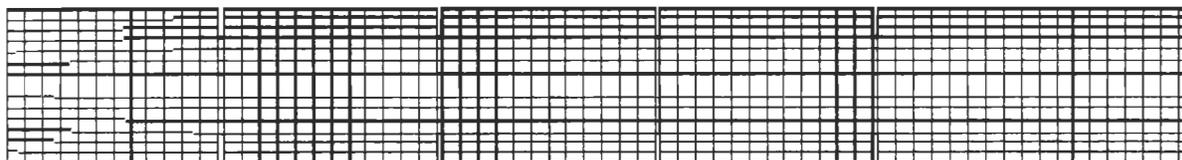


Figure 4.2. Maillage typique utilisé pour effectuer les simulations.

4.3 Propriétés thermodynamiques des fluides utilisés lors des simulations

Les propriétés thermodynamiques des fluides nécessaires à la simulation comprennent la viscosité μ (kg/m-s), la conductivité thermique λ (w/m-k), la chaleur spécifique c_p (J/kmol-K) et les coefficients de diffusion binaires D_{ij} . Ils interviennent également au travers dans différents nombres sans dimension dans l'équation de Navier-Stokes, comme par exemple le nombre de Prandtl P_t , le nombre de Schmidt S_{ct} , etc. voir appendice IV pour détail.

Chapitre 5 Résultats

Nous présenterons dans cette section les résultats des simulations de la propagation de flammes dans un mélange pré-mélangé d'hydrogène et d'air. Les simulations ont été effectuées en utilisant le logiciel Fluent version 5.1 de la société Fluent Inc.

Le schéma réactionnel à cinq équations discuté dans le chapitre 3 a été utilisé pour les simulations. Des études avec le modèle EDM ont été effectuées mais sans succès. Ce modèle (voir equation 2-3.1) n'arrive pas à prédire correctement la formation des espèces intermédiaires (en particulier les réactions impliquant une troisième espèce inerte), et la vitesse de flamme résultante était trop faible. L'utilisation d'une approche de type PDF pour un schéma réactionnel avec plusieurs espèces nécessiterait l'utilisation de distributions de probabilité conjointes et serait exigeante du point de vue de la mémoire vive requise et du temps de calcul. Cette approche déborde donc le cadre de ce travail. On négligera donc, en utilisant le schéma réactionnel à cinq réactions, l'effet des fluctuations turbulentes sur le taux de réaction. On en tiendra cependant compte dans le calcul des propriétés de transport et par le calcul des quantités en tant que moyennes de Favre. Une telle approximation sera valide dans la limite des fluctuations turbulentes faibles.

5.1 Conditions initiales

Dans cette section, nous présentons les résultats de simulations sans obstacle et avec 1, 4, 8 et 16 obstacles. Dans tous les cas, les conditions initiales utilisées sont celles que l'on retrouve dans le tableau 5.1.

Tableau 5.1. Conditions initiales imposées au système. Les fractions de masses s'obtiennent des fractions molaires tels qu'indiqué dans l'appendice II.

Observables	11 vol. % H ₂	13 vol % H ₂
Pression de jauge (Pascal)	0	0
Vitesse axiale (m/s)	0	0
Vitesse radiale (m/s)	0	0
Température (K)	300	300
Énergie cinétique turbulente (m ² /s ²)	1	1
Taux de dissipation de l'énergie turbulente cinétique (m ² /s ³)	30	30
Fraction de masse de H ₂	0.0085621	0.010322
Fraction de masse de O ₂	0.2309169	0.230202
Fraction de masse de OH	0	0
Fraction de masse de H ₂ O	0	0
Fraction de masse de H	0	0
Fraction de masse de O	0	0

Après avoir initialisé le champ du fluide, on peut modifier certains observables dans des régions particulières du maillage à l'aide de la fonction de retouche (Patch)[7]. Ceci nous permet de simuler l'effet de l'allumage, correspondant à la flamme immédiatement après allumage. La partie initialement allumée est formée de trois zones rectangulaires, pour simuler l'effet d'un gradient dans les valeurs initiales.

Les zones retouchées pour l'allumage illustrent une méthode dans la simulation, Mais selon [7], Les valeurs initiales dans les zones retouchées n'effectent pas les résultats finaux de la simulation .

Pour les simulations dans les cas sans obstacles ou avec un seul obstacle, les zones 1, 2 et 3 sont définies par les sommets suivants, selon une coupe orientée le long de l'axe du cylindre, (-2.0, -1.9), (-1.9, -1.8) et (-1.8, -1.7). Pour les simulations avec 4, 8 et 16

obstacles, les zones 1, 2 et 3 se situent entre les sommets : (0.065, 0.095), (0.095, 0.125) et (0.125, 0.155).

Les valeurs imposées aux observables sur les zones 1 et 3 sont les mêmes. Les unités des éléments du tableau 5.2 sont les mêmes que dans le tableau 5.1. Voir l'appendice II pour calculer les quantités physiques dans le tableau 5.1.

Tableau 5.2. Les valeurs de la zone d'allumage pour le système 11 vol. % H₂ dans l'air.

Observables	Zone 1	Zone 2	Zone 3
Pression de jauge	0	0	0
Vitesse axiale	0.1	0.1	0.1
Vitesse radiale	0	0	0
Température	1300	1600	1300
Énergie cinétique turbulente k	0.9	0.7	0.9
Taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente	38	48	38
Fraction de masse de H ₂	0.01	0.001	0.01
Fraction de masse de O ₂	0.2	0.105	0.2
Fraction de masse de OH	0.001	0.0005	0.001
Fraction de masse de H ₂ O	0.05	0.25	0.05
Fraction de masse de H	0.0005	0.0001	0.0005
Fraction de masse de O	0.001	0.0008	0.001

Tableau 5.3. Les valeurs d'allumage pour 13 vol. % H₂ dans l'air.

Observables	Zone 1	Zone 2	Zone 3
Pression de jauge	0	0	0
Vitesse axial	0.1	0.1	0.1
Vitesse radial	0	0	0
Température	1300	1600	1300
Énergie cinétique Turbulente k	0.9	0.7	0.9
Taux de l'énergie cinétique turbulente ϵ	38	48	38
Fraction de masse de H ₂	0.008	0.0008	0.008
Fraction de masse de O ₂	0.18	0.0705	0.18
Fraction de masse de OH	0.0005	0.0001	0.0005
Fraction de masse de H ₂ O	0.05	0.20	0.05
Fraction de masse de H	0.0001	0.00005	0.0001
Fraction de masse de O	0.0008	0.0005	0.0008

5.2 Vitesse de flamme et pression

La figure 5.1 montre la vitesse de flamme instantanée et la pression en fonction du temps pour un système prémélangé d'air et d'hydrogène avec une concentration de 11 vol.% d'hydrogène dans un tube sans obstacle.

La vitesse du front de flamme est obtenue à partir de la position du front de flamme en fonction du temps par une méthode de différence centrale impliquant 4 points (voir Appendice III pour les détails). La position du front de flamme a été déterminée à partir de la position du maximum du taux de réaction chimique à un instant donné. Les simulations montrent que la vitesse atteint initialement une valeur maximale de 35 m/s. Cette vitesse élevée provient des

conditions initiales imposées pour allumer la flamme. La vitesse se stabilise cependant rapidement près de sa valeur moyenne de 14 m/s.

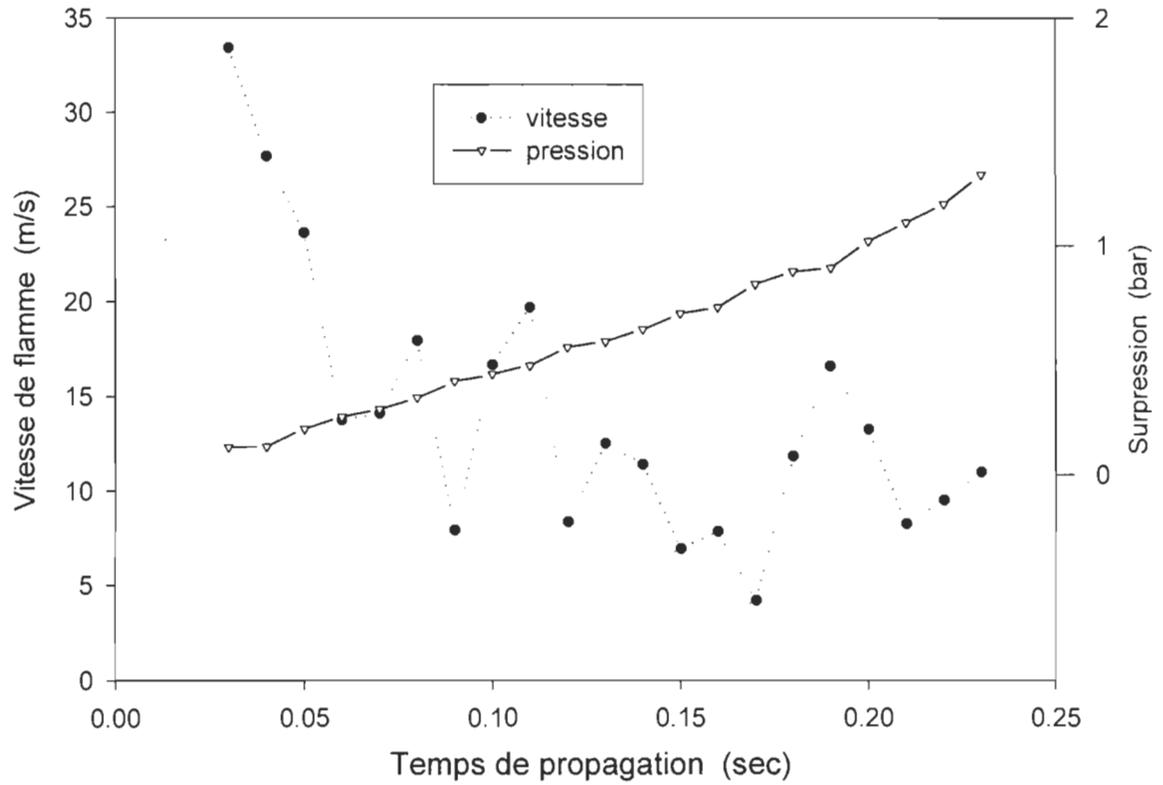


Figure 5.1. Vitesse instantanée et pression en fonction du temps pour un tube sans obstacle, pour une concentration de 11 vol.% H₂.

Une vitesse calculée (se référer à l'appendice III pour le calcul) variant entre 1.5 à 3.5 m/s a été observée expérimentalement avec une concentration de 11 vol.% H₂ par le laboratoire de Université de Munich(LAT), en Allemagne, pour un tube à explosion avec une chambre d'expansion à l'extrémité du tube. La même diminution de la vitesse de flamme initiale était observée. Cependant le système ne correspond pas à celui que nous avons étudié, puisque les conditions frontières sur la pression sont affectées par la présence de la chambre d'expansion.

La vitesse plus faible observée expérimentalement s'expliquerait par le fait que la pression tend, à cause de la chambre d'expansion, à demeurer constante dans le tube en fonction du temps. Puisque le taux de réaction global varie exponentiellement avec la pression [11], ceci affectera fortement la vitesse de flamme.

Des simulations avec un schéma réactionnel réduit confirment qu'une pression maintenue constante à une extrémité empêche toute augmentation de la pression si cette dernière est constante même à une vitesse de flamme de l'ordre 3.2 m/sec [12]. La seule expérience disponible dans le tube à explosion pour une concentration de 11 vol.% montre que la vitesse peut atteindre presque 4 m/s, soit un facteur de trois plus petit que la vitesse de flamme prédite par les simulations. On s'attend généralement à ce qu'en l'absence d'obstacles, le maximum de vitesse apparaisse au milieu du tube (comme c'est le cas pour les expériences effectuées avec une concentration d'hydrogène de 16 vol.%. Cependant ces expériences montrent un ralentissement important et difficile à justifier de la flamme après les 2 premiers mètres (figure 5.2). La comparaison avec les simulations, qui prédisent une vitesse trois fois plus grande que la vitesse initiale, doit donc être nuancée.

L'augmentation monotone de la pression en fonction du temps observée dans la figure 5.1 s'explique de la façon suivante. Lorsque le tube est complètement fermé, la masse totale du mélange est constante. Par conséquent la densité moyennée sur l'ensemble du volume du tube demeure constante. Selon la loi des gaz parfaits, $\bar{P} = \bar{p}R\bar{T}$. La pression dépendant donc

linéairement de la température moyenne \bar{T} (la moyenne étant évaluée sur l'ensemble du tube). Puisque \bar{T} augmente avec la progression du front d'onde, on s'attend à ce que la pression augmente dans une même proportion.

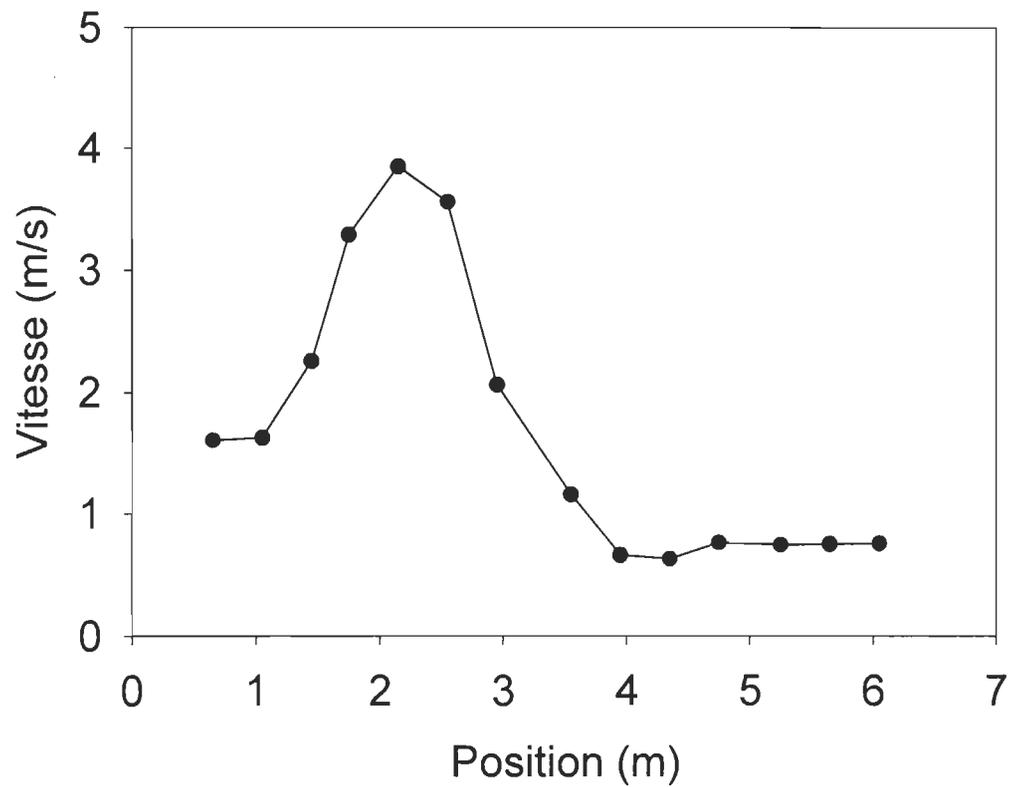


Figure 5.2. Vitesse de flamme en fonction de la position. Résultat expérimental effectuée à LAT en utilisant le tube PHD pour une concentration de 11 vol.% H₂ en l'absence d'obstacles.

5.2.1 Effet des obstacles

Nous avons étudié l'effet des obstacles sur la propagation de flammes d'hydrogène dans un tube. Les obstacles étaient des réseaux de 1, 4, 8 et 16 obstacles (des orifices cylindriques) ayant un rapport d'obstruction de 60%. Les principaux observables affectés par la présence d'obstacles sont la pression, le champ de vitesse, les fluctuations turbulentes de vitesse et la vitesse du front de flamme. La figure 5.3 montre un profil typique de température pour différents temps qui illustre l'effet du passage du front de flamme autour d'un obstacle.

Le tableau 5.4 montre l'effet des obstacles sur les principales observables, v' est la racine moyenne carré de fluctuation maximale de vitesse, obtenue grâce à

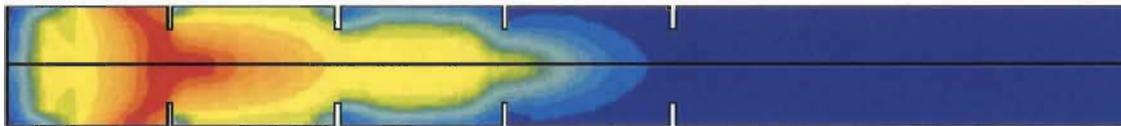
$$v' = \sqrt{2k'_{\max}} . \quad (5-1)$$

On constate clairement une tendance à l'augmentation de la vitesse moyenne de flamme en fonction du nombre d'obstacles. Il est difficile de corréler plus précisément l'augmentation de la vitesse moyenne de flamme (qui est une propriété globale) à l'amplitude des fluctuations turbulentes ou à une valeur de k du tableau (qui sont des propriétés locales). Généralement, on s'attend à ce que la vitesse de flamme moyenne croisse approximativement de façon proportionnelle à l'amplitude moyenne des fluctuations de vitesses [4]. Notons que la vitesse de flamme du système avec 4 obstacles est presque identique à celle du système avec un obstacle, même si l'amplitude des fluctuations de vitesse (v') est beaucoup plus élevée. Ceci est dû à la présence d'une interaction du front de flamme avec des ondes de pression dans le cas avec 4 obstacles, qui sera discutée en détails dans la section suivante.

t=0.005 (sec)



t=0.001 (sec)



t=0.015 (sec)



Figure 5.3. Contours de température pour trois temps ($t=0.005$, 0.01 et 0.015 sec respectivement) avec un mélange de $11 \text{ vol.}\%$ H_2 dans l'air et 4 obstacles.

t=0.03 (sec)

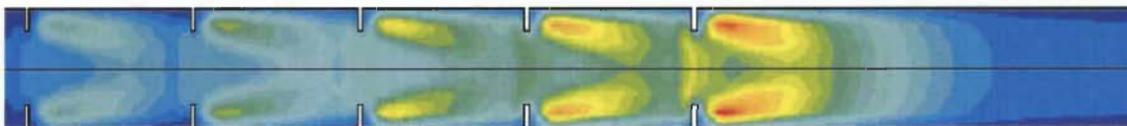


Figure 5.4. Contours de k pour un mélange de $11 \text{ vol.}\%$ d'hydrogène dans l'air et 8 obstacles ($t=0.03$ secondes).

Tableau 5.4 Effet des obstacles sur certaines observables.

Nombre d'obstacles	k_{\min} (m ² /s ²)	k_{\max} (m ² /s ²)	v' (m/s)	\bar{v} (m/s)	v_{milieu}^1 (m/s)	P_{\max}^2 (bar)
0	0.0037	30.6	7.8	13	13	2.0
1	0.14	85.1	13	24	28	3.2
4	0.16	251	22	26	29	3.3
8	0.086	3140	79	47	51	
16	0.19	6370	112	266	1600 ³	7.9

¹ P_{\max} a été mesuré à $x = 3.25$ m sur l'axe des x .

²L'observable v_{milieu} représente une vitesse instantanée au milieu du tube (à 3.25 m).

³Ceci correspond à une détonation qui n'est pas observée expérimentalement.

Les valeurs maximales de k étaient obtenues en arrière des obstacles. Les fluctuations turbulentes sont donc particulièrement intenses à ces endroits (voir figure 5.4). Dans le cas des simulations avec 16 obstacles, la forte valeur de v_{milieu} indique la présence d'une détonation. La figure 5.5 montre la vitesse du front de flamme en fonction de la position de ce dernier. La vitesse de flamme correspond à une déflagration rapide (100-200 m/sec) jusqu'à la sortie du réseau d'obstacle où la flamme subit une très forte accélération. Avant la forte accélération observée, la vitesse est cohérente avec ce qui a été observé expérimentalement au LAT dans une configuration expérimentale avec 16 obstacles proches du maillage utilisé (les mesures de vitesse donnent entre 266 et 444 m/s [5]). La forte accélération menant à une détonation n'est cependant pas observée. Nous avons repris les mesures avec une concentration initiale d'hydrogène de 13 vol.% et nous avons observé le même phénomène (figures 5.6 et 5.7). Le front de flamme est précédé par un front de pression avec un pic bien défini. Le modèle à cinq équations prédit donc une détonation avec des vitesses de flamme très élevées qui ne sont pas observées expérimentalement.

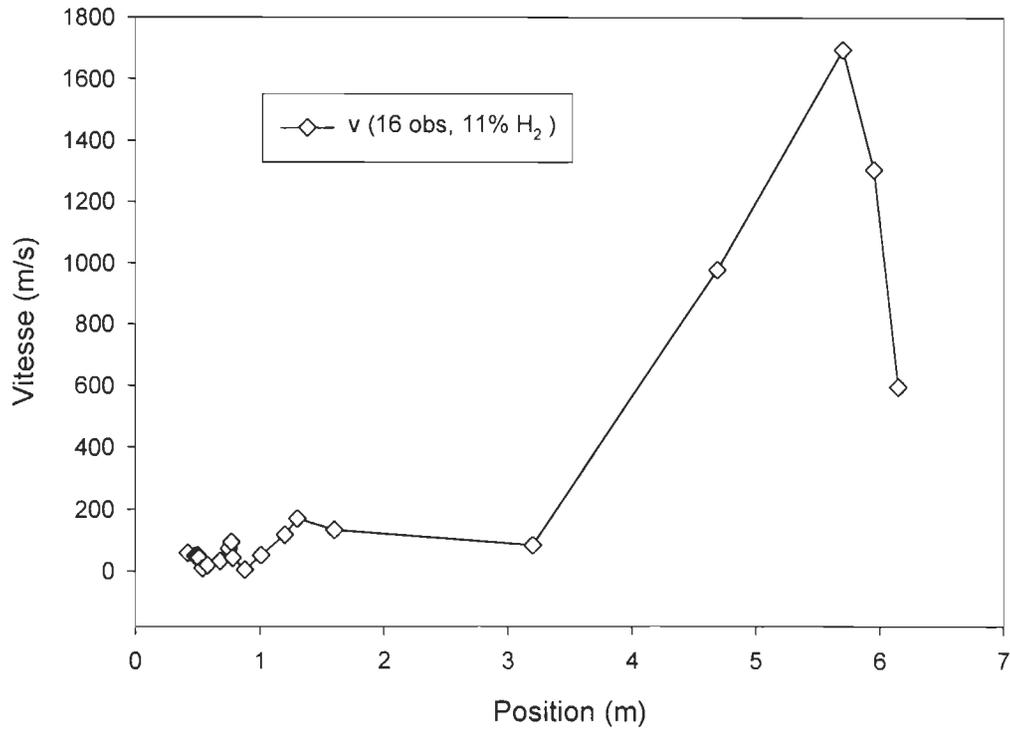


Figure 5.5. Vitesse de flamme en fonction de la position du front de flamme avec 16 obstacles et 11 vol.% H₂ .

Autrement dit, pour plus que 8 obstacles, il faut tenir compte de l'effet des fluctuations sur le taux de réaction chimique. La fluctuation de taux de réaction chimique ne peut pas être négligée. Dans l'approche utilisée ci-haut, la turbulence ne se manifeste qu'à travers des modifications aux coefficients de transports. Dans le système d'équations du mouvement, le taux de réaction chimique moyen peut devenir très différent de sa valeur moyennée sur les fluctuations turbulentes, si ces dernières sont importantes ($\bar{w} \neq w$). Le modèle mixte Arrhénius/EDM a également été étudié pour tenir compte des fluctuations sur le taux de

réaction chimique. Si la turbulence n'est pas trop élevée, on se retrouve dans le diagramme de Borghi (figure 2.2), autour de la ligne $Da = 1$. Cette limite correspond donc à celle utilisée ci-haut. Ce modèle ne fonctionne cependant pas dans notre cas puisqu'il ne prédit pas correctement le comportement des espèces intermédiaires comme O, H, OH etc. Il nécessite l'usage d'un schéma réactionnel global. Avec un schéma réactionnel à cinq équations, la vitesse de flamme demeurerait trop petite. Pour tenir compte de l'effet des fluctuations turbulentes, il faut utiliser une approche où on tient compte explicitement de l'effet des fluctuations sur le taux de réaction chimique. L'approche de type PDF est bien adaptée pour ceci (voir le chapitre 2).

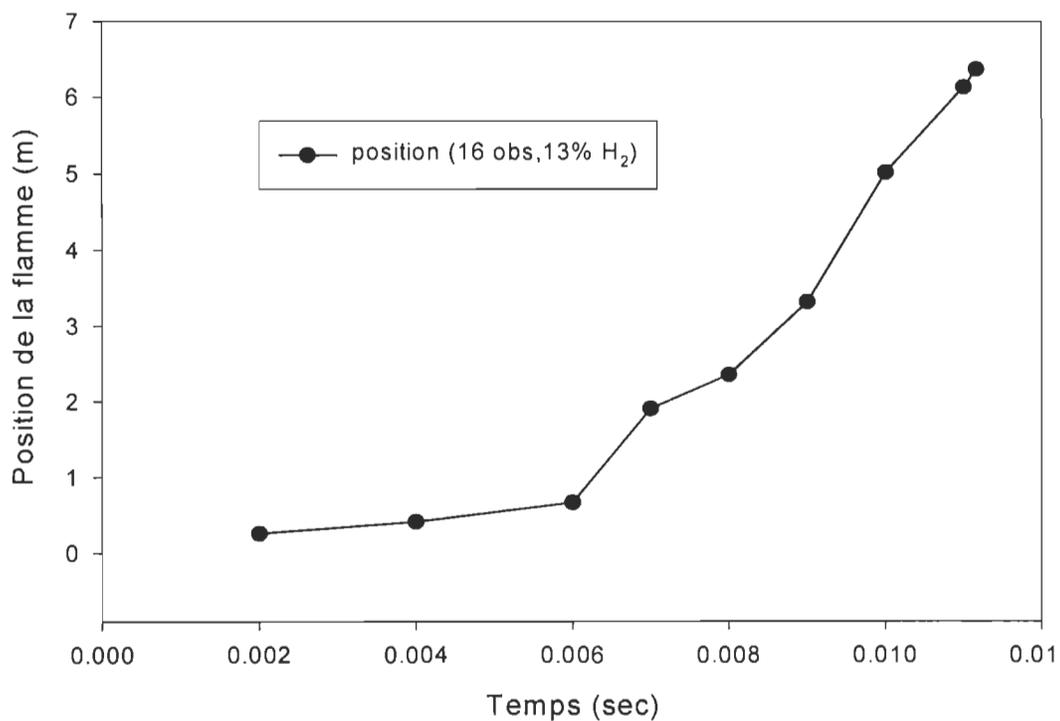


Figure 5.6. Position en fonction du temps avec 16 obstacles et 13 vol.% H₂. Le changement brusque de pente se produit peu après la sortie du réseau d'obstacles, et correspond à une forte accélération.

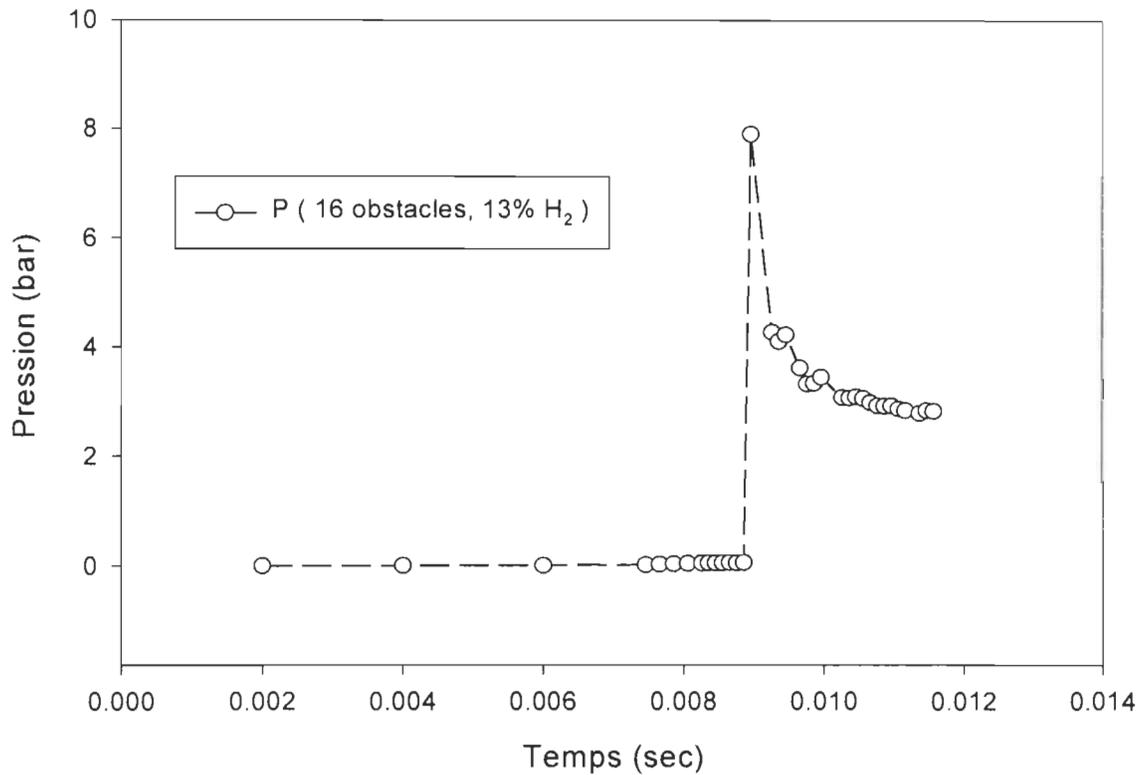


Figure 5.7. Pression en fonction du temps avec 16 obstacles et 13 vol.% H₂ (au milieu du tube : x = 3.25 m).

La figure 5.8 montre d'ailleurs les prédictions de l'approche pdf pour la position du front de flamme en fonction du temps pour le cas avec 16 obstacles et un maillage similaire à celui que nous avons utilisé pour le modèle à 5 réactions.

La vitesse de flamme maximum prédite par l'approche pdf était de 500 m/sec, ce qui correspond à une déflagration rapide, en accord avec les résultats expérimentaux. L'approche

à 5 réactions prédisait par contre une vitesse maximale trois fois plus élevée, correspondant à une détonation.

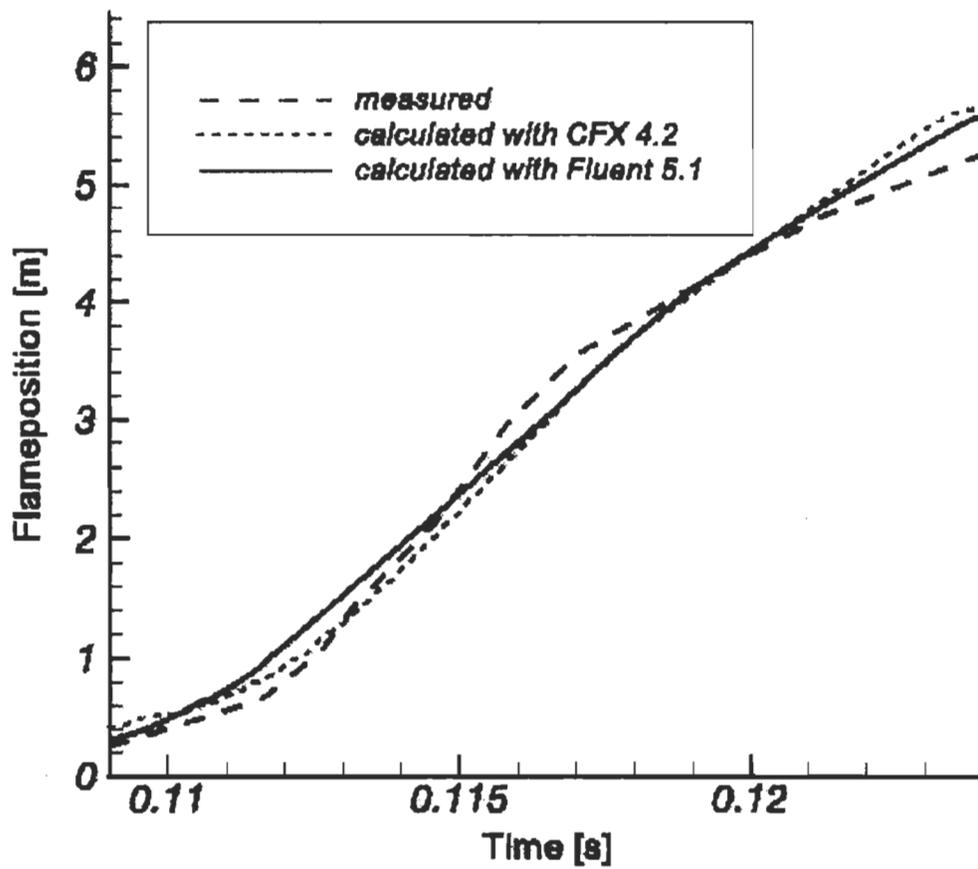


Figure 5.8. Position du front de flamme en fonction du temps: prédiction de l'approche pdf et résultats expérimentaux pour un mélange de 13 vol.% d'hydrogène et d'air[13] .

Un maximum de pression d'environ 3 bars est également correctement prédit par l'approche pdf (figure 5.9), alors que l'approche à 5 réactions prédit une surpression presque trois fois plus élevée (soit 8 bars).

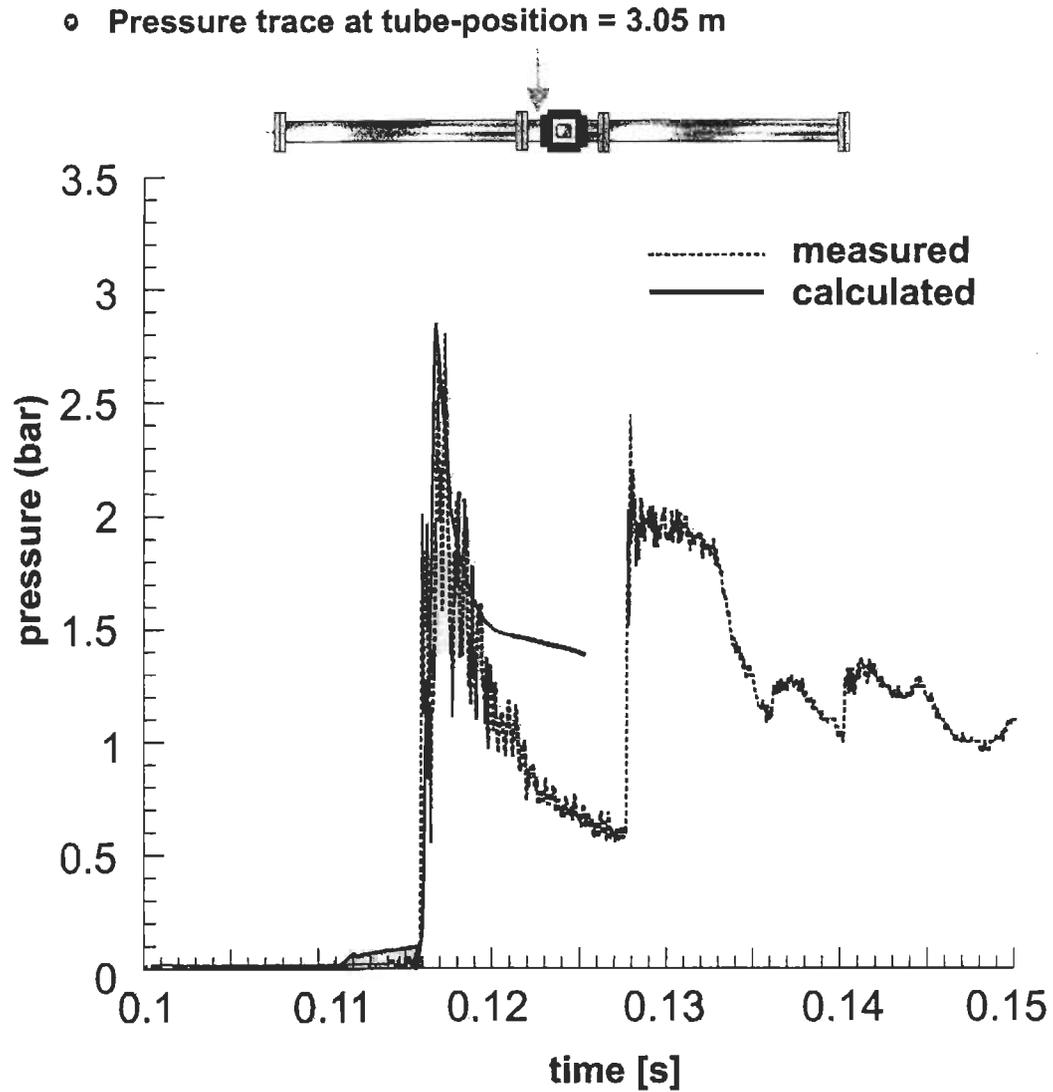


Figure 5.9. Pression en fonction du temps : comparaison entre la théorie et l'expérience pour l'approche pdf[13].

5.3 Interaction entre le front de flamme et la pression

Nous avons noté, dans la section précédente, le comportement anormal du front de flamme pour la géométrie avec quatre obstacles. Dans ce cas, la vitesse de flamme est suffisamment élevée pour générer une onde de pression dynamique pouvant influencer le front de flamme, mais suffisamment faible pour que le front de flamme soit influencée par l'onde de pression. L'indication de cette interaction entre le front de pression et le front de flamme se manifeste dans les oscillations observées dans la figure 5.10.

Concentrons-nous sur le premier minimum observé près de l'origine. Ce minimum correspond à un recul du front de flamme au centre du tube. Il se trouve environ au temps de propagation $t_1 = 0.04$ s (un second minimum apparaît autour de 0.07 s). Les deux valeurs minimales des positions sont respectivement $D_1 = 1.70$ m et $D_2 = 2.46$ m. Ce comportement s'explique par l'arrivée en sens inverse d'une onde de pression dynamique, définie comme la contribution à la pression totale provenant du champ de vitesse des gaz du mélange, qui a été réfléchi à l'extrémité du tube. Lorsque l'onde de pression frappe la flamme, le champ de vitesse diminue ou s'inverse, retourne dans le sens opposé à la direction de propagation, ce qui provoque les oscillations observées dans la figure 5.10. L'onde de pression, en frappant les murs adiabatiques, oscille dans le tube provoquant le mouvement d'aller-retour observé dans le front de flamme.

Les figures 5.11 à 5.13 illustrent graphiquement les détails des interactions entre le pic de pression et le front de flamme. La figure 5.11 montre l'onde de pression (dont le maximum est situé à environ $x=3$ m et qui se dirige vers la gauche) rencontrant le front de flamme, qui correspond à l'avant-dernière structure (minimum prononcé un peu avant la position $x=2$ m) de

l'onde de pression. Les minimums locaux situés près de l'origine (avant $x=1\text{m}$) correspondent aux augmentations de pression locales due à la présence des obstacles.

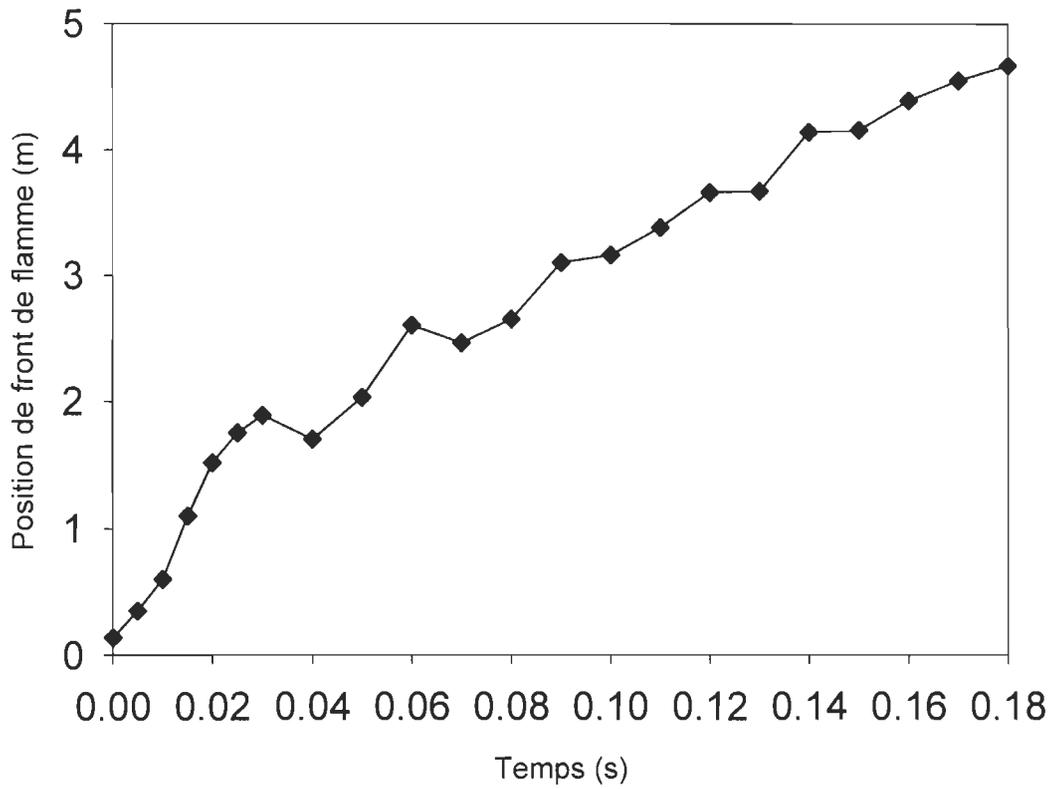


Figure 5.10. Position du front de flamme en fonction du temps avec 4 obstacles et 11 vol.%

H₂.

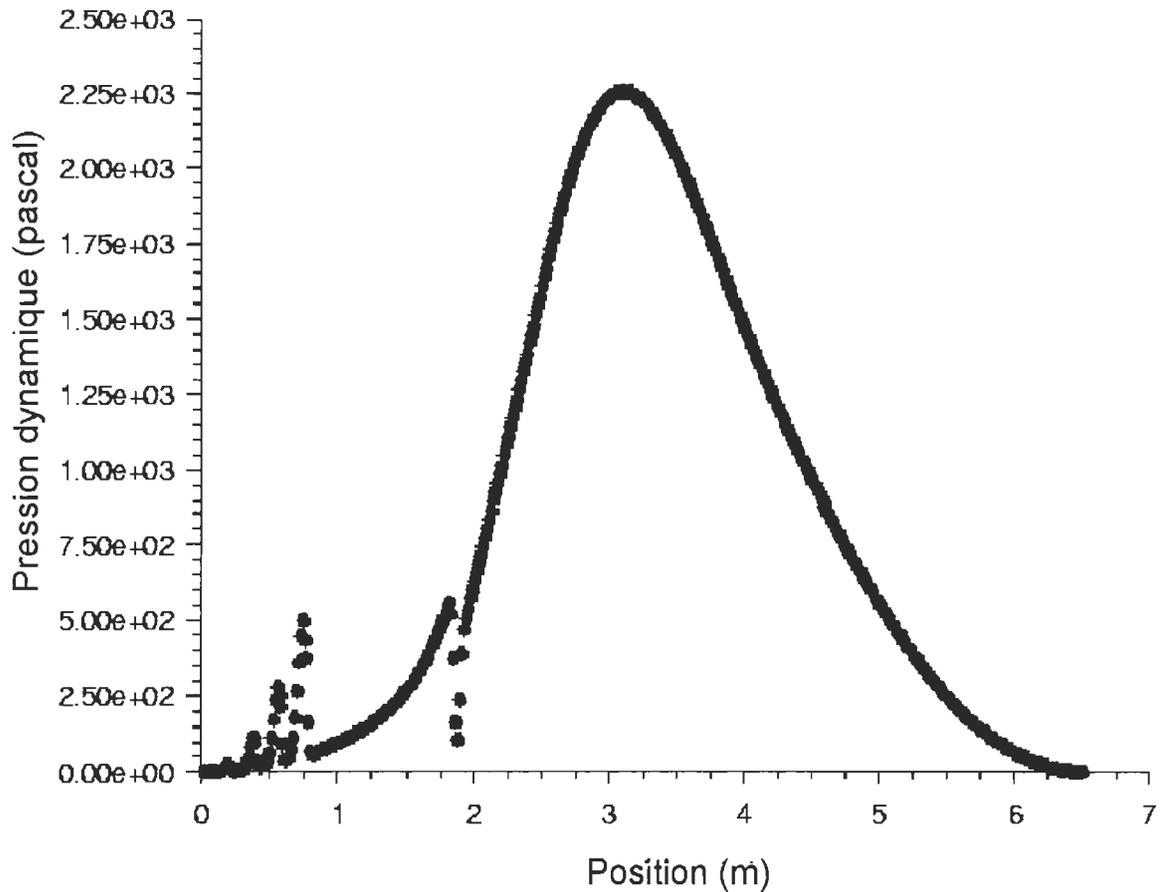


Figure 5.11. Pression dynamique en fonction de la position pour une concentration de 11 vol.% H₂ par volume et pour un tube avec 4 obstacles, à t = 0.035 seconde.

La figure 5.12 montre l'onde de pression (en rouge) ayant tout juste dépassée le front de flamme et ayant été réfléchié à l'origine, se dirigeant vers la droite. En noir, la température indique la position du front de flamme. La figure 5.13 montre le maximum de pression qui s'est déplacé vers l'extrémité droite. L'onde rebondira contre le mur, et interagira à nouveau avec le front de flamme, provoquant ainsi des oscillations de vitesse. Ces oscillations sont

moins importantes lorsqu'il y a davantage d'obstacles parce que la vitesse de flamme est suffisamment élevée pour être moins affectée par l'onde de pression.

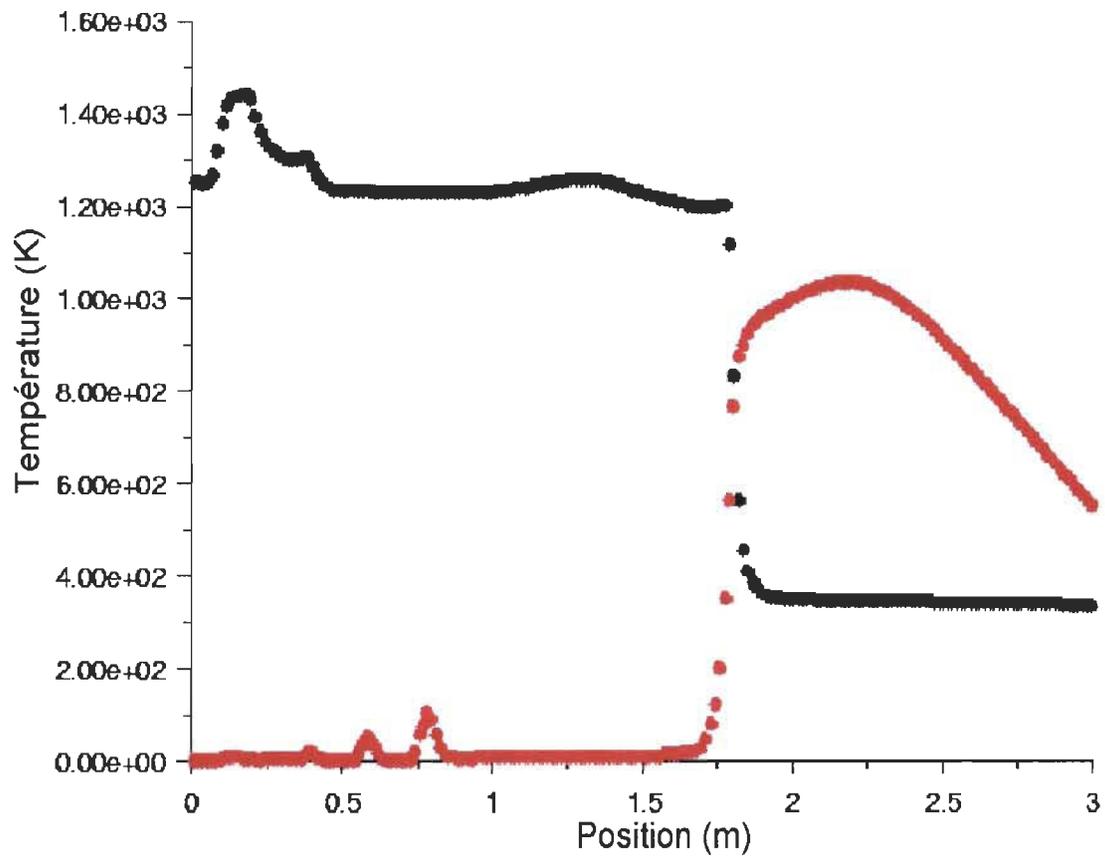


Figure 5.12. Pression dynamique en fonction de la position pour une concentration de 11 vol.% H₂ et pour un tube avec 4 obstacles, à t = 0.04 seconde.

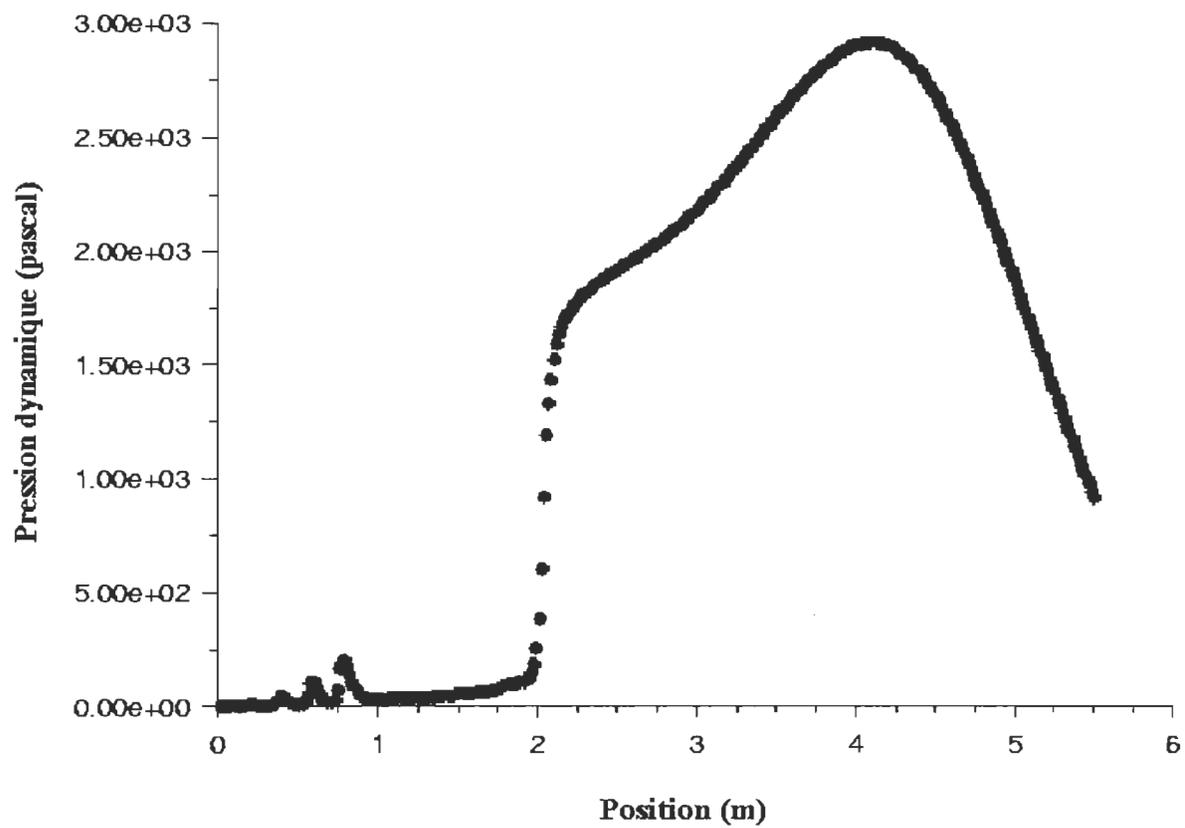


Figure 5.13. Pression dynamique en fonction de la position pour la concentration de 11 vol.% H₂ et pour un tube avec 4 obstacles, à t = 0.045 seconde.

Conclusion

Nous avons présenté une étude numérique de la propagation de flamme avec un schéma réactionnel à 5 équations et l'avons comparé aux résultats expérimentaux disponibles ainsi qu'à l'approche pdf. Nous avons réalisé des simulations pour les cas suivants :

- 1) avec 0, 1, 4, 8 et 16 obstacles,
- 2) avec des concentrations de 11 vol.% et de 13 vol.% de H₂ dans l'air.

Nous avons étudié l'effet des obstacles sur la propagation de flammes d'hydrogène dans un tube. Les obstacles étaient des réseaux de 1, 4, 8 et 16 obstacles (des orifices cylindriques) ayant un rapport d'obstruction de 60%. Les principaux observables affectés par la présence d'obstacles sont la pression, le champ de vitesse, les fluctuations turbulentes de vitesse et la vitesse du front de flamme. Nous avons constaté une tendance marquée à l'augmentation de la vitesse moyenne de flamme en fonction du nombre d'obstacles. Il nous a été difficile de corréler plus précisément l'augmentation de la vitesse moyenne de flamme (qui est une propriété globale) à l'amplitude des fluctuations turbulentes ou à une valeur de k (qui sont des propriétés locales). Généralement, on s'attend à ce que la vitesse de flamme moyenne croisse approximativement de façon proportionnelle à l'amplitude moyenne des fluctuations de vitesses (voir [4]), et nos résultats reproduisaient qualitativement cette hypothèse. Nous avons également observé une interaction entre une onde de pression et le front de flamme, qui provoquait des oscillations de la vitesse de flamme du système à 4 obstacles. Nous avons trouvé que le modèle prédisait, lorsque le nombre d'obstacles était de 16, une accélération brusque de la flamme d'un régime où la vitesse de flamme correspondait approximativement à ce qui est observé expérimentalement pour une déflagration rapide, vers une détonation. Bien que ce phénomène soit intéressant, l'approche à 5 réactions prédit cette transition pour des concentrations nettement trop faibles d'hydrogène dans l'air, et démontre clairement les

limites d'une approche où on néglige l'effet des fluctuations turbulentes sur la propagation de la flamme.

L'origine de cet échec du modèle à 5 réactions se trouve probablement dans le comportement des espèces intermédiaires. Il est possible également que les paramètres d'Arrhénius utilisés [3] exagèrent l'amplitude du taux de production et doivent être révisés. Ceci pourrait expliquer la vitesse trois fois plus élevée prédite par les simulations par rapport aux résultats expérimentaux en l'absence d'obstacles. Notons toutefois qu'il faut nuancer les résultats expérimentaux dans le tube PHD à 11 vol.% H₂ qui prédisent la même vitesse de flamme que dans le système avec une chambre d'expansion (on s'attendrait à une vitesse supérieure puisque la pression augmente en fonction du temps), et qui montrent une décélération suspecte après 2 mètres. Nous avons tenté d'utiliser une approche mixte Arrhénius-EDM qui n'a pas fonctionné puisque le modèle EDM ne prédisait pas correctement la formation des espèces intermédiaires et s'applique à des schémas réactionnels globaux.

Une approche de type pdf adaptée à un schéma réactionnel plus détaillé permettrait sans doute d'améliorer les résultats et d'étendre la plage de validité de cette approche. Notons cependant que l'approche utilisée ici a l'avantage de ne pas se limiter aux mélanges de gaz prémélangés, contrairement à l'approche pdf.

Bibliographie

- [1] R. Beauvais, F. Mayinger, G. Strube, *Turbulent Flamme Acceleration Mecanisms and Significance for Safety Consideration*. Proceedings of 9th World Hydrogen Energy Conference, Paris, France. **p.p.**1093-1102 (1992).
- [2] B. Lewis, G. Elbe, *Combustion, Flames and Explosions of Gases*, Third Edition. Academic Press. Inc. London. ISBN 0-12-446751-2 (1987).
- [3] K.-K.-Y. Kuo, *Principles of Combustion*. John Wiley Inc, New York, ISBN 0-471-09852-3 (1986).
- [4] J. Warnatz, U. Maas, R.W. Dibble, *Combustion, Physical and Chemical Fundamentals, Modeling and Simulation, Experiments, Pollutant Formation*, 2th edition. Springer-Verlag, Publication Inc, Berlin, ISBN 3-540-65228-0 (1999).
- [5] J. Kopitz, Mémoire de maîtrise, *Implementation of a PDF combustion model into the CFD code FLUENT*, Université Technique de Munich, Allemagne. (1999).
- [6] B. Durst, N. Ardey, F. Mayinger, *Interaction of Turbulent Deflagration with Representative Flow Obstacles*. Rapport technique. Université Technique de Munich, Allemagne. (1995).
- [7] *Fluent 5.1, User's Guide*. Volume 2, 3, 4. Fluent Incorporated Inc, U.S.A. (1998).
- [8] D. C. Wilcox, *Turbulence modeling for CFD*, Dcw Industries Inc, ISBN 0-9636051-5-1. (1998).
- [9] B.-F. Magnussen and B.-H. Hjertager, *On mathematical models of turbulent combustion with special emphasis on soot formation and combustion*. In 16th Symp. (Int'l) on Combustion, **p.p.** 719-729. The Combustion Institute, (1977).
- [10] R. Klein, *Detailed modeling of flame acceleration and DDT*, OCED-SOAR 'Flame Acceleration and DDT'', Berlin, (1999).
- [11] C. Poruba, F. Mayinger, Actes de la 10^{ième} Conférence canadienne sur l'hydrogène, **p.p.** 641, Québec, (2000).
- [12] B. Pons, P. Bénard, Actes de la 9^{ième} Conférence canadienne sur l'hydrogène,

- Vancouver, (1999).
- [13] C. Poruba, J. Kopitz, P. Bénard, F. Mayinger. *Numerical simulation of hydrogen flame propagation in the presence of obstacles*. Hyforum, Munich, Allemagne.(2000).
- [14] S.-V. Patankar, *Numerical Heat Transfer and fluid flow*, Hemisphere Publishing Corporation, Publishers Inc. New York, (1996).
- [15] N. Peter, *Fifteen Lectures in Turbulent Combustion*, Ercoftac Summer School, Allemagne (1995).
- [16] J.-D. Anderson, *Computational Fluid Dynamics, The Basics with Applications*. Mc Graw-Hill Inc, New York, ISBN 0-07-113210-4 (1995).
- [17] *Handbook of Physics and Chemistry*, 66 ième edition, The Chemical Rubber Company, Boca Raton, (1985).

APPENDICE I Exemple de la méthode des volumes finis

Illustrons cette méthode par un exemple. L'équation de conservation de la masse s'écrit, sous forme intégrale[14] :

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho dV + \int_S \rho \vec{v} \cdot d\vec{S} = 0, \quad (\text{A1-1})$$

où ρ est la masse volumique, \vec{v} est la vitesse. Considérons cette équation intégrale sur le domaine bi-dimensionnel illustré dans la figure A1.1. On peut discrétiser ce domaine en le séparant en cellules, tel qu'illustré dans la figure A1.1. Considérons l'écoulement du fluide dans la cellule centrale v_c , et séparons les contributions de chaque surface au volume central v_c .

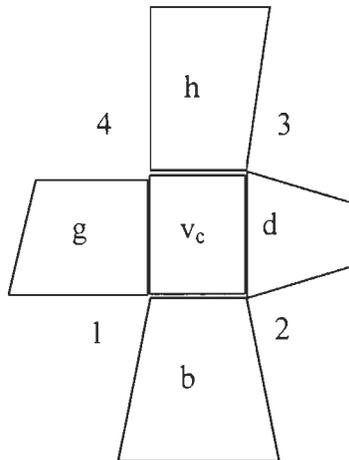


Figure A1.1. Illustration d'une partie du maillage[14].

$$\frac{d}{dt} \int_{v_c} \rho dv_c + \int_{S_g} \rho \bar{v} \cdot d\bar{S}_g + \int_{S_d} \rho \bar{v} \cdot d\bar{S}_d + \int_{S_h} \rho \bar{v} \cdot d\bar{S}_h + \int_{S_b} \rho \bar{v} \cdot d\bar{S}_b = 0. \quad (A1-2)$$

Afin de trouver la solution de cette équation, cherchons maintenant une expression approchée pour chacun des termes. On supposera tout d'abord que les cellules soient suffisamment petites pour que l'on puisse poser que ρ et \bar{v} ne varient pas avec la position dans chaque volume(ou cellule). Nous avons donc :

$$\frac{d}{dt} \int_{v_c} \rho dv = \frac{d\rho_c}{dt} v_c. \quad (A1-3)$$

Examinons ensuite les intégrales de surface. Exprimons l'orientation des surfaces, qui interviennent dans chacune des intégrales. Considérons tout d'abord la face 1-2 , pour laquelle nous obtenons

$$\vec{t} = (x_2 - x_1)\hat{e}_1 + (y_2 - y_1)\hat{e}_2, \quad (A1-3.1)$$

$$\vec{n} = (y_2 - y_1)\hat{e}_1 + (x_2 - x_1)\hat{e}_2, \quad (A1-3.2)$$

où \vec{t} et \vec{n} sont des vecteurs respectivement tangent et normal à la face considérée. En supposant que le flux ρ et v sont constants le long de chacune des faces, l'intégrale de surface sur chaque face s'écrit [14],

$$\int_{\text{face}} \rho \bar{v} \cdot \vec{n} ds = \rho \bar{v}_{\text{face}} \cdot \vec{n} S_{\text{face}}. \quad (A1-4)$$

On obtient l'équation suivante :

$$v_c \frac{d\rho_c}{dt} + \rho \bar{v} \cdot \bar{n} s_g + \rho \bar{v} \cdot \bar{n} s_h + \rho \bar{v} \cdot \bar{n} s_d + \rho \bar{v} \cdot \bar{n} s_b = 0. \quad (\text{A1-5})$$

On peut réécrire en introduisant les indices i et j (qui sont maintenant des indices de cellule et non pas de nœud de maillage) et les notations intermédiaires illustrées par la figure A1.2 ci-dessous :

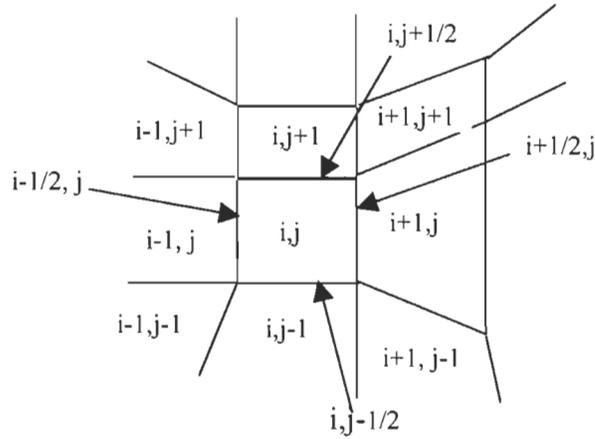


Figure A1.2. Discrétisation des équations du mouvement autour d'une cellule (i,j) .

$$v_{i,j} \frac{d\rho_{i,j}}{dt} + \rho \bar{v}_{i-1/2,j} \cdot \bar{n} s_{i-1/2,j} + \rho \bar{v}_{i,j+1/2} \cdot \bar{n} s_{i,j+1/2} + \rho \bar{v}_{i+1/2,j} \cdot \bar{n} s_{i+1/2,j} + \rho \bar{v}_{i,j-1/2} \cdot \bar{n} s_{i,j-1/2} = 0. \quad (\text{A1-6})$$

Dans une procédure numérique (pour un maillage donné), les quantités $v_{i,j}$ et \bar{n} peuvent être calculées un fois pour toutes et stockées. Remarquons enfin que lorsqu'on considère la cellule voisine $(i-1,j)$, la grandeur $\bar{n} ds_{i-1/2,j}$ a le signe opposé car la normale extérieure a changé de signe. Si on décide de donner un sens fixe à chaque face, par exemple le sens de la normale extérieure située à gauche ou au-dessous, on obtient alors

$$v_{i,j} \frac{d\rho_{i,j}}{dt} - \rho \bar{v}_{i-1/2,j} \cdot \bar{n} s_{i-1/2,j} + \rho \bar{v}_{i,j+1/2} \cdot \bar{n} s_{i,j+1/2} + \rho \bar{v}_{i+1/2,j} \cdot \bar{n} s_{i+1/2,j} - \rho \bar{v}_{i,j-1/2} \cdot \bar{n} s_{i,j-1/2} = 0. \quad (\text{A1-7})$$

Nous aurons une telle équation par cellule qui discrétise l'espace. Il reste à discrétiser la dérivée temporelle par une formule aux différences finies appropriée pour obtenir la relation algébrique recherchée. Le seul problème qui reste en suspens consiste à évaluer le vecteur sur chaque face. Une manière de procéder pourrait être par exemple :

$$\rho \bar{v}_{i+1/2,j} = \frac{1}{2} (\rho \bar{v}_{i,j} + \rho \bar{v}_{i+1,j}). \quad (\text{A1-8})$$

Cette méthode consiste donc à discrétiser les formes intégrales des cinq équations de conservation décrivant l'écoulement d'un fluide en se basant sur un maillage (i.e. une discrétisation appropriée) de l'espace des solutions. Il suffit donc de résoudre les équations algébriques décrivant le système.

APPENDICE II Calcul des fractions de masses aux conditions initiales

La fraction de masse est reliée à la fraction molaire de la façon suivante. L'air est composé de 21% d'oxygène et de 79% d'azote. Les fractions molaires respectives de ces derniers sont donc $X_{O_2}=0.21$ (vol) et $X_{N_2}=0.79$ (vol). Si X_i est la fraction de molaire de l'espèce i , W_i est le poids moléculaire de l'espèce i , \bar{W} est le poids moléculaire du mélange, la fraction de masse d'hydrogène Y_{H_2} est [15] :

$$\bar{W} = \sum_{i=1}^N W_i X_i, \quad (A2-1)$$

où N est le nombre d'espèces qui participent à la combustion.

Pour un mélange pré-mélangé de 11 vol.% de H_2 dans l'air,

$$\bar{W} = 2.016 \times 0.11 + 32 \times 0.1785 + 28.016 \times 0.6715 = 24.8417. \quad (A2-1.1)$$

La fraction de masse d'une espèce i se calcule de la façon suivante:

$$Y_i = \frac{W_{H_2}}{\bar{W}} X_i \quad (i = 1, 2, 3), \quad (A2-2)$$

$$\text{d'où } Y_{H_2} = \frac{2.016}{24.8417} \times 0.11 = 0.0085621 \text{ et } Y_{O_2} = \frac{32}{24.8417} \times 0.89 \times 0.21 = 0.230916.$$

pour un mélange de 11 vol.% d'hydrogène dans l'air.

Puisque la somme des fractions de masse est égale à 1 et que le schéma réactionnel étudié compte sept espèces,

$$Y_{N_2} = 1 - (Y_{H_2} + Y_{O_2} + Y_{OH} + Y_O + Y_H + Y_{OH}), \quad (A2-3)$$

Puisque $Y_{H_2O} = 0$ et qu'il n'y a pas d'espèces intermédiaires avant l'allumage,

$$Y_{N_2} = 1 - (Y_{H_2} + Y_{O_2}) = 0.7605219. \quad (A2-4)$$

APPENDICE III Une formule pour calculer la vitesse du front de flamme

On peut trouver la dérivée d'une fonction discrète avec une précision d'ordre 2 et 4 grâce aux différences centrées impliquant différents points du maillage voisins du point où on cherche à évaluer la dérivée [16] :

$$(u_x)_i = \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2\Delta x} - \frac{\Delta x^2}{6} u_{xxx} \quad (\text{à l'ordre 2}), \quad (\text{A3-1})$$

et

$$(u_x)_i = \frac{-u_{i+2} + 8u_{i+1} - 8u_{i-1} + u_{i-2}}{12\Delta x} + \frac{\Delta x^4}{30} \left(\frac{\partial^5 u}{\partial x^5} \right) \quad (\text{à l'ordre 4}). \quad (\text{A3-2})$$

La vitesse de front de flamme dans ce travail a été calculée à partir des mesures de position du front de flamme par la formule (A3-2) dans le programme Excel suivant :

```
s = size(col(b))
for i=3 to s-2 do
col(x, i-2)=cell(a, i)
a=(-cell(b, i+2)+cell(b, i-2))
b=(-8*cell(b, i-1)+8*cell(b, i+1))
col(y, i-2)=(Δt)-1 * (a+b) / 12
end for
```

APPENDICE IV Propriétés thermodynamiques des fluides lors des simulations

1. Viscosité μ (kg/m-S)

La viscosité μ du fluide est calculée par la loi de mélange des gaz parfaits[7] :

$$\mu = \sum_i \frac{X_i \mu_i}{\sum_i X_i \phi_{i,j}}$$

(A4-1)

$$\text{où } \phi_{i,j} = \frac{\left[1 + \left(\frac{\mu_i}{\mu_j} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{M_j}{M_i} \right)^{\frac{1}{4}} \right]^{\frac{1}{2}}}{\left[8 \left(1 + \frac{M_i}{M_j} \right) \right]^{\frac{1}{2}}}. \quad (\text{A4-2})$$

La viscosité de chaque espèce chimique s'obtient à partir de la théorie cinétique [4].

2. Conductivité thermique λ (w/m-k)

La conductivité thermique du fluide λ s'obtient par la loi de mélange des gaz parfaits.

La conductivité thermique de mélange est

$$\lambda = \sum_i \frac{X_i \lambda_i}{\sum_j X_j \phi_{i,j}}, \quad (\text{A4-3})$$

où $\phi_{i,j}$ est la même que l'équation (A4-2).

La conductivité de chaque espèce s'obtient à partir de la théorie cinétique.

3. Chaleur spécifique c_p (J/kmol*k)

La chaleur spécifique du mélange s'obtient par la loi du mélange des gaz parfaits.

La dépendance thermique de c_p pour chaque espèce est donnée par un polynôme du 4ième degré en température.

$$c_p = a + bT + cT^2 + dT^3 + eT^4 \quad (\text{A4-4})$$

Les coefficients de l'équation (A4-4) peuvent être obtenus[17] en effectuant un lissage polynomial du type (A4-4) grâce à MATLAB. Les coefficients a, b, c, d, e de chaque espèce sont donnés dans tableau A4.1.

Tableau A4.1. Les coefficients du polynôme pour chaleur spécifique

Espèce	a	b	c	d	E
H	$2.0621 \cdot 10^4$	0	0	0	0
H ₂	$1.3284 \cdot 10^3$	$6.07 \cdot 10^0$	$-1.1403 \cdot 10^{-2}$	$9.625 \cdot 10^{-6}$	$-2.61 \cdot 10^{-10}$
OH	$1.875 \cdot 10^3$	$-5.89 \cdot 10^{-1}$	$7.03 \cdot 10^{-4}$	$-1.792 \cdot 10^{-7}$	$-6.03 \cdot 10^{-12}$
H ₂ O	$1.834 \cdot 10^3$	$-2.494 \cdot 10^{-1}$	$1.269 \cdot 10^{-3}$	$-6.89 \cdot 10^{-7}$	$1.25 \cdot 10^{-10}$
O	$1.519 \cdot 10^3$	$-7.69 \cdot 10^{-1}$	$1.073 \cdot 10^{-3}$	$-6.71 \cdot 10^{-7}$	$1.558 \cdot 10^{-10}$
O ₂	$8.84 \cdot 10^2$	$-7.34 \cdot 10^{-2}$	$8.27 \cdot 10^{-4}$	$-7.55 \cdot 10^{-7}$	$2.087 \cdot 10^{-10}$
N ₂	$1.121 \cdot 10^3$	$-5.899 \cdot 10^{-1}$	$1.3 \cdot 10^{-3}$	$-8.56 \cdot 10^{-7}$	$1.921 \cdot 10^{-10}$

4. Coefficient de diffusion de masse $D_{i,j}$

Les coefficients de diffusion binaires de masse sont calculés par la théorie cinétique.

Pour un mélange, nous avons :

$$D_{i,j} = - \left(\rho D_i + \frac{\mu}{Sc_t} \right) \frac{\partial M_i}{\partial x_r}, \quad (A4-5)$$

Sc_t est le nombre efficace de Schmidt pour un mouvement turbulent et D_i est le coefficient de diffusion de l'espèce i dans le mélange.