

**REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE**

**MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA  
RECHERCHE SCIENTIFIQUE**



**UNIVERSITE M'HAMED BOUGARA BOUMERDES**

**FACULTE DES SCIENCES DE L'INGENIEUR**

**DEPARTEMENT ENERGETIQUE**

## **MEMOIRE DE FIN D'ETUDES**

En vue de l'obtention du diplôme Master en Génie Mécanique

**Spécialité : Conversion d'énergie**

**Thème**

### **ETUDE NUMERIQUE DE PROPAGATION D'UNE FLAMME TURBULENTE PREMELANGEE DANS UNE ENCEINTE FERMEE**

Réalisé par :

**M<sup>elle</sup> BELAID Asma**

**M<sup>elle</sup> BOUDJELAL Hadjira**

Promoteur :

**Dr. OUALI Sofiane**

**Promotion : 2016/2017**

## REMERCIEMENTS

Pour son amour et sa protection, pour la chance et le bonheur qu'il nous offre, pour le bien vers lequel il nous guide, pour sa présence lorsque tout le monde est absent, pour le courage, la patience et la foi qu'il nous donne pour mener à bien ce modeste projet malgré les obstacles .merci au plus puissant Allah.

Nous tenons à exprimer notre profonde gratitude et nos sincères remerciements a :

- ❖ Nos chers parents pour leurs soutiens au long de nos études.
- ❖ Mr. OUALI Sofiane notre encadreur qui nous a accordé son soutien, son aide indéfectible et surtout sa patience.
- ❖ Et nous tenons bien aussi à exprimer notre sincère reconnaissance à Mr HALOUANE Yacine qui nous a orientés tout au long de cette période de préparation de ce modeste travail, pour sa patience, son aide, et sa gentillesse.
- ❖ Au président et membres de jury pour avoir accepté de juger ce modeste travail, merci à vous également.

On a l'honneur et le plaisir de remercier également Mr BRACHEMI.B notre chef de département et tout l'ensemble des enseignants du département énergétique.

*ASMA et HADJIRA*

# DÉDICACES

Je dédie ce modeste travail :

A ceux que j'aime jusqu'à la frontière de l'imagination :

- A ma très chère et adorable Mère qui a éclairé mon chemin et qui m'a encouragé et soutenu tout au long de mes études.
- A mon cher père, sans lui, je n'aurais pas aboutie à ce stade d'étude.

Que dieu puisse m'aider à les honorer, les servir et les combler.

- A mon frère Mehdi.
- A mes sœurs Maria et Yasmine.
- A mes amis (es) Katia, Sara, Amina et tous mes camarades de département énergétique.
- A mon binôme Asma.
- A tous mes enseignants de l'UMBB.

BOUDJELAL Hadjira.

# DÉDICACES

Je dédie ce modeste travail :

A ceux que j'aime jusqu'à la frontière de l'imagination :

- A ma très chère et adorable Mère qui a éclairé mon chemin et qui m'a encouragé et soutenu tout au long de mes études.
- A mon cher père, sans lui, je n'aurais pas aboutie à ce stade d'étude.

Que dieu puisse m'aider à les honorer, les servir et les combler.

- A mon frère Khir eddine.
- A ma sœur Wissem.
- Ma grand-mère et ma cousine Naima.
- A mes amis (es) tous mes camarade de département énergétique .
- A mon binôme Hadjira.
- A tous mes enseignants de l'UMBB.

BELAID Asma

### **Résumé**

Dans les accidents graves dans les centrales nucléaires, des grandes quantités d'hydrogène peuvent se produire par l'oxydation du zirconium, cette quantité importante est libérée dans l'atmosphère ou elle se mélange avec l'air et la vapeur d'eau. Plusieurs études et expériences ont été faites dans le but de prédire le comportement d'une flamme d'hydrogène et comment éviter de tels accidents.

Dans ce travail on a fait deux tests de simulation sur deux géométries différentes qui sont THAI et ENACEEF afin de les comparer avec les expériences pour savoir si le modèle utilisé donne des résultats assez bons.

### **Abstract**

In severe accidents in nuclear power plants, large quantities of hydrogen can occur by the oxidation of zirconium, this large amount is released into the atmosphere or it mixes with air and water vapor. Several studies and experiments have been made in order to predict the behavior of a hydrogen flame and how to avoid such accidents.

In this work we made two simulation tests on two different geometries which are THAI and ENACEEF in order to compare them with the experiments to know if the model used gives quite good results.

Nomenclature

Symboles	Unités	Significations
Re	-	nombre de Reynolds
Ka	-	le nombre de Karlovitz
Da	-	le nombre de Damköhler
V	[m/s]	la vitesse
L	[m]	dimension caractéristique
$\nu$	[m <sup>2</sup> /s]	viscosité cinématique
$\dot{m}$	[kg /s]	le débit massique
$S_l$	[m /s]	vitesse laminaire
$\delta_0$	[mm]	l'épaisseur de flamme
Lg	-	l'échelle de Gibson
K	[m <sup>2</sup> /s <sup>2</sup> ]	L'énergie cinétique de la turbulence
$\tau_k$	-	l'échelle de Kolmogorov temporelle
$\tau_c$	-	le temps de la réaction chimique
$\epsilon$	-	l'énergie de dissipation
$\rho$	[kg /m <sup>3</sup> ]	La massa volumique
d	-	la densité
$\tau_c$	-	le temps de la réaction chimique
Qj	-	le vecteur de flux thermique
Se	-	taux de dégagement de chaleur
Sr	-	la perte de chaleur radiative

H	[J]	l'enthalpie
---	-----	-------------

Liste des Abréviations

Abréviations	Signification
CFD	Computational Fluid Dynamic
EDM	Eddy dissipation model
BVM	burning velocity model
LES	Large Eddy simulation
LWR	light water reactor
PWR	les réacteurs à eau pressurisée
DDT	Deflagration Detonation Transient
TMI	Three mile Island
THAI	Thermal hydraulics, Hydrogen, Aerosols, Iodine site
ENNACF	ENceinte d'ACCElération de Flamme
NFPA	National Fire protection association

Nomenclature .....	i
Liste des matières .....	ii
Liste des figures .....	iii
Liste des tables .....	iv
Abstract .....	v

### *Chapitre 1 : généralité sur l'hydrogène*

1.1. Introduction .....	8
1.2. Production de l'hydrogène .....	8
1.2.1. Production par électrolyse de l'eau .....	8
1.2.2. Production par transformation thermochimique de la biomasse .....	10
1.3. Stockage de l'hydrogène .....	11
1.3.1. Sous forme de gaz .....	11
1.3.2. Sous forme liquide.....	12
1.3.3. Sous forme solide .....	12
1.4. Les risques de l'utilisation de l'hydrogène .....	13
1.5. Conclusion.....	14

### *Chapitre 2 : la combustion*

2.1. La combustion .....	14
2.2. Les régimes d'écoulement.....	14
2.2.1. Nombre de Reynolds.....	14
2.2.2. Régime laminaire .....	15
2.2.3. Régime transitoire .....	15
2.2.4. Régime turbulent.....	15
2.3. La turbulence.....	16
2.4. Combustion-turbulence : couplages et problèmes .....	16
2.5. Les régimes d'écoulement des flammes .....	17
2.5.1. La flamme laminaire .....	17
2.5.2. La flamme turbulente .....	18
2.6. Les structures des flammes .....	19
2.6.1. Structure des flammes laminaire.....	19
2.7. Combustion turbulente de prémélange .....	26

2.7.1	La turbulence .....	26
2.7.2	Combustion turbulente de prémélangée .....	27
2.8.	Régime de propagation de flamme .....	35
2.8.1.	Déflagration .....	35
2.8.2	Détonation .....	35
2.8.3	Transition déflagration-détonation .....	39
2.9.	Propriétés des mélanges combustibles hydrogène-air .....	40
2.9.1	Limite d'inflammabilité .....	40
2.9.2	Limite de détonabilité .....	41
2.9.3	Mode d'inflammabilité .....	42
2.10.	Equation gouvernante .....	45
2.11.	Conclusion.....	47

### *Chapitre 3 : modélisation*

3.1.	Introduction .....	48
3.2.	Modeles de combustion.....	48
3.2.1.	Arrhenius Rate .....	48
3.2.2.	Eddy Break-up Model (EBU) .....	50
3.2.3.	Eddy Dissipation Concept (EDC).....	50
3.2.4.	Eddy dissipation model (EDM) .....	51
3.2.5.	Modèle C équation .....	51
3.3.	Les modeles de turbulence .....	52
3.3.1.	L'approche DNS pour Direct Numerical Simulation.....	52
3.3.2.	L'approche LES pour Large Eddy Simulation.....	53
3.3.3.	Le modèle k- $\omega$ .....	54
3.3.4.	Reynolds Averaged Navier-Stokes (RANS) .....	54
3.3.5.	Le modèle k- $\epsilon$ .....	55
3.4.	Conclusion.....	60

#### *Chapitre 4 : présentation de l’outil numérique*

4.1.	Présentation de la CFD.....	61
4.1.1.	La dynamique des fluides numérique CFD.....	61
4.1.2.	Méthodologie .....	61
4.2.	La méthode des volumes finis .....	62
4.3.	Le software FLUENTE .....	62

#### *Chapitre 5 : description des installation*

5.1.	L’installation ENACCEF .....	64
5.2.	L’installation THAI ..... ;.....	66

#### *Chapitre 6 : résultat et discussion*

6.1.	Les méthode de solution.....	68
6.1.1.	Les méthodes de solution CFD .....	69
6.2.	Rsultat de la simulation .....	70
6.2.1.	Résultats de la simulation de l’expérience THAI HD-2R.....	70
6.2.2.	Résultats de simulation de l’expérience ENACEEF .....	75
6.3.	Conclusion.....	79
	Conclusion général .....	81

### Liste des figures

- Figure (1.1) Mécanisme de l'électrolyse
- Figure (1.2) Les différents types de réservoirs gazeux
- Figure (1.3) Les différents groupes de stockage solide
- Figure (1.4) Famille pour le stockage solide
- Figure (2.1) Structure de la flamme laminaire
- Figure (2.2) Représentation schématique d'une flamme laminaire de prémélange.
- Figure (2.3) Structure interne d'une flamme laminaire prémélangée stœchiométrique méthane/air.
- Figure (2.4) Représentation schématique d'une flamme de diffusion laminaire.
- Figure (2.5) Représentation de profils à travers une flamme de diffusion classique.
- Figure (2.6) Simulation numérique d'une flamme triple formée par un écoulement initial présent un gradient de fraction de mélange.
- Figure (2.7) Flamme laminaire prémélangée riche stabilisée sur un bruleur.
- Figure (2.8) Epaisseur de flamme turbulente dans le cas d'un régime de flammelettes.
- Figure (2.9) Diagramme de combustion turbulente (d'après Borghi (1984)).
- Figure (2.10) Diagramme de combustion turbulente modifié (d'après Poinso et al. (1990)).
- Figure (2.11) Représentation schématique d'une onde de déflagration se déplaçant dans un tube. L'onde de combustion porte les gaz d'un état initial à un état final
- Figure (2.12) Profils instantanés de température et de concentration des différentes espèces à l'intérieur d'une flamme se propageant dans un tube

## *Liste des figures*

---

Figure (2.13) Schéma d'une détonation selon Chapman – Jouguet.

Figure (2.14) Adiabatique d'Hugoniot et droite de Rayleigh.

Figure (2.15) Schéma d'une détonation.

Figure (2.16) Diagramme de Shapiro [23] pour les mélanges hydrogène-air-vapeur d'eau.

Figure (2.18) Energie minimal d'inflammation des mélanges hydrogène-air pour différentes pressions initiales.

Figure (2.19) Energie minimal d'inflammation et distance de coincement pour différents mélange H<sub>2</sub>-O<sub>2</sub> diluant à pression atmosphérique.

Figure (5.1) Installation ENACCEF

Figure (5.2) Installation THAI

Figure (6.1) : Géométrie simplifiée de l'installation ENACCEF

Figure (6.2) : géométrie simplifiée de l'installation THAI

Figure (6.3) : La zone d'adaptation

Figure (6.4) : la zone d'allumage

Figure (6.5) : courbes de pression absolue obtenues par l'expérience THAI HD-2R et le test de simulation par le model EDM

Figure (6.6) : courbes de vitesse de l'expérience de l'installation THAI et le test de simulation avec le model EDM

Figure (6.7) : les courbes de position de flamme de l'expérience l'installation THAI et le test de simulation avec EDM

Figure (6.8) : contour de température (THAI HD-2R)

Figure (6.9) : contour de l'énergie cinétique de turbulence (k) (THAI HD-2R)

Figure (6.10) : contour de fraction massique d'hydrogène (H<sub>2</sub>) (THAI HD-2R)

## *Liste des figures*

---

Figure (6.11) : les courbes de vitesse de flamme de l'expérience ENACEEF RUN 153 et le test de simulation

Figure (6.12) : les courbes de position de flamme de l'expérience ENACEEF RUN 153 et le test de simulation.

Figure (6.13) : les courbes de vitesse de flamme de l'expérience ENACEEF RUN 153 et le test de simulation

Figure (6.14) : contour de température (ENACEEF RUN 153)

Figure (6.15) : contour de l'énergie cinétique de turbulence (ENACEEF RUN 153)

Figure (6.16) : contour de fraction massique d'hydrogène (ENACEEF RUN 153)

Table (6.1) : Condition initiale pour l'expérience ENACCEF RUN-153

Table (6.2) : Condition initiale pour l'expérience THAI HD-2R

Table (6.3) : Caractéristiques du modèle CFD

### **Introduction générale**

L'une des principales exigences pour soutenir le progrès humain est une source d'énergie adéquate. Les principales sources d'énergie actuelles sont la combustion du charbon, du pétrole et du gaz naturel. Ses sources seront probablement épuisées dans des dizaines à des centaines d'années. L'énergie solaire et à vent ont un avenir prometteur mais ils n'ont pas encore beaucoup développé, à l'exception des applications spéciales en raison de leur coût élevé. La production d'électricité à partir de combustibles fossiles, notamment le gaz naturel et le charbon, est un contributeur majeur et grandissant à l'émission de dioxyde de carbone, un gaz qui contribue de manière significative au réchauffement climatique. L'augmentation des préoccupations du réchauffement climatique dans le monde entier au cours des dix dernières années ont suscité un intérêt renouvelé pour l'énergie nucléaire qui n'est pas seulement une source d'énergie propre, mais aussi une option moins chère que d'autres sources renouvelables. Des sources comme l'énergie solaire ou éolienne. Actuellement, l'énergie nucléaire fournit environ 14-16% des besoins énergétiques du monde et produit énormément d'énergie à partir de petites quantités de carburant.

Lors d'un accident nucléaire grave dans un réacteur à eau pressurisée, (PWR), la réaction entre la vapeur d'eau et le zirconium présent dans les barres de combustible peuvent générer de grandes quantités d'hydrogène importantes. Le mélange hydrogène-air dans le confinement peut former un mélange de gaz amiable.

Lors de l'allumage, le mélange hydrogène-air peut entraîner la propagation de la turbulence qui peut générer de fortes ondes de pression qui peuvent entraîner une onde de choc. Les phénomènes d'onde de choc peuvent endommager l'équipement de sécurité dans le réacteur nucléaire et peuvent compromettre même l'intégrité structurelle du confinement nucléaire. C'est dangereux parce que le confinement nucléaire est le dernier obstacle entre les produits chimiques radioactifs et l'environnement.

Le risque potentiel de la combustion d'hydrogène dans les réacteurs nucléaires a été réalisé pour la première fois après l'accident de Three Mile Island (TMI) en mars 1979, où la grande quantité d'hydrogène libéré dans le confinement du réacteur a entraîné une combustion ultérieure. Cela a entraîné une pression de 2 bar, ce qui fait ressortir l'intégrité structurelle du confinement du réacteur nucléaire. L'accident de Fukushima-Daiichi en mars 2011 a réaffirmé

que la combustion de l'hydrogène est un Problème qui ne peut pas être négligé et le contrôle du risque d'hydrogène reste un problème de sécurité majeur pour les centrales électriques nucléaires. Par conséquent, pour assurer un fonctionnement sûr des réacteurs nucléaires, il est nécessaire de développer des méthodes et des outils qui peuvent être utilisés pour évaluer les risques impliqués en cas de tels accidents dans les réacteurs nucléaires.

### **Motivation**

Lorsque l'hydrogène est libéré dans l'atmosphère de confinement, il se mélange à l'air et à la vapeur. En dessous de ces conditions, il existe une forte possibilité de développer et de propager une flamme prémélangée de son point d'inflammation aux différentes autres structures du confinement. Avec une turbulence, les conditions dans le confinement et les modes de combustion possibles sont la déflagration et la détonation.

L'objectif principal de l'étude est de faire une simulation avec le code de calcul CFD en utilisant le modèle classique Eddy Dissipation Model (EDM) pour la combustion pour simuler une déflagration lente et une rapide de l'hydrogène dans des mélanges pré-mélangés d'air et d'hydrogène avec une propagation verticale de la flamme. Les conditions sélectionnées sont typiques des situations accidentelles dans une centrale nucléaire, deux types d'expériences ont été simulées dans cette étude, à savoir les tests THAI et ENACCEF.

Les tests THAI (Thermal hydraulics, Hydrogen, Aerosols, Iodine situé) sont typiques des déflagrations lents. La combustion se déroule avec une augmentation de la pression et de vitesses de quelques mètres par seconde (Kanzleiter, 2010).

L'ENACCEF (ENceinte d'ACCElération de Flamme), d'autre part, est une installation obstruée multicomposant utilisée pour simuler l'accélération de la flamme qui peut avoir lieu dans le confinement en présence des obstacles (Bentaib, 2014). L'augmentation de la pression dans ce cas est très rapide et, par conséquent, la vitesse maximale de la flamme peut atteindre plusieurs centaines de mètres par seconde.

Grâce à ces deux types de configurations, nous couvrons un large éventail de régimes de combustion.

Notre travail est partagé en six chapitres :

Le premier chapitre définit les principales caractéristiques d'hydrogène et les différentes méthodes de production et de stockage ainsi que les risques d'utilisation.

Le second chapitre traite les différents modes de combustion, la turbulence, les types de flammes, leurs structure, leurs régime de propagation, et les propriétés d'un mélange hydrogène-air et en final les principales équations gouvernantes.

Le troisième chapitre est consacré aux modèles de combustion et de turbulence utilisés par le code CFD.

Le quatrième chapitre est dédié à la présentation du software fluent, les méthodes de résolution utilisées.

Le cinquième chapitre décrit les deux installations THAI et ENACCEF sur lesquelles on a travaillées.

Le dernier chapitre défini les étapes de la simulation avec le code CFD en utilisant le modèle EDM (Eddy dissipation model) et présente les résultats obtenues.

## Introduction

Dans les accidents graves des PWR (les réacteurs à eau pressurisée) dans les centrales nucléaires, des grandes quantités d'hydrogène peuvent se produire par l'oxydation du zirconium, cette quantité importante est libérée dans l'atmosphère ou elle se mélange avec l'air et la vapeur d'eau.

Plusieurs modes de combustion sont alors possible de se produire, le plus dangereux pour le bâtiment des réacteurs étant « la flamme prémélangée » qui se développe dans le mélange de gaz inflammable et contrairement à une flamme de diffusion, se propage à partir de point d'allumage aux différents pièces de bunkers. Sous l'effet de la turbulence la vitesse est accélérée est change de régime par DDT (Deflagration Detonation Transient) la transition de la déflagration vers la détonation jusqu'à ce que la vitesse arrive à (1000 m/s).

Le risque de l'hydrogène a été identifié pour la première fois il a quelle que années dans le WASH 1400 le rapport de (Rasmussen), juste après l'accident de Three mile Island (TMI) le 28 mars 1979 aux Etat Unis.

L'apparition d'un pic de pression de quelle que 0,2MPa a était observé dans le confinement du réacteur, ce phénomène attribué à une déflagration provoqué par la combustion d'hydrogène provenant d'un étincelle électrique.

## Revue bibliographique

---

F.Malet en 2005 a travaillé sur l'accélération de flamme d'hydrogène en se basant sur les expériences ENACCEF. Dans ce travail L'influence de la composition du mélange sur la vitesse de la flamme et l'accélération a été étudiée. En utilisant un diluant physique à vapeur (40% He-60% CO<sub>2</sub>), l'influence de la dilution sur la vitesse de la flamme et l'accélération a été étudiée. Le front de flamme a également été enregistré avec une visualisation de l'embryoscopie ultra rapide, à la fois dans le tube et dans l'entrée du dôme. La propagation de la flamme est calculée à l'aide du code TONUS. Basé sur le code de résolution d'équation d'Euler en utilisant des volumes finis structurés, il inclut les flammes CREBCOM modélisant et simule la propagation de la flamme turbulente hydrogène / air, en tenant compte de la géométrie complexe 3D et des gradients de concentration des réactifs. Étant donné que la concentration homogène, la propagation de la flamme et l'influence de la géométrie sur la dynamique des flux sont maintenant maîtrisées pour les flammes à propagation rapide, les travaux actuels visent une modélisation de la combustion locale plus précise. L'évolution de la vitesse de la flamme laminaire en fonction de la pression, de la température et de la composition du mélange a été récemment étudiée, une corrélation qui relie la vitesse de la flamme laminaire à ces paramètres est proposée. Cette corrélation améliorera la modélisation de la flamme lente. Le modèle final sera validé avec des expériences ENACCEF. [F.Malet,2005]

En 2007 une étude par le code CFD (Computational Fluid Dynamic) a été menée par Bentaib ahmed, et al pour étudier le phénomène de production du mélange (hydrogène/air) avec une grande concentration d'hydrogène pendant la fusion du noyau dans un accident nucléaire sévère.

Dans le but de la prédiction et anticipation du phénomène de la combustion on étudie le gradient de la concentration d'hydrogène en utilisant pour la combustion le model EDM (Eddy-dissipation-model) et pour la turbulence le model k-epsilon.

Les résultats de simulation ont été comparés aux résultats expérimentaux d'ENACCEF (Enceinte d'Accélération de Flamme), l'ENACCEF RUN-153, est choisie pour effectuer la validation des flammes de déflagration rapide. Cette installation présente des obstacles sous la forme de baies qui génèrent une forte turbulence, donc la vitesse est élevée dans cette expérience. Jusqu'à présent, il n'est pas clair, si les limites sont dans la partie chimique ou dans le modèle de combustion turbulente ou dans le couplage entre les deux. Mais est clair

## Revue bibliographique

---

pour les auteurs que CFD sera le bon outil dans un proche avenir pour prédire la combustion de l'hydrogène. [A.Bentaib,2007]

V.V. Molkov, D.V. Makarov, and H. Schneider en 2007 ont travaillé sur la plus grande expérience connue sur la déflagration hydrogène-air dans l'atmosphère ouverte a été analysée au moyen de la grande simulation de Foucault LES (Large Eddy simulation).

Le modèle de combustion est basé sur l'équation de la variable de progression pour simuler une propagation de la flamme prémélangée et la méthode du gradient pour découper le taux de combustion physique des particularités numériques. Les simulations sont en accord avec les données expérimentales sur la dynamique de la propagation de la flamme, la forme de la flamme et les pics et la structure des ondes de pression sortantes. Le modèle est construit à partir des premiers principes et aucun paramètre réglable n'a été appliqué pour obtenir un accord avec l'expérience. [ V.V. Molkov]

Les conséquences potentielles de la libération et de la combustion de l'hydrogène lors d'un accident grave dans un réacteur à eau légère (LWR) ont fait l'objet d'une attention considérable après l'accident de Fukushima.

Pratap Sathiah a beaucoup travaillé sur Le rôle de la modélisation de la combustion CFD dans la gestion de la sécurité de l'hydrogène et pour cela il a travaillé sur plusieurs parties.

Dans la première partie en 2012 il a étudié le rôle du maillage dans un calcul CFD pour déterminer les charges de pression et il a présentés une méthode CFD pour déterminer ces charges de pression.

Les analyses de validation ont démontrés qu'il est de la plus haute importance d'appliquer des améliorations successives de maille et de temps pour obtenir des résultats fiables. Dans cette étude, il a démontrés qu'il est de la plus haute importance d'appliquer systématiquement le raffinement successif du maillage et du temps dans les analyses CFD pour l'application considérée. [P.Sathiah,2012]

Dans la deuxième partie, Pratap Sathiah a proposés une méthode à base de CFD pour la simulation de l'effet de la dilution de CO<sub>2</sub>-He sur la déflagration de l'hydrogène. Il a d'abord déterminé dans quelle mesure l'effort de calcul requis pour leurs approche CFD peut être réduit par l'application du raffinement adaptable du maillage tout en maintenant les exigences

## Revue bibliographique

---

de précision. Les expériences effectuées dans une petite bombe explosée de fanion ont été utilisées à cette fin.

L'approche CFD considérée, y compris le raffinement adaptatif du maillage, a encore été validée contre trois expériences de déflagration de l'hydrogène réalisées dans l'installation ENACCEF. Il a été globalement conclu que le modèle TFC actuel prédit très bien les expériences ENACCEF considérées. [P.Sathiah2,2012]

Dans la troisième partie, Pratap Sathiah en 2015 a présenté une étude théorique pour vérifier si le CO<sub>2</sub>-He diluant peut être utilisé comme remplacement de H<sub>2</sub>O en tant que diluant. Il a effectué une validation supplémentaire de la méthode basée sur CFD contre trois expériences uniformes de déflagration à l'hydrogène-air-CO<sub>2</sub>-He avec trois concentrations différentes du diluant CO<sub>2</sub>-He. À partir des analyses de validation présentées, il a conclu que la valeur maximale des pressions moyennes et les pressions de pic intermédiaires ont été prédites respectivement dans une précision de 12 et 29%, alors que le taux d'augmentation de la pression était généralement sous-prédit dans les 15 à 90%. [P.Sathiah, 2015]

Dans la partie suivante en 2016, il a présenté une méthode de calcul basée sur la dynamique des fluides pour évaluer les conséquences de la combustion de mélanges homogènes hydrogène-air. Une méthode CFD pour évaluer les conséquences de la combustion rapide de mélanges homogènes d'hydrogène et d'air a été présentée. L'extension de ce modèle pour le régime de déflagration lente est présentée et validée à l'aide des expériences de déflagration de l'hydrogène effectuées dans l'installation expérimentale à moyenne échelle THAI (Thermal hydraulics, Hydrogen, Aerosols, Iodine). [P.Sathiah, 2016]

Dans cette partie P.sathiah a étudié la validation basée sur des expériences hydrogène-air non homogènes cette fois. La méthode utilisée dans la partie précédente a été implémentée dans le logiciel CFD ANSYS FLUENT à l'aide de fonctions définies par l'utilisateur. Le code étendu est validé contre des expériences d'air hydrogène non uniformes dans les installations ENACCEF. [P.Sathiah2,2016]

Y.Halouane et A.Dehb en 2016, ont proposés de comparer les modèles classiques de dissipation (EDM) et les modèles de fermeture de flamme turbulente (TFC) les plus sophistiqués grâce à un ensemble de simulations de tests de combustion d'hydrogène dans les installations THAI et ENACCEF, présentant des déflecteurs respectivement lents et rapides

## Revue bibliographique

---

Géométries symétriques d'axe 2D. La validation des modèles s'effectue en comparant les prédictions aux paramètres importants de combustion mesurés (vitesse de la flamme et propagation spatiale, historique de la pression, spectres, etc). Pour les expériences ENACCEF à double compartiment, la propagation de la flamme comporte plusieurs phases, et le modèle TFC utilisant l'approche de la variable de progression reproduit mieux que l'EDM l'évolution de la vitesse de la flamme, ce qui conduit à une meilleure estimation du gradient de pression temporel. La meilleure performance du modèle TFC se fait au détriment d'un effort de calcul plus important, c'est-à-dire des mailles plus grandes et des étapes de temps plus petites. Cette tendance devrait être améliorée dans les paramètres 3D. [Y.Halouane,2016]

# *Chapitre*

*« 1 »*

## 1.1. Introduction

La production annuelle d'hydrogène est d'environ 550 milliards de Nm<sup>3</sup>/an (soit environ 50 Mt/an ou 130Mtep). Actuellement, la majeure partie de l'hydrogène (près de 96%), est produit à partir des combustibles fossiles et est principalement destiné à l'industrie du raffinage pétrolier et à l'industrie chimique pour la fabrication de l'ammoniac et du méthanol. Cette filière peut être esportée pour fournir de l'hydrogène utilisé comme vecteur d'énergie mais les importantes quantités de dioxyde de carbone qu'elle rejette en diminuent lourdement l'intérêt, à moins que ce dernier puisse être utilisé ou séquestré. Les principaux défis sont d'assurer une production d'hydrogène durable, à grande échelle, à bas coût tout en ayant un impact environnemental réduit. L'hydrogène est obtenu à partir des combustibles fossiles par l'intermédiaire du gaz de synthèse, un mélange d'hydrogène et d'oxyde de carbone avec des faibles proportions de dioxyde de carbone, de méthane et d'eau. La matière première dominante est de loin, le gaz naturel constitué principalement de méthane, excepté en Chine et en Inde où la matière première est le charbon. Ces voies, détaillées ci-après, sont principalement le reformage à la vapeur et l'oxydation partielle ainsi que leurs améliorations et innovations respectives. Dans ces productions, la majorité de l'hydrogène produit dans le monde sert à synthétiser de l'ammoniac et ses dérivés ou bien du méthanol et la production de l'hydrogène est donc intégrée à cette synthèse.

## 1.2. Production de l'hydrogène

### 1.2.1. Production par électrolyse de l'eau

L'hydrogène présente certaines caractéristiques physico-chimiques avantageuses d'un point de vue énergétique car il est très léger (masse volumique = 0,09 kg/m<sup>3</sup>, à 0°C) et qui possède un pouvoir calorifique très élevé.

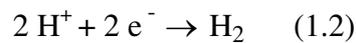
L'électrolyse de l'eau est une réaction électrochimique de décomposition de l'eau en hydrogène et oxygène par l'application d'une différence de potentiel entre deux électrodes plongées dans un bain électrolytique, qui crée un champ électrique orienté dans lequel les ions se mettent en mouvement (les cations se dirigent vers la cathode et les anions vers l'anode). Cette tension dépend essentiellement de l'enthalpie et de l'entropie de la réaction, ce potentiel

théorique de la décomposition est de 1,481 V à 298 K mais les valeurs classiques des potentiels de cellules industrielles sont de l'ordre de 1,7 à 2,1 V, ce qui correspond à des rendements de 70 à 85%. Quand la tension appliquée est suffisante des réactions se produisent aux interfaces électrolyte électrodes [11]

À l'anode : oxydation avec émission d'électrons



À la cathode: réduction avec capture d'électrons



Les ions d'hydrogènes sont transportés à travers l'électrolyte par la différence de potentielle électrique V. [12]

La réaction globale est

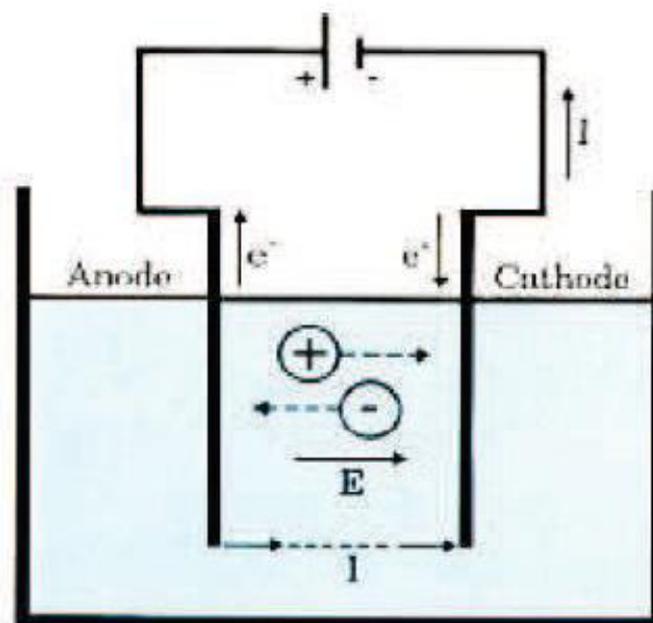


Figure (1.1) : Mécanisme de l'électrolyse

### 1.2.2. Production par transformation thermochimique de la biomasse

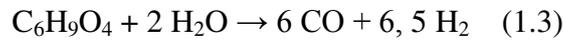
La biomasse est constituée de tous les végétaux qui se développent à la surface de la Terre. Elle est obtenue par la photosynthèse de  $\text{CO}_2$  et  $\text{H}_2\text{O}$  et elle capte l'énergie solaire pour produire un ensemble de molécules, cellulose, lignocellulose et lignine, de composition équivalente à  $\text{C}_6\text{H}_9\text{O}_4$ . Il est ensuite possible de restituer cette énergie stockée sous forme de combustible ou de carburant par des transformations plus ou moins efficaces sur les plans énergétiques et économiques. Les trois premières voies sont hors sujet de ce travail et présentent divers avantages et inconvénients. Seule la transformation thermochimique sera exposée ici. Cette voie convient particulièrement à la valorisation des produits comme le bois ou la paille. Cette filière, qui conduit à la gazéification des substances organiques, comporte une succession d'opérations nécessitant simultanément le transfert de grandes quantités de chaleur et le contrôle de la proportion et du temps de contact des réactifs en présence.

Après l'opération de séchage de la biomasse, la thermolyse consiste en la dégradation thermochimique des produits en l'absence d'oxygène. Vers 500 à 600°C, seuls 30% de leur masse d'origine demeure sous forme solide et représente le charbon de bois, essentiellement constitué de carbone alors que le reste de leur masse est devenu gazeux. Ce premier traitement est suivi d'une gazéification à la vapeur d'eau ou à l'air vers 900°C à 1000°C. L'oxygène réalise une oxydation plus ou moins complète du carbone en produisant du gaz de synthèse  $\text{CO} + \text{H}_2$  et  $\text{CO}_2$  dont on peut tirer des carburants liquides (méthanol ou hydrocarbures), ou gazeux ( $\text{CH}_4$  ou  $\text{H}_2$ ). L'oxygène pur étant cher, l'utilisation d'air, à ce stade est peu coûteuse mais introduit dans le produit de l'azote indésirable (formation d'oxyde d'azote  $\text{NO}_x$ ).

En utilisant la vapeur d'eau en tant que réactif, une quantité supplémentaire d'hydrogène est récupérée néanmoins un moyen de chauffage annexe doit être employé. L'obtention d'un gaz de bonne qualité et non corrosif est essentiel pour ces applications (notamment la pile à combustible) et nécessite l'élimination des acides et des goudrons à forte masse moléculaire. Un étage supplémentaire de rectification et craquage, vers 1200 à 1300°C (ou catalyse vers 800 à 900°C) peut donc s'avérer nécessaire pour éliminer les dernières traces d'impuretés. L'utilisation d'un étage supérieur à haute température permet d'éviter la fusion des cendres et de résidus (mâchefer) constatée vers 900 et 1000°C et aussi de réaliser simultanément le reformage du méthane résiduel en  $\text{CO}$  et  $\text{H}_2$ . Enfin, il est ensuite possible de raffiner et

purifier le gaz de synthèse pour en extraire l'hydrogène qui servira de carburant notamment pour les piles à combustibles [13]

Globalement, l'ensemble des réactions peut se traduire par la réaction globale suivante :



### 1.3. Stockage d'hydrogène

#### 1.3.1. Sous forme de gaz

La voie gazeuse est la plus simple et la plus répandue des technologies de stockage. L'hydrogène est contenu dans des réservoirs sous pression. Plus la pression est élevée, plus la quantité d'hydrogène stocké est grande. Les réservoirs actuellement développés fonctionnent avec des pressions maximales aux alentours de 300-350 bar (30-35 MPa) voir 480 bar. Le travail actuel consiste à créer des réservoirs gazeux sous 700 bar afin d'améliorer la capacité volumique, principal défaut de cette technologie [14]

Pour leur conception, les réservoirs gazeux sont regroupés sous 4 types :

**Type I :** réservoir cylindrique en métal

**Type II :** réservoir contenant une enveloppe de métal pour la tenue mécanique, frettée par des fibres continues imprégnées de résine.

**Type III :** réservoir constitué d'une enveloppe de métal pour contenir l'hydrogène et d'une enveloppe de fibres continues imprégnées de résine pour la tenue mécanique

**Type IV :** réservoir constitué d'une enveloppe non métallique pour contenir l'hydrogène et d'une enveloppe de fibres continues imprégnées de résine pour la tenue mécanique [15]

Type	I	II	III	IV
Schéma				
Réalisation				

Figure (1.2) : Les différents types de réservoirs gazeux

### 1.3.2. Sous forme liquide

Pour stocker l'hydrogène à l'état liquide, on le refroidit jusqu'à 20 K (-253 °C). La technologie est maîtrisée, notamment pour des applications spatiales ou de stockage stationnaire (hôpitaux, station-service). La capacité volumique est certes importante mais la très faible température reste le problème majeur de cette technologie. De plus, l'énergie de liquéfaction est élevée.

Cette technologie se prête plus au stockage stationnaire pour lequel de grands moyens d'isolation thermique peuvent être mis en œuvre. En revanche, dans le cas des applications mobiles où l'isolation thermique est limitée, le réchauffement du réservoir conduit à l'évaporation de l'hydrogène qui doit alors être libéré afin de limiter la pression interne dans le réservoir. L'utilisation d'un véhicule hybride (essence/hydrogène) permet alors d'aller faire le plein d'hydrogène pour un long trajet. [14]

### 1.3.3. Sous forme solide

Depuis les études sur le stockage solide de l'hydrogène dans le palladium, diverses familles de matériaux ont requis l'attention des scientifiques pour trouver le support le plus adapté au stockage d'hydrogène

---

#### Stockage par adsorption

- charbon actif
- nanotubes
- nanofibre de graphite
- MOFs, Zéolites,...

#### Hydrures chimiques (réactif avec l'eau)

- NaH encapsulé
  - LiH et MgH<sub>2</sub>
  - CaH<sub>2</sub>, LiAlH<sub>4</sub>,...
- 

Figure (1.3) : Les différents groupes de stockage solide

Le stockage solide semble être la voie la plus prometteuse pour l'avenir. Les capacités volumiques sont très intéressantes puisque supérieures à celles du stockage liquide. Certaines formes de stockage solide fonctionnent dans la condition standard de température et de pression. Le stockage solide se présente sous plusieurs formes. L'organigramme de la figure (1.3) représente les différentes familles pour le stockage solide. [16]

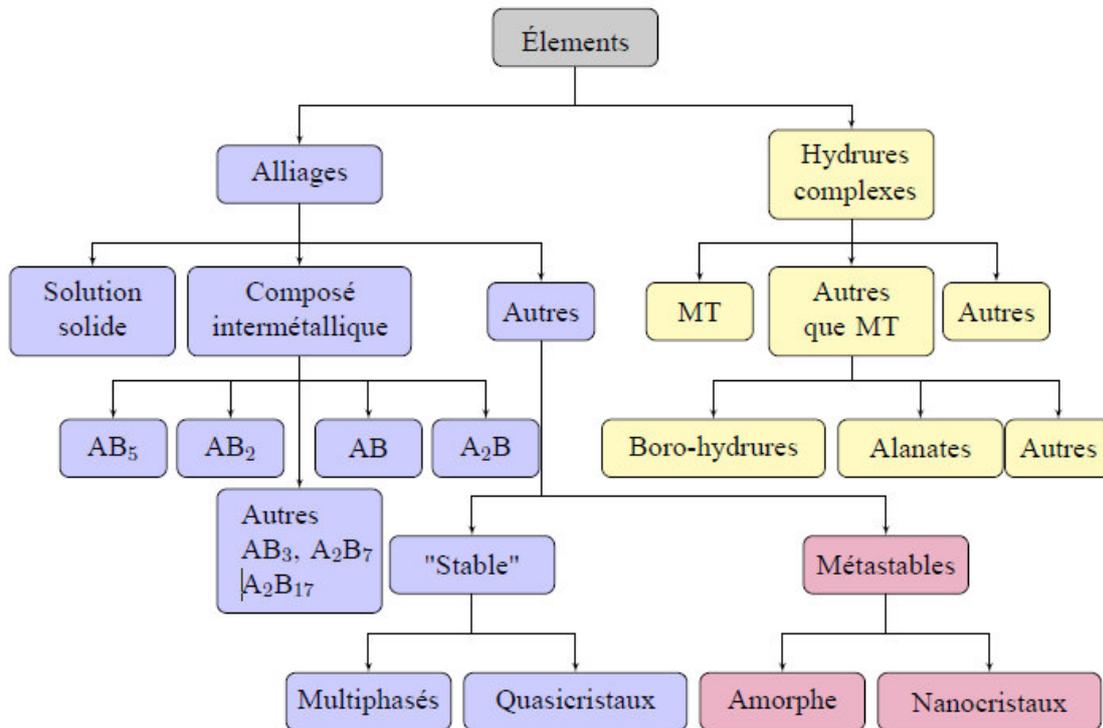


Figure (1.4) : Famille pour le stockage solide

#### 1.4. Les risques liés à l'utilisation de l'hydrogène

L'hydrogène possède l'estimation la plus élevée de NFPA 704's de 4 sur l'échelle d'inflammabilité parce que l'hydrogène  $H_2$  s'enflamme rapidement même quand il se mélange avec des petites quantités d'air ordinaire

L'hydrogène gazeux et l'air normal peuvent aussi s'enflammer à un niveau aussi bas que 4% d'oxygène dans l'air.

Cependant, l'hydrogène n'a aucune estimation pour le risque inné pour la réactivité ou la toxicité. Le stockage et l'utilisation de l'hydrogène pose des défis unique dus à sa facilité de fuite en tant qu'un combustible gazeux, la flottabilité et sa capacité de fragiliser les métaux qui doivent être pris en compte pour assurer la sécurité de l'opération

L'hydrogène liquide lance des défis supplémentaires dus à sa densité accrue et le besoin des sources qui nous fournissent des très basses températures pour le maintenir dans la forme liquide.

Pour comparer les niveaux de dangerosité entre les carburants traditionnels et l'hydrogène, il convient de discerner la nature du risque évalué :

**Risque de fuite** : la petite taille de la molécule d'hydrogène lui permet de s'échapper à travers des ouvertures de taille extrêmement faible. Le risque de fuite est donc plus élevé avec l'hydrogène qu'avec les autres combustibles.

**Risque d'inflammabilité** : lorsqu'une nappe d'hydrogène se forme, le risque d'inflammabilité est nettement plus élevé que pour une nappe d'essence ou de gaz. L'énergie requise pour l'enflammer est environ 10 fois plus faible que pour le gaz naturel.

**Risque de formation d'une nappe explosive** : l'hydrogène se disperse plus rapidement que les carburants traditionnels. Il se dilue 4 fois plus vite dans l'air que le gaz naturel et 12 fois plus vite que les vapeurs d'essence. Cette volatilité est un facteur protecteur limitant la formation de nappes d'hydrogène. [17]

### Conclusion

L'utilisation d'hydrogène est liée à de nombreux dangers : fuite, risque cryogénique, explosion, incendies violents....etc.

L'un des principaux risques identifiés est une fuite d'hydrogène gazeux pour toutes les technologies de stockage, avec des conséquences qui varient en fonction de la pression à laquelle l'hydrogène est stocké. Dans un milieu confiné et mal ventilé, une atmosphère dangereuse peut être générée.

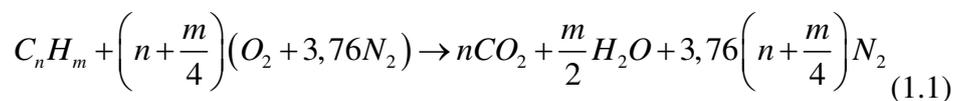
# *Chapitre*

« 2 »

## 2.1. La combustion

On peut définir la combustion comme l'évolution irréversible d'un mélange réactif vers son état d'équilibre. Cette évolution est un ensemble de réactions chimiques (collisions moléculaires efficaces) décrivant au final l'oxydation d'un combustible (hydrocarbure) par un comburant ou oxydant (dioxygène de l'air).

Ce processus forme majoritairement de l'eau (H<sub>2</sub>O) et du dioxyde de carbone (CO<sub>2</sub>). La libération des énergies de liaisons associées rend l'oxydation très exothermique : de 40 à 50 MJ / kg de combustible en moyenne pour les hydrocarbures. Si l'on s'intéresse à l'état final à l'équilibre, on peut donc décrire la combustion du point de vue thermodynamique en le traitant comme une réaction globale, unique et irréversible. A pression constante, un bilan enthalpique permet de calculer la chaleur de réaction dégagée par différence des enthalpies de formation entre produits et réactifs. L'oxydation stœchiométrique d'un hydrocarbure C<sub>n</sub>H<sub>m</sub> par l'oxygène O<sub>2</sub> de l'air (contenu classiquement à 21% en volume) s'écrirait alors [18] :



## 2.2. Les régimes d'écoulement

### 2.2.1. Nombre de Reynolds

Le nombre de Reynolds R<sub>e</sub> est un nombre sans dimension utilisé en mécanique des fluides. Il a été mis en évidence en 1883 par Osborne Reynolds. Il caractérise un écoulement, en particulier la nature de son régime (laminaire, transitoire, turbulent). Le nombre de Reynolds représente le rapport entre les forces d'inertie et les forces visqueuses. Ce nombre sans dimension apparaît naturellement en adimensionnant les équations de Navier-Stokes. [19]

On le définit de la manière suivante :

$$Re = \frac{VL}{\nu}$$

Avec :

V : vitesse caractéristique du fluide [m/s]

L : dimension caractéristique [m]

$\nu$  : viscosité cinématique du fluide [m<sup>2</sup>/s]

### 2.2.2. Régime laminaire

L'écoulement laminaire se produit lorsqu'un fluide s'écoule en couches parallèles, sans interruption entre les couches. À de faibles vitesses, le fluide tend à s'écouler sans mélange latéral, et les couches adjacentes glissent l'une après l'autre comme des cartes à jouer. Il n'y a pas de courants transversaux perpendiculaires à la direction d'écoulement, ni les tourbillons de fluides. Dans l'écoulement laminaire, le mouvement des particules du fluide est très ordonné avec des particules proches d'une surface solide se déplaçant en lignes droites parallèles à cette surface. Le flux laminaire est un régime d'écoulement caractérisé par une forte diffusion d'impulsion et une faible convection de quantité de mouvement [20].

Pour un écoulement laminaire le nombre de Reynolds est :  $Re < 2000$

### 2.2.3. Régime transitoire

C'est une transition entre le régime laminaire et le régime turbulent. En physique, un régime transitoire est le régime d'évolution d'un système qui n'a pas encore atteint un état stable ou le régime établi. Un régime transitoire peut apparaître lors d'une modification d'un système

### 2.2.4. Régime turbulent

L'écoulement turbulent est un régime d'écoulement dans la dynamique des fluides caractérisé par des changements chaotiques de la pression et de la vitesse d'écoulement. Il est contraire à un régime d'écoulement laminaire, qui se produit lorsqu'un fluide s'écoule en couches parallèles, sans interruption entre ces couches [21]. Pour un écoulement turbulent le nombre de Reynolds est :  $Re > 2000$

### 2.3. La turbulence

Le mouvement du fluide turbulent est un état irrégulier d'écoulement dans lequel les différentes quantités montrent une variation aléatoire avec des coordonnées temporelles et spatiales, de sorte que les valeurs moyennes peuvent être discernées

(Bradshaw:1971) a proposé une définition plus sophistiquée pour la structure de la turbulence. La turbulence est un mouvement tridimensionnel dépendant du temps dans lequel les fluctuations de vitesse se propagent à toutes les longueurs d'onde entre une valeur minimale et une valeur maximale. Par les conditions aux limites du débit et le minimum déterminé par les forces des particules visqueuses. Il s'agit de l'état habituel du mouvement des fluides, sauf à des faibles nombres de Reynolds.

Les écoulements turbulents apparaissent lorsque la source d'énergie cinétique qui met le fluide en mouvement est relativement intense devant les forces de viscosité que le fluide oppose pour se déplacer. À l'inverse, on appelle laminaire le caractère d'un écoulement régulier.

Le comportement complexe des écoulements turbulents est la plupart du temps abordé par la voie statistique. On peut ainsi considérer que l'étude de la turbulence fait partie de la physique statistique. Pour traduire le fait que, dans un écoulement, les forces d'inertie l'emportent sur les forces de viscosité, un nombre de Reynolds convenablement choisi doit être supérieur à un certain seuil.

La physique de la turbulence est en plein essor grâce à la mécanique des fluides numérique qui permet aux chercheurs d'étudier la turbulence, en utilisant notamment l'approche appelée simulation numérique directe.

### 2.4. Combustion-Turbulence : couplages et problèmes

Si la combustion laminaire existe (recherche dans les laboratoires, brûleur domestique), les puissances requises dans l'industrie imposent un régime de combustion turbulente.

La combustion turbulente traduit une interaction profonde entre le dégagement de la chaleur irréversible et local (taux de réaction non linéaire) induit par la combustion, et les fluctuations

de vitesse existant sur l'ensemble de spectre turbulent. D'un côté la combustion provoque une forte expansion thermique  $\tau$  et modifie l'écoulement :  $\tau = T_{gb}/T_{gf} - 1 = 5$  à  $7$  ( $T_{gb}$  et  $T_{gf}$  sont respectivement les températures dans les gaz brûlés et frais). d'autre part. Les fluctuations locales de vitesse perturbent l'arrivée des réactifs sur la flamme et changent au moins sa forme, au plus sa structure interne.

La comparaison des échelles caractéristiques des flammes  $\tau_c$  et des échelles turbulentes  $\tau_t$  sur l'ensemble de leur spectre d'interaction établit plusieurs régimes de combustion turbulente (Borghini et Destriau, 1998) s'appuie sur les nombres adimensionnels de Damkolher  $Da = \tau_{t,l}/\tau_c$  ( $l_t$  est l'échelle intégrale associée au grandes échelles turbulentes) et de Karlovitz  $Ka = \tau_c/\tau_{t,\eta}$  ( $\eta$  est un l'échelle de Kolmogorov) [18].

## 2.5. Les régimes d'écoulement des flammes

### 2.5.1. La flamme laminaire

La flamme laminaire est une onde de combustion qui se déplace à vitesse subsonique. Les flammes de prémélange laminares ont des applications dans beaucoup des dispositifs résidentiels, commerciaux et industriels. Les exemples incluent des fourneaux à gaz, des appareils de chauffage et des becs Bunsen. Les flammes laminares sont ainsi seuls importantes, mais peut-être d'une manière primordiale, la compréhension des flammes laminares est une condition préalable pour étudier les flammes de prémélange turbulentes. Une flamme laminaire peut être divisée en deux zones, la zone de préchauffage et la zone de réaction.

Dans la zone de préchauffage, la chaleur est transfère par la convection et la conductivité moléculaire, mais les taux de la réaction sont négligeables. Le transfère de chaleur de convection est aussi négligeable, mais les processus de réaction et de diffusion dominant. Dans un flux stationnaire du gaz prémélangé, la flamme se propage contre l'écoulement jusqu'à ce qu'il se stabilise, tels que localement la normale de la vitesse d'écoulement de la flamme est égal à la vitesse laminaire de flamme ( $S_L$ ). Cette vitesse est commandée par des procédés de transport et le taux de réaction. [22]

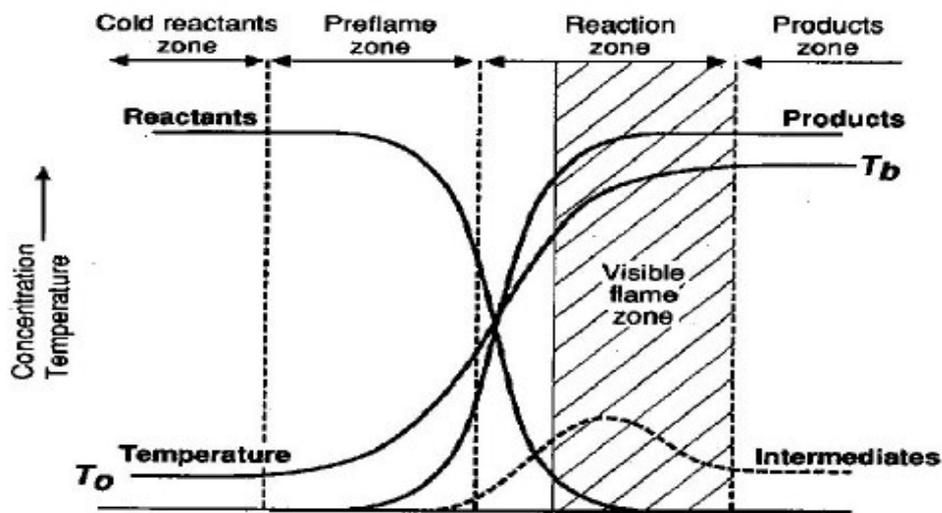


Figure (2.1): Structure de la flamme laminaire

### 2.5.2. La flamme turbulente

Lorsque les flux entrant dans une flamme sont turbulents, le mode flamme laminaire est remplacé par un régime où la turbulence et la combustion interagissent.

La combustion turbulente résulte de l'interaction bidirectionnelle de la chimie et de la turbulence. Lorsqu'une flamme interagit avec un écoulement turbulent, la turbulence est modifiée par la combustion en raison des fortes accélérations du flux à travers le front de flamme induit par la libération de chaleur, et en raison des grands changements de viscosité cinématique associés aux changements de température. D'autre part, la turbulence change la structure de la flamme et peut augmenter la réaction chimique mais également dans des cas extrêmes l'empêcher complètement. [23]

#### ✓ La vitesse de la flamme turbulente

Contrairement à une flamme laminaire qui a une vitesse de propagation qui dépend de la chaleur et les propriétés chimiques du mélange non brûlé, une flamme turbulente a une vitesse de propagation qui dépend aussi du comportement du flux ainsi que des propriétés du mélange. L'effet de la turbulence est de froisser et de déformer le front de flamme laminaire. Ce front de flamme qui se propage localement avec une vitesse compatible avec une flamme plane laminaire. Une vitesse de flamme turbulente peut être définie comme la vitesse à

laquelle les réactifs entrent la zone de flamme dans une direction normale à la flamme. Dans cette définition, la surface de la flamme est représentée Comme une quantité moyenne temporelle  $A$ , en reconnaissant que le front instantané de la flamme peut fluctuer de façon brusque. Comme la mesure directe des vitesses des gaz non brûlés À un point proche d'une flamme turbulente est extrêmement difficile, au mieux, des vitesses de flamme habituellement Sont déterminées à partir des mesures des taux des réactifs [22].

Ainsi, la vitesse de la flamme turbulente est exprimée par :

$$\dot{m} = d_u \bar{A} S_t = d_u A_{fl} S_l \quad (2.2)$$

Avec  $\dot{m}$  est le débit massique des réactifs et  $d_u$  est la densité du mélange non brûlé.

## 2.6. Les Structure des flammes

### 2.6.1. Structures des flammes laminaires

Le développement de modèles adaptés aux types de combustion usuellement rencontrés en pratique nécessite de faire la distinction entre flammes pré-mélangées et flammes non pré-mélangées. Bien qu'étant pilotées à petite échelle par des phénomènes identiques (chimie, diffusion moléculaire et thermique), ces deux types de flammes possèdent des structures et des propriétés bien distinctes, ce qui rend délicat l'élaboration d'un modèle de combustion "universel". Les descriptions faites par la suite correspondent à des flammes mettant en jeu la combustion d'hydrocarbures légers dans l'air (méthane, propane essentiellement). Certains résultats ne peuvent donc pas nécessairement être extrapolés à d'autres combustibles. [24]

#### ✓ Les flammes laminaires de pré-mélange

Dans une flamme pré-mélangée, les réactifs (oxydant et carburant) sont initialement mélangés au niveau moléculaire avant de réagir. Comme on peut le voir sur la figure (2.2), les flammes pré-mélangées caractérisent par l'existence d'un front de flamme mince séparant les gaz frais des gaz brûlés. C'est au sein de ce front qu'ont lieu les réactions chimiques permettant la transformation des réactifs en produits. Cette flamme peut être caractérisée par son épaisseur notée  $\delta_L^0$  (l'indice L se rapporte au cas laminaire, et l'exposant 0 au cas d'une

flamme non étirée). Une flamme pré-mélangée laminaire peut se diviser en trois zones distinctes :

- La première zone peut être caractérisée par une élévation progressive de la température, alors que les termes de production/disparition chimiques restent nuls. C'est la zone de préchauffage dans laquelle, en raison de l'existence de forts gradients favorisant la diffusion thermique et moléculaire, les gaz frais voient leur température s'élever jusqu'à atteindre la température d'inflammation du mélange. L'épaisseur caractéristique  $\delta_1$  de cette zone est généralement de l'ordre de  $0,3\delta_L^0$

- L'oxydant et le carburant réagissent ensuite au sein de la seconde zone : c'est la zone de réaction. Celle-ci est peu épaisse (son épaisseur  $\delta_r$  est de l'ordre d'un dixième de l'épaisseur totale du front de flamme) et se caractérise par une élévation brutale de la température et de fortes variations des termes sources chimiques des espèces. C'est dans cette région que le carburant est consommé et que les produits majoritaires de combustion sont formés.

Dans la troisième zone, les réactions principales sont à l'état d'équilibre partiel, et la température n'augmente que très progressivement. Les produits de combustion sont lentement oxydés, et les réactions élémentaires mises en jeu évoluent avec des temps caractéristiques relativement grands. Cette zone est appelée zone d'oxydation, et son épaisseur est notée  $\delta_o$ .

Dans le cas d'une combustion pauvre à stœchiométrique, on peut s'attendre à ce que le carburant soit entièrement consommé et qu'une certaine proportion d'oxydant résiduel soit retrouvée dans les gaz brûlés. En revanche, en combustion riche, tout le carburant n'a pas réagi ce qui entraîne la présence d'hydrocarbures imbrulés dans les gaz chauds.

Au fur et à mesure que les réactifs sont consommés, le front de flamme progresse, des gaz frais vers les gaz brûlés. On peut donc définir une vitesse de propagation du front, appelée vitesse de flamme, et notée  $S_L^0$ . Cette vitesse est directement reliée à la vitesse de consommation du carburant dans la zone de réaction. Cette grandeur, de même que l'épaisseur de la flamme, dépendent de nombreux paramètres de l'écoulement tels que la richesse, la pression, la nature du carburant, les propriétés physico-chimiques. [25]

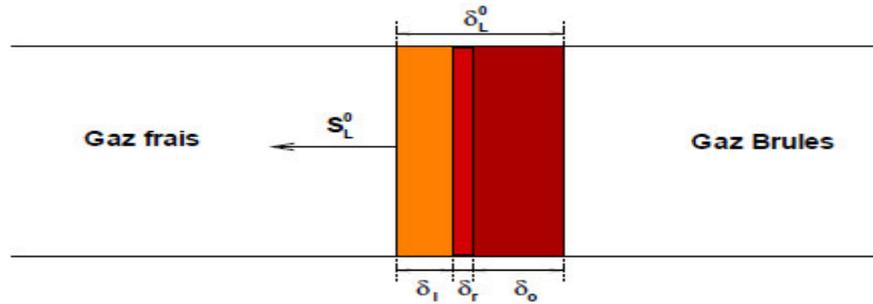


Figure (2.2) : Représentation schématique d'une flamme laminaire de pré-mélange

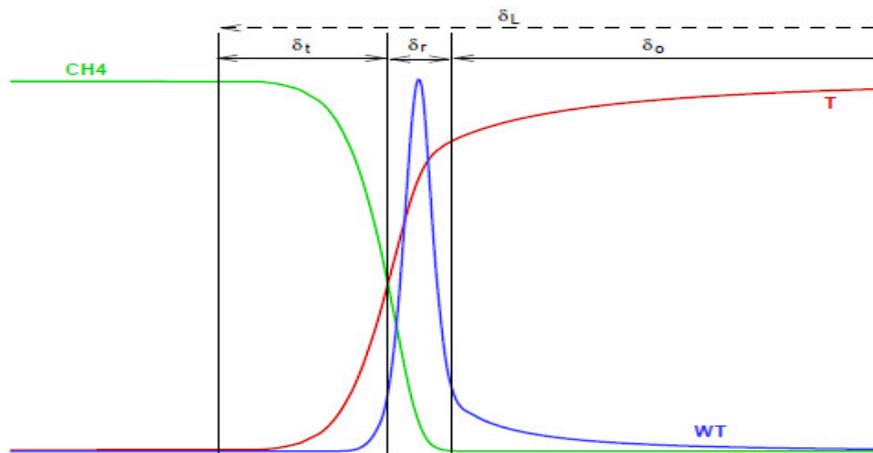


Figure (2.3) : Structure interne d'une flamme laminaire prémélangée stoechiométrique méthane/air

### ✓ Structures des flammes de diffusion

Pour une flamme de diffusion, l'oxydant et le carburant sont séparés en des zones parfaitement distinctes avant de réagir. La figure (2.4) représente une vue simplifiée d'une flamme non pré-mélangée type. Dans ce régime, la combustion est essentiellement pilotée par la diffusion des réactifs l'un dans l'autre. La flamme va se développer à l'interface entre les deux réactifs, à la stœchiométrie. Les produits de combustion sont ensuite évacués par diffusion moléculaire de part et d'autre de la zone de réaction. Pour ces raisons, les flammes non pré-mélangées sont souvent appelées flammes de diffusion. La flamme de diffusion type, schématisée figures (2.4) et (2.5), met en évidence l'existence de trois zones :

- la première zone, localisée au centre de la flamme est la zone de réaction, elle se caractérise par un pic des termes sources chimiques et du dégagement de chaleur : c'est là que se déroulent les réactions chimiques mettant en jeu les réactifs et les produits de combustion

principaux. Dans cette zone, le carburant et l'oxydant alimentant la flamme sont mélangés à l'échelle moléculaire avant de réagir.

- la seconde région, entourant la zone de réaction, est la zone de diffusion des espèces. les réactifs présents de chaque côté de la flamme sont mélangés aux produits de combustion évacués par diffusion moléculaire. Dans cette zone, on note une élévation progressive de la température des gaz, provoquée par la diffusion thermique et la dilution des réactants par les gaz brûlés. Sous l'hypothèse d'équidiffusion, la zone de diffusion des espèces et celle de la température sont.

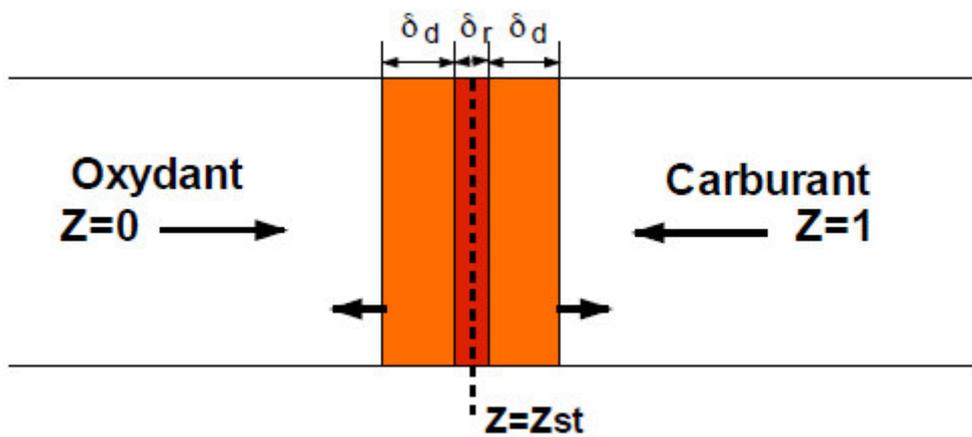


Figure (2.4) : Représentation schématique d'une flamme de diffusion laminaire

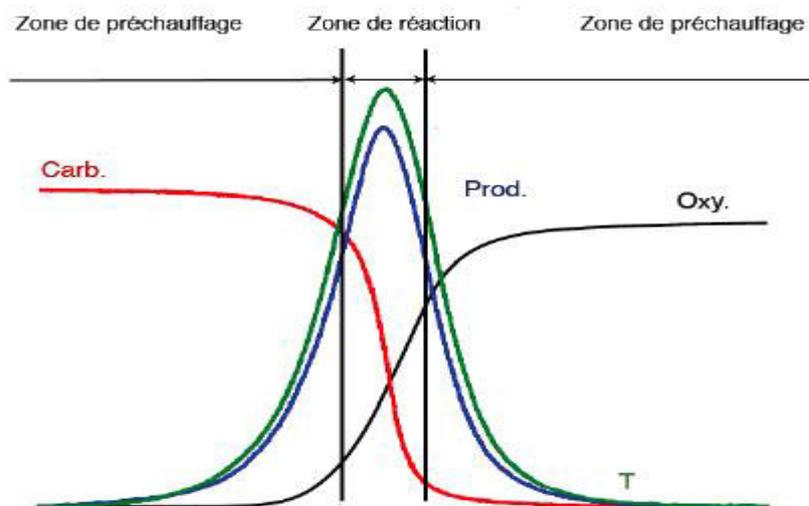


Figure (2.5) : Représentation de profils à travers une flamme de diffusion classique

- pour finir, on trouve d'autre part des zones de diffusion les deux écoulements de gaz frais alimentant la flamme en carburant et en oxydant.

Ces observations montrent que les flammes de diffusion résultent de la compétition entre les processus chimiques et la diffusion moléculaire des espèces. La structure de cette flamme est donc contrôlée uniquement par le rapport entre les temps caractéristiques de la chimie et de la diffusion.

Contrairement aux flammes pré-mélangées, le front de la flamme de diffusion ne se propage pas au sein de l'écoulement mais reste fixé autour de l'iso-surface de mélange stœchiométrique. De plus, ces flammes ne sont généralement pas auto-entretenues comme peuvent l'être les flammes pré-mélangées : pour entretenir la combustion, il faut que soit assuré l'apport continu en oxydant et en carburant. [26]

### ✓ Structure des flammes partiellement pré-mélangées

La structure des flammes laminaires parfaitement pré-mélangées et non pré-mélangées est bien connue. Cependant, il est très rare que ces régimes interviennent directement et de façon indépendante dans les configurations industrielles. En général, les réactifs ne sont jamais injectés sous la forme d'un pré-mélange parfait. Le mélange s'établit ainsi de façon progressive et conduit à la présence d'inhomogénéités au sein de l'écoulement.

Il est donc inapproprié de vouloir reproduire ce type de combustion (qui plus est dans des configurations industrielles) à l'aide de modèles dédiés au pré-mélange ou à la diffusion. Des méthodes spécifiques doivent être employées, combinant les propriétés requises par ces deux principaux régimes.

La modélisation des flammes partiellement pré-mélangées reste un enjeu essentiel pour la simulation de configurations industrielles. Pour cette raison, de nombreux auteurs se sont intéressés ces dernières années à la caractérisation de la structure des flammes partiellement pré-mélangées et au développement des modèles de combustion dédiés.

Deux types de flammes partiellement pré-mélangées peuvent être rencontrés :

- les flammes où les réactifs sont progressivement mélangés aux gaz brûlés avant de réagir (flammes stabilisées par recirculation, flammes riches).
- les flammes où les réactifs sont mélangés avant de réagir, mais avec des variations locales de richesse (flammes stratifiées).

Les figures (2.7) à (2.9) présentent différentes configurations pour lesquelles des flammes partiellement pré-mélangées sont observées. Dans le cas de la flamme de pré-mélange riche stabilisée sur un brûleur, les d'hydrocarbures imbrulés présents dans les gaz chauds peuvent réagir avec l'air ambiant. Une flamme de diffusion peut alors être observée derrière la flamme principale, comme le montre la figure (2.7).

La figure 1.8 correspond au cas d'une flamme se développant au sein d'une couche de mélange. On peut identifier ainsi trois zones distinctes : un écoulement homogène riche (au-dessus), un écoulement homogène pauvre (au-dessous) et la zone centrale au sein de laquelle le mélange s'effectue. Dans cette région, une flamme triple est observée, possédant une branche pré-mélangée pauvre et une branche pré-mélangée riche entourant une flamme de diffusion.

Le dernier cas, figure (2.9), présente l'allumage d'un mélange hydrogène/air hétérogène. Les noyaux de combustion se développent préférentiellement autour des régions à la stœchiométrie. La qualité du mélange et la distribution de richesse dans le domaine a donc un impact important sur l'allumage et sur la propagation des portions de flammes allumées. [27]

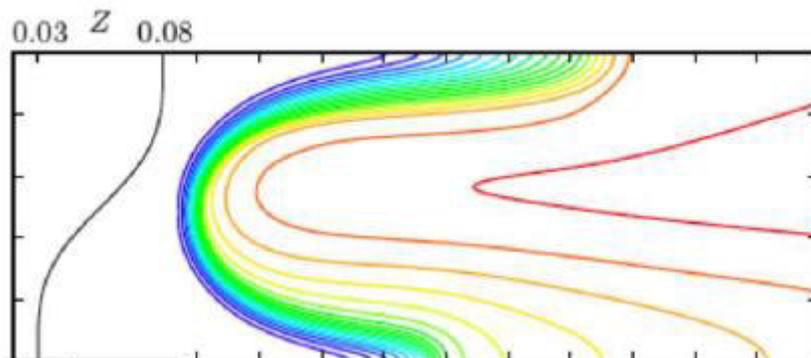


Figure (2.6) : Simulation numérique d'une flamme triple formée par un écoulement initial présentant un gradient de fraction de mélange

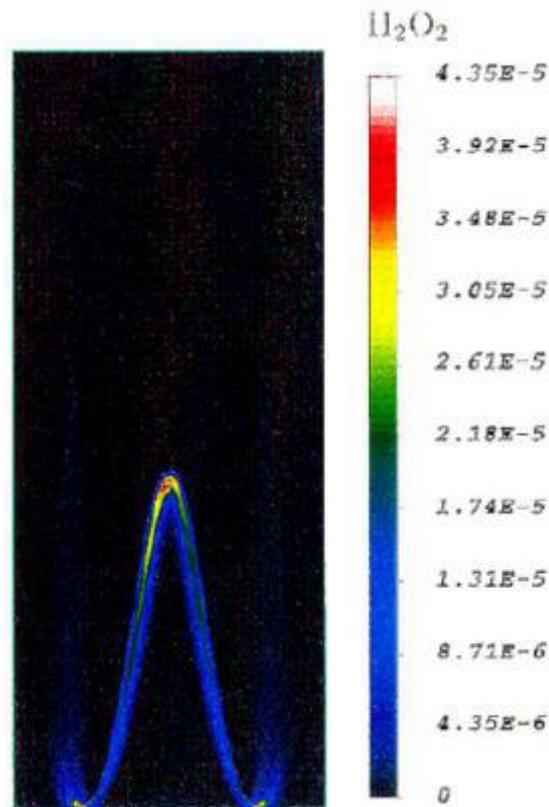


Figure (2.7) : Flamme laminaire prémélangée rich stabilisée sur un bruleur

### 2.6.2. Phénoménologie des interactions flamme /turbulence

#### ✓ Flamme turbulente pré-mélangées

L'influence de la turbulence sur la chimie (et réciproquement) est contrôlée par les temps caractéristiques de ces deux phénomènes. Un temps caractéristique chimique est défini généralement en fonction de la vitesse et de l'épaisseur de flamme laminaire

$$\tau_c = \frac{\delta_L^0}{\delta_L^0} \quad (2.3)$$

#### ✓ Flamme turbulente non pré-mélangées

De manière similaire, pour les flammes de diffusion, il est possible d'identifier différents régimes de combustion distincts en comparant les échelles caractéristiques des flammes (longueur et temps) à celles de la turbulence. Lorsque l'on s'intéresse à de telles flammes, la définition formelle de ces échelles présente certaines difficultés. En effet, contrairement au cas prémélangé, le front de flamme ne se propage pas ce qui rend impossible la définition d'une vitesse de propagation. De plus, l'épaisseur de la zone de réaction dépend

fortement des conditions de l'écoulement. Ainsi, les échelles de la flamme non pré-mélangée sont souvent liées aux phénomènes diffusifs, notamment via le taux de dissipation scalaire de  $z$  à la stœchiométrie. Un temps caractéristique peut, par exemple, être obtenu suivant : [24]

$$\tau_f = \frac{1}{\chi_{st}} \quad (2.4)$$

## 2.7. Combustion turbulente de prémélange

Dans les années 1880, Mallard et Le Chatelier ont montré que la turbulence affecte la vitesse de combustion. En effet, pour des flammes laminaires, les réactions chimiques se produisent uniquement dans une zone très mince et que les processus de diffusions des espèces radicalaires étaient primordiaux. L'importance de ces transferts diffusifs fait alors bien comprendre que la turbulence, qui est capable de les accélérer dans de grandes proportions, joue un rôle majeur. Les fortes fluctuations dans le champ de vitesse vont venir perturber le front de flamme pour créer des plissements et ainsi accroître la surface du front de flamme. [28]

### 2.7.1. La turbulence

Les écoulements turbulents se caractérisent par une apparence très désordonnée et par l'existence de nombreuses échelles temporelles et spatiales. Ils ne sont donc pas prévisibles ni dans le temps, ni dans l'espace mais peuvent être décrits de manière statique afin d'obtenir des grandeurs moyennes, des échelles caractéristiques temporelles et spatiales et des fluctuations

#### ✓ Grandeurs moyennes, fluctuations et énergie cinétique de turbulence

En un point donné de l'écoulement, la vitesse de l'écoulement montre des fluctuations aléatoires, notée  $u'(x, t)$ , autour d'une valeur moyenne, notée  $\langle U(x, t) \rangle$ . La vitesse en un point  $x$  de l'écoulement, notée  $U(x, t)$ , s'écrit alors :

$$U(x, t) = \langle U(x, t) \rangle + u'(x, t) \quad (2.5)$$

Les fluctuations de vitesse  $u'(x, t)$  sont définies comme l'écart-type de la distribution de  $U(x, t)$ . La demi-somme des trois variances pour les trois composantes de vitesse définit alors l'énergie cinétique de turbulence, notée  $k$ .

$$k = \frac{1}{2} \left[ u'(x, t)^2 + v'(x, t)^2 + w'(x, t)^2 \right] \quad (2.6)$$

Dans la suite de l'étude nous nous placerons dans le cas d'une turbulence homogène et isotrope, même si cette hypothèse n'est pas forcément correcte dans un moteur à combustion interne. Nous parlons d'écoulements turbulents homogènes lorsque l'ensemble des propriétés statistiques de l'écoulement sont invariantes par translation spatiale. Les moyennes statistiques ne dépendent donc pas d'un point d'observation. Une turbulence isotrope est une turbulence homogène dont il est impossible de détecter une direction privilégiée d'observation. Les différentes relations qui vont suivre dans cette étude ont été obtenues grâce à ces hypothèses.

### 2.7.2. Combustion turbulente de pré-mélange

La combustion turbulente pré-mélangée se distingue de la combustion laminaire par le fait qu'elle dépend non seulement des propriétés physico-chimiques du mélange, mais aussi des propriétés de l'écoulement. Toutefois, même si la turbulence modifie de façon indéniable le comportement du front de flamme, il ne faut pas négliger les modifications de l'écoulement par l'expansion des gaz brûlés, par la propagation de la flamme, par les gradients de vitesse et par les variations des masses volumiques et des viscosités. Le rôle de la turbulence peut remis en évidence par l'augmentation des vitesses de combustion, de la surface de la flamme et des échanges via l'augmentation de la diffusivité.

Notons que de nombreuses études expérimentales ont été réalisées dans des situations stationnaires mais nous manquons actuellement de données dans le cas des régimes instationnaires. En effet, nous connaissons encore mal les évolutions des propriétés des flammes au cours de la propagation de flamme. Ce sont pourtant des données importantes pour la modélisation des écoulements réactifs.

#### ✓ Epaisseur de flamme turbulente

Si nous prenons une photographie instantanée d'une flamme plissée, nous verrions une flamme d'épaisseur constante, courbée et froncée par les structures de l'écoulement turbulent de manière à occuper une certaine épaisseur, notée  $\delta_T$ , qui peut être considérée comme l'épaisseur moyenne d'une flamme turbulente. Il faut néanmoins garder à l'esprit que cette définition, illustré sur la figure (2.8), est uniquement valable dans le régime des flammelettes. Pour les autres régimes de combustion turbulente, les structures laminaires des flammelettes disparaissent et les zones de réaction et de préchauffage s'épaississent.

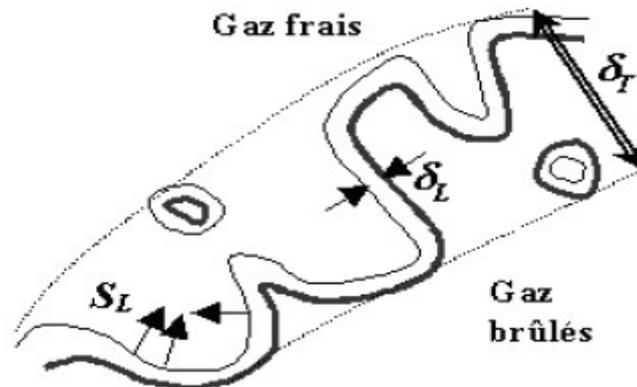


Figure (2.8) : Epaisseur de flamme turbulente dans le cas d'un régime de flammelettes

#### ✓ Classification des différents régimes de la combustion turbulente de pré-mélange

La diversité et la complexité des phénomènes rencontrés dans les écoulements réactifs rendent impossible le traitement du problème dans son ensemble. Pour le développement des modèles de combustion il a alors été nécessaire de comprendre quels étaient les phénomènes physiques prépondérants dans une configuration donnée, et quelles étaient les différentes interactions entre eux. De nombreux auteurs ont alors proposé des classifications des écoulements réactifs en différents régimes de combustion, permettant pour chacun d'entre eux, des modélisations sensiblement différentes. Parmi les classifications sous formes de diagrammes, nous pouvons citer Barrère (1974), Bray (1980), Borghi (1984), Williams (1985) et Abdel-Gayed et Bradley (1989). Tous ces travaux sont basés sur la comparaison de rapports d'échelles caractéristiques de la turbulence et de la combustion. Ces approches offrent un moyen « pratique » pour classer les écoulements réactifs suivant différents régimes de combustion, mais n'ont qu'un caractère qualitatif et doivent être prises dans ce sens. Etant difficile de définir les frontières permettant de différencier un régime d'un autre, des nombres

adimensionnels caractéristiques des interactions entre la combustion et la turbulence ont alors été définis.

✓ **Les nombres adimensionnels**

Le nombre de Reynolds turbulent, noté  $Re_t$  est défini par le rapport entre l'intensité de l'agitation turbulente à celle des forces de viscosité

$$Re_t = \frac{q' L_T}{\nu} \quad (2.7)$$

Un écoulement est turbulent lorsque son nombre de Reynolds turbulent est grand devant 1. Le nombre de Reynolds turbulent permet donc de différencier le domaine des flammes de pré-mélange laminaire ( $Re_t < 1$ ) de celui des flammes de pré-mélange turbulentes ( $Re_t > 1$ ).

Le nombre de Damköhler, noté  $Da$ , est défini par le rapport entre les temps caractéristiques de la turbulence  $\tau_L = L_T/q'$  avec celui de la réaction chimique

$$\tau_C = \delta_L/S_L$$

$$Da = \frac{\tau_L}{\tau_C} \quad (2.8)$$

Notons que pour des grands nombre de Damköhler ( $Da \gg 1$ ), le temps de la réaction chimique est négligeable devant celui de la turbulence, correspondant à une zone de réaction d'épaisseur mince plissée et convectée par l'écoulement. La structure interne du front de flamme n'est alors pas fortement affectée par la turbulence et peut être décrite comme un composé de flamme laminaire appelé « *flammelette* ». Pour des petits nombre de Damköhler ( $Da \ll 1$ ), la réaction chimique est lente. Les réactifs et les produits sont alors mélangés par les structures turbulentes de l'écoulement avant la réaction. Dans ce domaine des réacteurs homogène, le taux de réaction moyen peut être exprimé à partir de la loi d'Arrhénius en considérant les fractions massiques et la température, correspondant au premier terme du développement de Taylor

Le nombre de Karlovitz, noté  $Ka$  est défini par le rapport entre les temps caractéristique de la chimie et l'échelle temporelle de Kolmogorov :

$$Ka = \frac{\tau_c}{\tau_k} \quad (2.9)$$

$\tau_c$  est le temps de la réaction chimique  $\tau_c = \delta_L/S_L$

$\tau_k$  est l'échelle de Kolmogorov temporelle

Dans sa formulation initiale, le nombre de Karlovitz compare le temps caractéristique de la réaction chimique à l'étirement caractéristique de la zone réactive [Bray et al. (1991)]. Sous cette forme, la condition  $Ka < 1$  signifie que la vitesse de combustion est suffisamment élevée pour compenser l'étirement subi par la zone de réaction et donc qu'il n'existe pas de phénomènes d'extinction locale de la flamme. Dans une situation inverse, l'écoulement peut produire sur la flamme des étirements pouvant entraîner des phénomènes d'extinction et les petites structures de l'écoulement sont capables de pénétrer la structure interne de la flamme mais sans pénétrer forcément dans la zone de réaction [Peters (1999)]. Il est aussi important de noter que la limite entre le régime des flammelettes et le régime des flammes plissées et épaissies peut être approximée à  $Ka = 1$  (critère de Klimov-Williams) [Chung (1996)].

Ces trois nombres adimensionnels peuvent être reliés par la relation suivante :

$$Re_t = Da^2 Ka^2 \quad (2.10)$$

### ✓ Diagramme de combustion turbulente

Les diagrammes de combustion usuellement utilisés dans l'étude de la combustion turbulente sont donc basés sur la comparaison de rapport d'échelles caractéristiques de la turbulence et de la combustion laminaire ( $q'/SL$  en ordonnée et  $LT/\delta L$  en abscisse), et sur les nombres adimensionnels énumérés ci-dessus pour définir les frontières entre les régimes. Dans cette étude, nous nous sommes reportés plus particulièrement à celui proposé par Borghi

[Borghi (1984)]. Sur la figure (2.9), nous avons ainsi représenté ce diagramme en y ajoutant une représentation schématique de la structure du front de flamme pour chacun des régimes de combustion turbulente

- **Domaine I : Flammes laminaires**

Ce domaine est limité par le critère de Reynolds turbulent ( $Re_t = 1$ ).

• **Domaine II : Flammes plissées**

Dans ce domaine, le temps caractéristique de la réaction chimique est plus petit que le temps caractéristique de la turbulence ( $\tau_c < \tau_L$  car  $Da > 1$ ) et plus petit que le temps caractéristique des tourbillons de Kolmogorov ( $\tau_c < \tau_k$  car  $Ka < 1$ ). De plus, la vitesse de combustion laminaire est grande devant l'intensité turbulente. La structure de la flamme n'est pas affectée par la turbulence, mais le front de flamme est simplement plissé par les gradients de vitesse qu'il rencontre (grosses structures de l'écoulement).

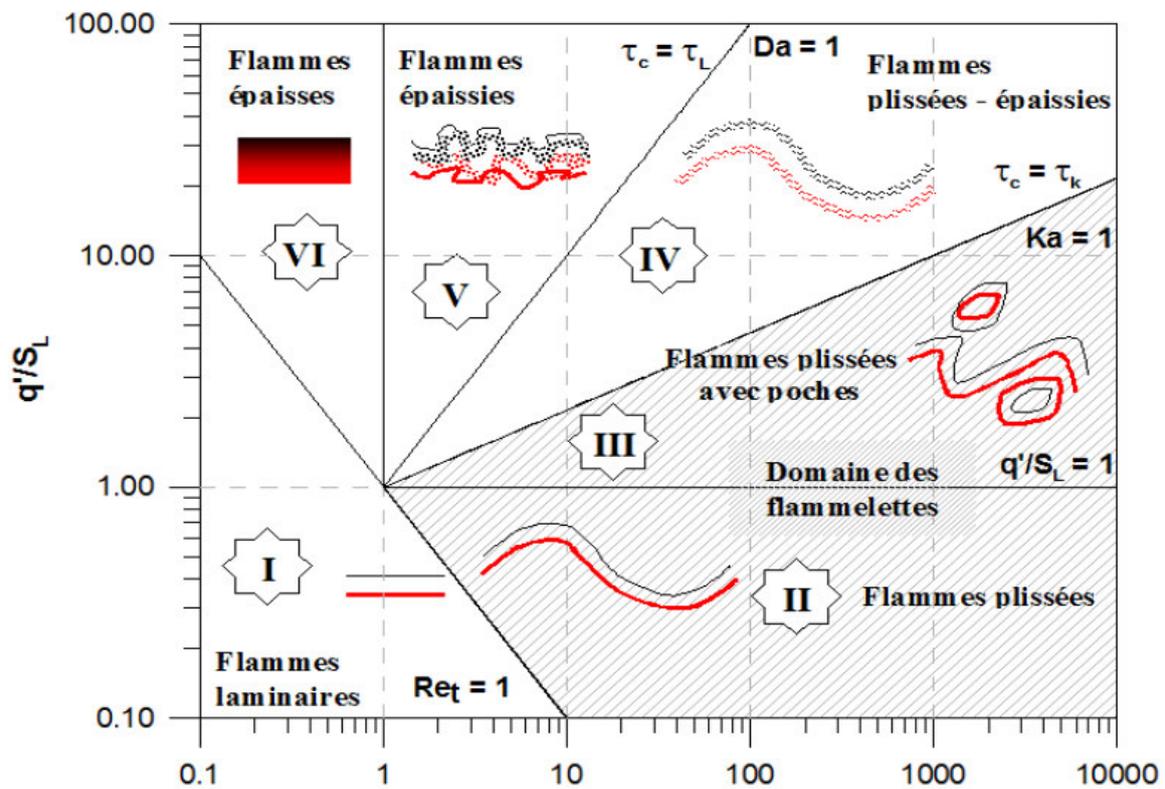


Figure (2.9) : *Diagramme de combustion turbulente (d'après Borghi (1984)).*

• **Domaine III : Flammes plissées avec poches ou flammes « corruguées »**

L'intensité turbulente devient suffisamment important devant la vitesse de combustion laminaire pour que les gros tourbillons déforment fortement le front de flamme, allant jusqu'à la rupture de ce dernier. Cette rupture du front de flamme donne alors naissance à des poches de gaz frais et/ou de gaz brûlés. Par contre, les tourbillons de la taille de Kolmogorov ne sont pas suffisamment rapides pour affecter le front de flamme. Ceci a ainsi conduit Peters [*Peters*

(1986)]à introduire une échelle supplémentaire, l'échelle de Gibson notée  $L_g$ , qui représente la taille des plus petits tourbillons capables d'agir sur la structure de front de flamme. Leur vitesse est supposée égale à celle des flammes laminaires d'où la relation

$$L_g = S_L^3 / \varepsilon \text{ qui peut aussi s'écrire } L_g / L_T = (S_L / q')^3$$

Le critère de Klimov-Williams correspondant au critère  $Ka = 1$  délimite le régime de flammelettes (*représenté par la surface hachurée dans la figure 16*) Ce régime de combustion est en fait l'union du domaine des flammes plissées et du domaine des flammes plissées avec poches. Dans ce type de régime, il est supposé que le front de flamme est continu et qu'il est convecté et plissé par l'écoulement, mais qu'il conserve localement les caractéristiques de la flamme laminaire. Cette approche permet de relier la vitesse de combustion turbulente à la vitesse de combustion laminaire, où les propriétés de la flamme laminaire sont parfaitement connues. Nous reviendrons plus en détails sur ce régime de combustion dans la suite de notre étude car cette hypothèse de combustion en régime de flammelettes est très répandue dans la modélisation des moteurs à allumage commandé.

- **Domaine IV : Régime de combustion distribuée**

Dans ce domaine, le temps caractéristique de la réaction chimique est plus grand que le temps caractéristique des tourbillons de Kolmogorov ( $\tau_C < \tau_K$  car  $Ka < 1$ ). Or, nous avons vu dans le paragraphe définissant les nombres adimensionnels que si le nombre de Karlovitz est supérieur à 1, les structures de la turbulence sont suffisamment rapides pour étirer le front de flamme et ainsi créer des extinctions locales. En fait, nous pouvons l'expliquer grâce à la formulation initiale du nombre de Karlovitz, qui compare le temps chimique  $\tau_C$  à l'étirement d'une zone de réaction ( $Ka = \tau_C \cdot dA / (A \cdot dt)$ ). Ainsi lorsque  $Ka > 1$ , la vitesse de combustion laminaire n'est pas suffisante pour compenser l'étirement et alors des extinctions locales de la flamme apparaissent.

- **Domaine V : Flammes épaissies**

Dans ce domaine, la réaction chimique est plus lente que toutes les échelles turbulentes ( $\tau_C < \tau_K$  car  $Ka > 1$  et  $\tau_C > \tau_L$  car  $Da < 1$ ). Le taux de réaction est contrôlé par la cinétique de la réaction, et la turbulence réalise le mélange des réactifs. La flamme est dite « *épaissie* » car la notion d'interface entre les gaz frais et les gaz brûlés n'est plus adaptée à ce régime où nous définissons plutôt une zone de réaction.

- **Domaine VI : Réacteur homogène**

Ce domaine est le domaine du réacteur homogène, où le front de flamme occupe tout le volume du foyer. Ce cas relève plutôt du génie chimique que d'applications pratiques de la combustion turbulente.

Cette analyse phénoménologique permet de classer sommairement les régimes de combustion prémélangée en fonction de certains nombres adimensionnels. Il ne faut cependant pas oublier que cette analyse repose sur des hypothèses fortes. En effet, la turbulence est supposée homogène et isotrope, les effets visqueux sont négligés et les effets de courbures ne sont pas pris en compte. Par ailleurs, [28]

les régimes de combustion sont basés sur des estimations d'ordre de grandeur. Les inégalités proposées ne sont pas à prendre au sens strict car la limite du régime des flammelettes peut aussi bien se situer à des valeurs de  $Ka = 0.1$  ou  $Ka = 10$ . C'est pourquoi des études ont été menées pour caractériser ces régimes de combustion turbulente à partir de simulations numériques directes de l'interaction entre la flamme et les tourbillons, comme par exemple Poinso et al. [*Poinso et al. (1990, 1991)*]. Cette formulation inclut les effets d'étirements et de courbure, la dissipation visqueuse et des nombres de Lewis différents

de 1. Toutes les tailles des structures turbulentes sont prises en compte et chaque échelle a un effet différent sur le front de flamme. Ainsi, certaines structures éteignent localement le front de flamme alors que d'autres sont dissipées par l'effet visqueux avant même d'interagir avec le front de flamme. La figure(2.10) illustre le diagramme de combustion résultant de ces considérations.

Nous retrouvons le critère de Klimov-Williams ( $Ka = 1$ ), correspondant à une épaisseur de flamme laminaire égale à l'échelle de Kolmogorov. En dessous de cette limite, la flamme est plus mince que n'importe quelle échelle de turbulence. La limite des cut-off correspond à la plus petite échelle capable d'avoir un effet notable sur le front de flamme. En dessous de la ligne définie par  $Ka = 100$  (*critère de Peters*), la zone de réaction a une épaisseur inférieure à la taille des structures turbulentes et n'est donc pas affectée par ces dernières. Ce critère est assez proche de celui obtenu par Poinso et al. Montrent que l'hypothèse des flammelettes, zone de réaction mince continue, est valable dans un domaine beaucoup plus large que ne le laisse supposer le critère de Klimov-Williams.

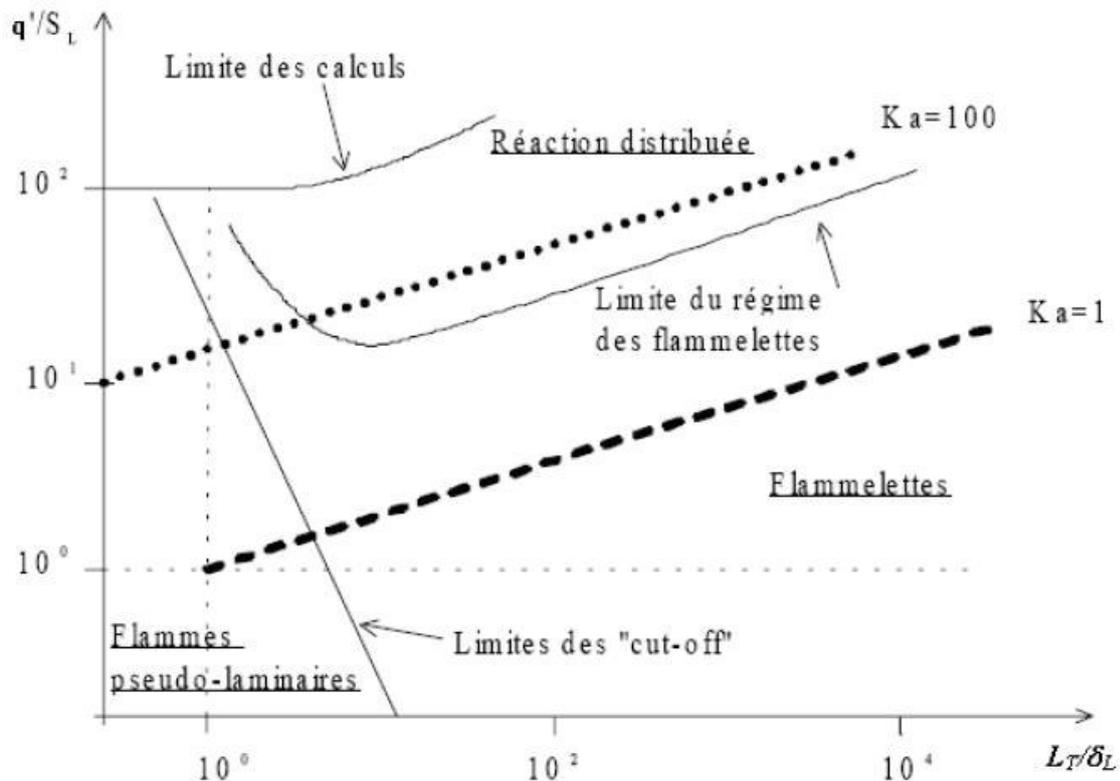


Figure (2.10) : Diagramme de combustion turbulente modifié  
(D'après Poinot et al. (1990))

### ✓ Régime des flammelettes

Le concept de flammelettes s'applique à la combustion turbulente lorsque le temps caractéristique de la réaction chimique est petit par rapport à l'échelle de Kolmogorov, c'est-à-dire, si la combustion est achevée durant le temps de retournement des plus petits tourbillons. Dans ce cas, la structure de la flamme peut être décrite comme étant composée d'un ensemble de flammelettes laminaires étirée et convectées par l'écoulement. Cette approche permet de dissocier les phénomènes de combustion de ceux de l'aérodynamique. La flamme est ainsi considérée comme une interface plissée se propageant localement à la vitesse d'une flamme laminaire étirée. Dans ce modèle de flammelettes laminaires, le dégagement de chaleur est supposé se produire uniquement à l'intérieur d'une fine zone de réaction, qui a la structure et les propriétés d'une flamme laminaire étirée. [28]

Le régime des flammelettes doit alors répondre principalement aux deux critères

Suivants :

- La taille des grosses structures de l'écoulement doit être d'un ordre de grandeur supérieure à l'épaisseur de flamme laminaire
- Le temps chimique de la combustion doit être inférieur au temps caractéristique des plus petites structure de l'écoulement.

## 2.8. Régime de propagation de flamme

Lorsqu'on apporte de l'énergie à un mélange gazeux susceptible de s'enflammer, on obtient une zone réactionnelle très étroite et généralement lumineuse au sein du mélange. Cette zone qui constitue le front de flamme est le siège de réactions de combustion. Selon les conditions initiales (pression, composition, température initiale du mélange ou encore énergie minimale d'inflammation), et des conditions de propagation, cette zone réactionnelle peut se propager suivant deux modes différents, la déflagration ou la détonation. Nous allons à présent définir chaque type de propagation. [29]

### 2.8.1. Déflagration

La déflagration est un mode de propagation subsonique. Dans le cas des flammes laminaires aussi bien que dans certains cas des flammes turbulentes, la propagation de la flamme résulte à la fois de la diffusion de la chaleur depuis les gaz frais vers les gaz brûlés ainsi que de la diffusion des espèces actives. Ainsi la propagation de la flamme repose sur un mécanisme de diffusion à la fois thermique et massique. La vitesse de la réaction détermine "l'épaisseur de la zone réactionnelle" et le gradient de température entre les gaz frais et les gaz brûlés. La température de flamme conditionne la vitesse de réaction chimique, mais c'est la diffusion qui joue un rôle essentiel dans la propagation de la flamme. La déflagration est donc constituée d'une zone de combustion d'épaisseur non négligeable et d'une onde de pression qui se propage en amont de celle-ci dans tout le domaine. Cette onde de pression, qui induit de faibles augmentations de la pression du mélange combustible, possède une vitesse sonique tandis que le front de combustion se propage à une vitesse nettement subsonique. A titre

d'exemple, la vitesse de propagation d'une flamme d'hydrogène en déflagration varie entre 0,5 et 3 m/s. [29]

Lorsque l'on observe la propagation dans un tube cylindrique et en régime laminaire, la zone réactionnelle sépare à un instant donné les gaz frais des gaz brûlés comme le montre la figure (2.11)

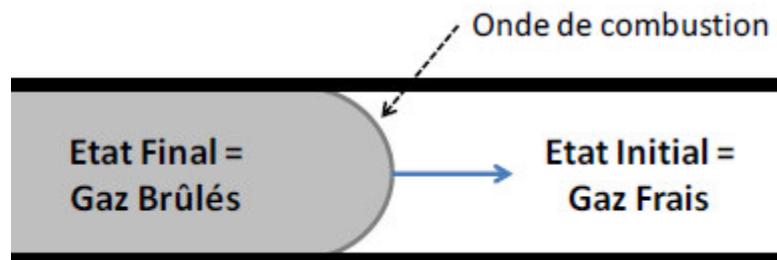


Figure (2.11) : Représentation schématique d'une onde de déflagration se déplaçant dans un tube. L'onde de combustion porte les gaz d'un état initial à un état final.

Le front de flamme est fortement incurvé en raison de l'expansion des gaz brûlés qui met en mouvement les gaz frais. En raison des forces de viscosité, la vitesse d'écoulement des gaz, nulle à la paroi, est maximale au centre du tube et le front de flamme tend à devenir hémisphérique. Les instabilités générées par la flamme perturbent généralement l'écoulement, le front se plisse et devient cellulaire si bien qu'au fur et à mesure de la propagation, l'écoulement en aval du front de flamme devient turbulent. La turbulence, en accroissant la surface de flamme augmente la vitesse de combustion et génère des ondes de pression. Cependant, tant que la flamme reste laminaire, on peut dire que le gradient de pression à travers le front flamme est négligeable et considérer qu'à un instant donné la pression est quasiment constante dans le réacteur.

Sur la base d'un mécanisme réactionnel établi, la résolution des équations de continuité permet de tracer les profils instantanés de température et des concentrations des différentes espèces à travers une flamme laminaire Figure (2.12). La teneur en radicaux porteurs de chaînes dans les gaz brûlés est d'autant plus importante que la température est élevée [30]

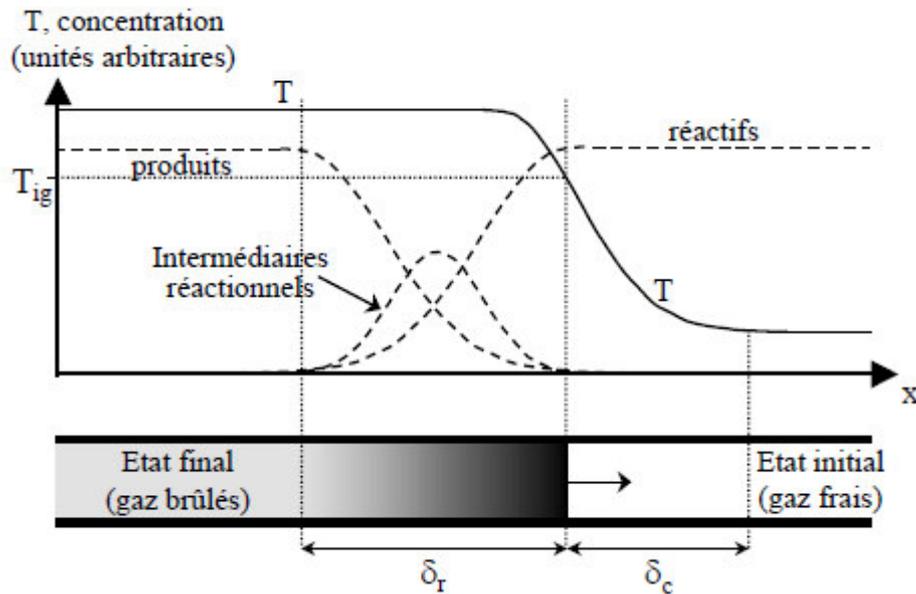


Figure (2.12) : Profils instantanés de température et de concentration des différentes espèces à l'intérieur d'une flamme se propageant dans un tube.

La flèche sur le front de flamme indique le sens de la diffusion de la chaleur générée par la réaction chimique et des intermédiaires réactionnels. Cette flèche indique donc également le sens de propagation de la déflagration. L'épaisseur  $\delta_r$  a été exagérée pour plus de clarté. En réalité, la zone de préchauffage est bien plus grande que la zone réactionnelle ( $\delta_c \gg \delta_r$ ).

### 2.8.2. Détonation

Contrairement à la déflagration, la détonation se caractérise par une vitesse de propagation du front de flamme supersonique responsable d'une surpression très importante. La théorie de Chapman-Jouguet considère la détonation comme une discontinuité monodimensionnelle stationnaire séparant les gaz frais des gaz brûlés (zone réactionnelle infiniment mince) avec une célérité constante. La vitesse de propagation de l'onde de détonation est constante et supersonique (de l'ordre de 2000 m/s), elle peut être calculée avec une très bonne précision sur les bases de la théorie thermodynamique de Chapman Jouguet. Elle dépend de la nature et de la composition du mélange gazeux ainsi que des conditions initiales de température et de pression. [31]



Figure (2.13) : Schéma d'une détonation selon Chapman – Jouguet.

En effet, si l'on considère que les gaz obéissent à la loi des gaz parfaits, les équations de conservation de masse, de quantité de mouvement et d'énergie au travers du front de détonation permettent d'écrire, dans le cas de confinements cylindriques

$$h_2 - h_1 = \frac{1}{2} \cdot \frac{p_2}{\rho_1} \cdot \left( \frac{p_2}{p_1} - 1 \right) \cdot \left( 1 + \frac{\rho_1}{\rho_2} \right) \quad (2.11)$$

Avec  $h_i$  : enthalpie par unité de masse

$P_i, \rho_i$  : respectivement la pression, la masse volumique de l'état  $i$

(i) : 1 représente l'état des gaz frais et 2 celui des gaz brûlés

On peut tracer, dans le plan  $(P, 1/\rho)$  deux courbes correspondant d'une part à l'adiabatique dynamique des produits et d'autre part à la droite de Rayleigh

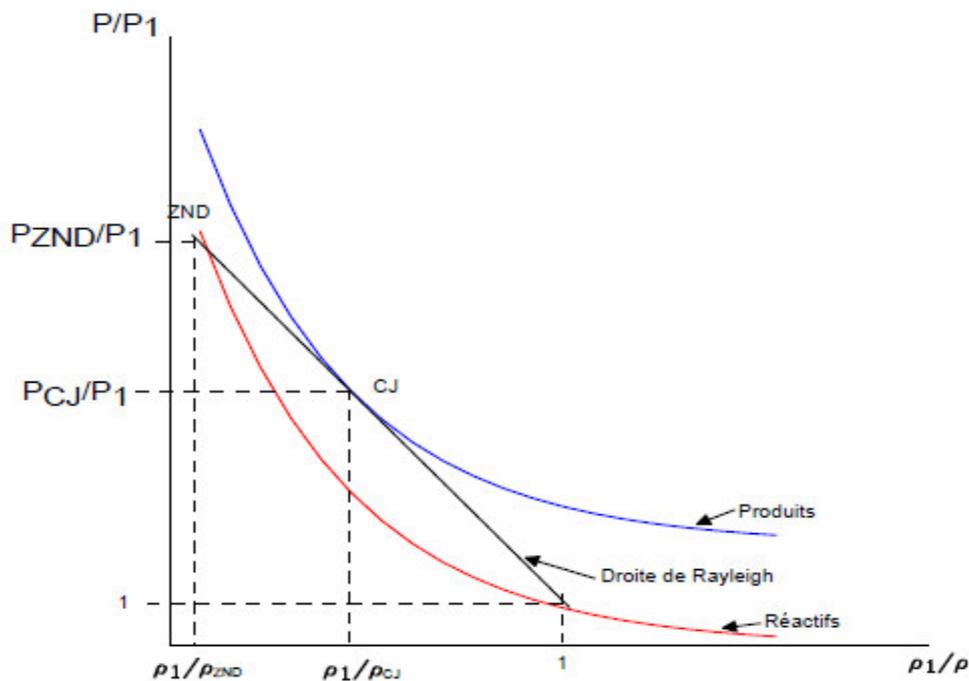


Figure (2.14) : Adiabatique d'Hugoniot et droite de Rayleigh

Sur la courbe d'Hugoniot qui correspond à l'adiabatique dynamique de combustion, parmi tous les états possibles représentant une détonation ou une déflagration, les points correspondant aux valeurs extrêmes minimum des célérités de propagation (points de contact de la droite de Rayleigh tangente à l'adiabatique) conduisent à la condition CJ :  $U_{o,2} = D - U_2 = a_2$ . La vitesse relative  $U_{o,2}$  des produits de combustion par rapport au front d'onde de célérité  $D$  est égale à la célérité locale du son dans les gaz brûlés. Cette condition peut être considérée comme une conséquence de la permanence du processus de discontinuité (onde réactive) que constitue la détonation ou la déflagration plane. Dans le cas d'une détonation, la condition CJ correspond à la production maximale d'entropie induisant une solution stable en fin de combustion (vitesse sonique)

Ce mode de propagation résulte du couplage entre une onde de choc et une zone réactionnelle très exothermique. L'onde de choc provoque une brusque compression adiabatique des gaz et donc une élévation de température. Si cette dernière est suffisamment importante pour porter les gaz à une température d'auto-inflammation correspondant à un délai d'auto-inflammation très court (de l'ordre de la microseconde), alors la réaction chimique se produit Figure (2.15). L'énergie dégagée par cette réaction permet à son tour l'entretien de l'onde de choc lui permettant ainsi de poursuivre sa propagation : nous avons là un phénomène auto-entretenu [31]

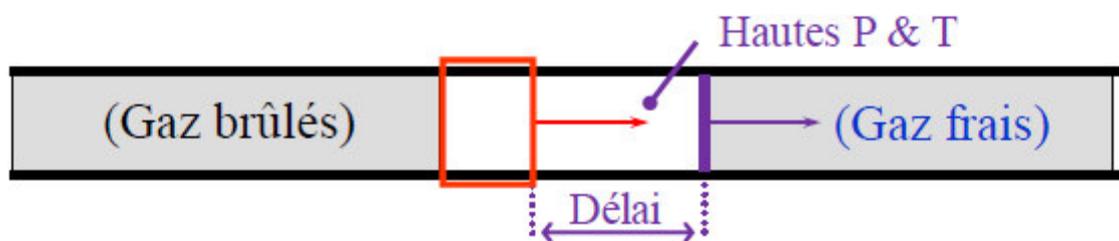


Figure (2.15) : Schéma d'une détonation

### 2.8.3. Transition Déflagration – Détonation

La propagation d'une flamme de pré-mélange peut être provoquée accidentellement. Dans le cadre d'études de risques et de prévention d'accidents, il est important de connaître le développement de cette propagation. Dans le cas d'une inflammation provoquée par une faible source d'énergie, la flamme se propage en régime subsonique, mais la vitesse n'est pas constante. Pour certains gaz en fonction de l'encombrement et de la géométrie de l'enceinte

dans laquelle la flamme se propage, sa vitesse peut augmenter et devenir supersonique on assiste alors à une transition de la déflagration vers la détonation

Les études portant sur l'origine de la détonation en phase gazeuse ont débuté à la suite des explosions dans les mines de charbon qui ont eu lieu en France et en Belgique au cours des années 1880. Les surpressions générées au cours de la détonation pouvant provoquer d'importants dégâts matériels, les recherches en vue de la compréhension de ce phénomène se sont intensifiées notamment concernant le passage de la déflagration à la détonation ou TDD. S'il est acquis que l'initiation de la détonation directe fait suite au dépôt d'une grande quantité d'énergie localement dans un mélange inflammable, il ne faut cependant pas négliger la possibilité d'obtenir une détonation à la suite d'une déflagration lente. Cette transition de la déflagration vers la détonation a été observée presque au même moment par Berthelot et Vielle et Mallard et Le Châtelier qui avaient été chargés d'élucider par des recherches expérimentales les conditions de production des explosions de grisou et les divers phénomènes qui les accompagnent [20]

## **2.9. Propriétés des mélanges combustible hydrogène-air**

Les scénarios d'accidents en central nucléaires impliqués dans certains cas une déflagration d'un prémélange hydrogène/air/vapeur d'eau. La fourniture de d'un apport d'énergie idéalement ponctuel à ce prémélange crée une série de réaction chimique se propageant à (apport d'énergie) et se propage des gaz brûlés vers les gaz frais. Il peut être suivi au cours de son évolution via divers moyens de détection. [32]

### **2.9.1. Limites d'inflammabilité**

La capacité d'un mélange à permettre une combustion auto-entretenue dépend des conditions physiques et chimiques du mélange combustible. Les concentrations minimales maximales en combustible déterminant la plage d'inflammabilité dépend non seulement de la concentration en carburant. mais également de celles des autres espèces présentes dans le mélange. Chimiquement neutres ou non. La température, la pression, la direction de propagation de la flamme. Le mode d'allumage intervient également sur la capacité du mélange à brûler.

Le sens de propagation de la flamme intervient également, en concurrence avec la gravité et la poussée d'Archimède. En effet la densité des gaz frais est plus élevée que celle des gaz brûlés et l'on observe des limites d'inflammabilité différentes selon que le front de flamme se déplace de manière ascendante ou descendante ou dans un plan horizontal. Dans l'air sec, à 100 KPa et 298 K, l'hydrogène présente ainsi des limites inférieures d'inflammabilité de 4% (molaire, ascendant) 6% (horizontal) et 9% (descendant).

La teneur limite en hydrogène augmente avec la teneur en vapeur d'eau dans le mélange combustible du fait de la capacité calorifique élevée de l'eau. Et au-dessus d'une teneur en eau de 63%. L'inflammation est plus possible. L'eau et le dioxyde de carbone sont des molécules triatomiques de capacités calorifiques et leurs influences sur les limites inférieures d'inflammabilité des mélanges pauvres en hydrogène sont plus proches.

### **2.9.2. Limite de détonabilité**

Les limites de détonabilité pour les mélanges hydrogène-air ont été établies pour des concentrations de 18 et 58 % d'hydrogène selon Shapiro [33]. Figure (2.16). Ces limites ont été remises en cause par Tieszen et coll [34] qui ont montré une détonabilité possible entre 13,5 et 70 % d'hydrogène. Stamps [35] a ensuite montré qu'en utilisant une installation plus grande (tube de 43 cm de diamètre), le domaine de détonabilité pouvait encore être étendu (toujours pour un mélange hydrogène/air à 100 KPa et température ambiante) à des limites de 11,6 % à 75,9 %. La teneur en eau influence nettement la limite inférieure de détonabilité.

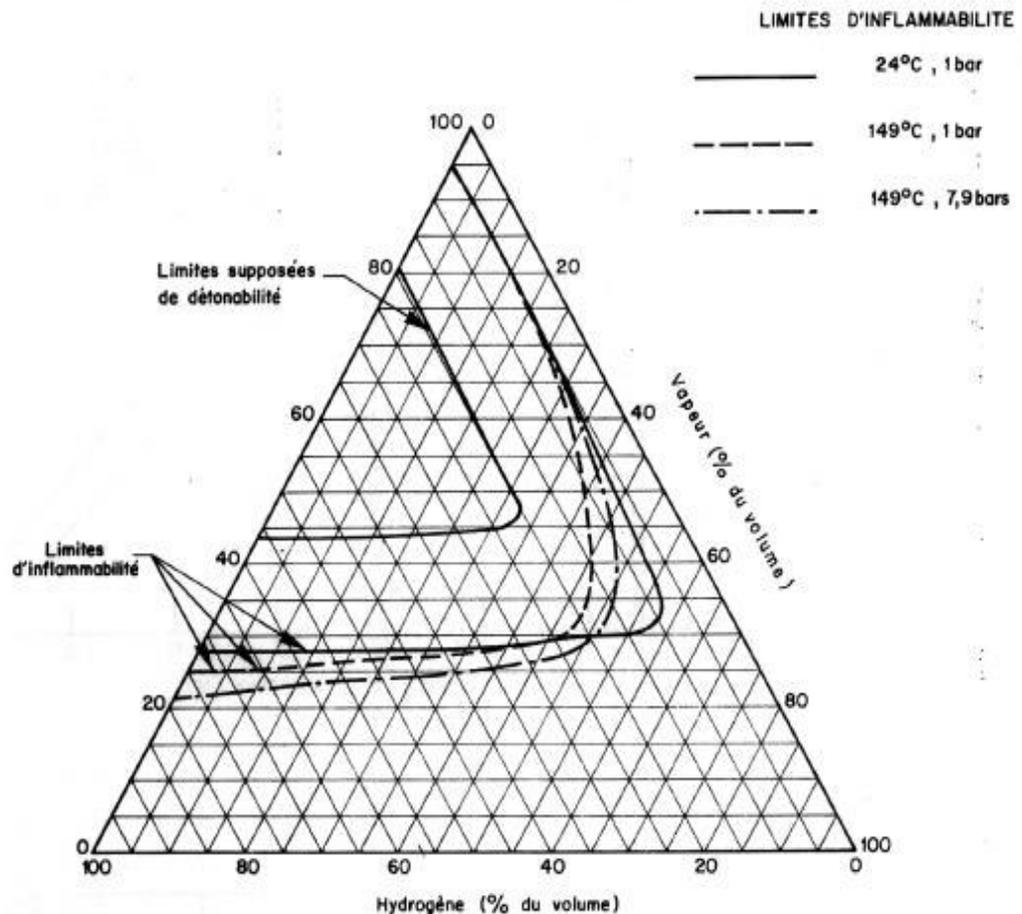


Figure (2.16) : Diagramme de Shapiro [23] pour les mélanges hydrogène-air-vapeur d'eau

### 2.9.3. Mode d'inflammation

Le mode d'inflammation peut avoir une influence directe sur le type de propagation de flamme. La densité énergétique libérée dans le milieu est à l'origine du mode de combustion observé. Si elle est trop importante, une détonation directe peut être initiée ou encore une déflagration rapide transitant vers la détonation. Si la densité est faible, une déflagration s'établira. Enfin si elle est faible, aucune combustion n'aura lieu. La libération d'énergie peut être effectuée via divers moyens : étincelle électrique, jet de gaz chaud, diffraction d'onde de détonation, convergence de faisceau lumineux.

Le mode d'inflammation le plus fréquent en laboratoire est celui par étincelle électrique, facilement mis en place et contrôlable la densité énergétique dépend alors de deux paramètres : énergie fournie au milieu et espacement des électrodes.

Pour un mélange des conditions données. Il existe une distance minimum entre les électrodes appelée distance de coïncement en dessous de laquelle la combustion ne sera pas initiée

Figure (2.17). Au voisinage de cette distance de coïncement, l'énergie nécessaire à l'allumage augmente fortement car le phénomène de dissipation d'énergie devient important. Ceux-ci sont fortement dépendants du rapport surface/volume de la zone de mélange combustion chauffée par l'étincelle et de la proximité des électrodes.

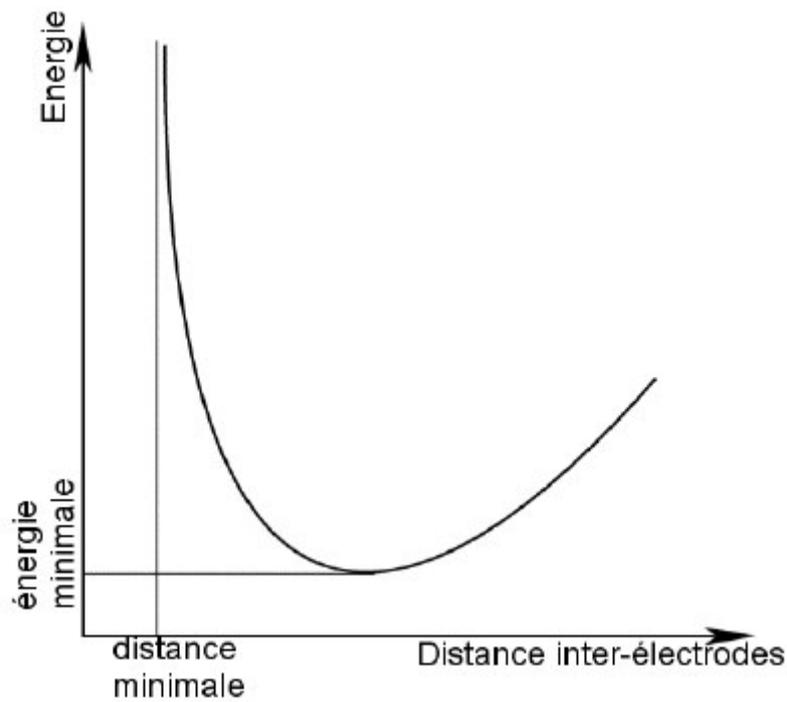


Figure (2.17) : Allumage par étincelle, énergie nécessaire en fonction de l'écartement des électrodes

De la même façon, il existe une énergie minimale nécessaire à l'allumage, correspondant à un écartement d'électrode optimal. Si l'écartement augmente, l'énergie nécessaire est alors plus grande pour atteindre la densité énergétique nécessaire la propagation de la combustion Figure (2.18)

L'énergie minimum et la distance de coïncement dépendent très fortement des propriétés physico-chimiques du milieu concerné (composition, pression, température ...) et dans une moindre mesure des caractéristique géométriques des électrodes. Ainsi. Pour un mélange hydrogène-air, une augmentation de la pression initiale a pour conséquence une décroissance considérable de l'énergie d'inflammation. Pour une pression initiale de 101 KPa l'énergie minimale est de 0,02 MJ pour un mélange stœchiométrique d'après la Figure (2.19) qui présente la variation de l'énergie minimum d'inflammation et la distance de coïncement pour différents mélanges hydrogène-oxygène-diluants. A quantité égale, La présence de CO<sub>2</sub> rend

l'inflammation plus difficile qu'avec les autres diluants cités. A la stœchiométrie, l'énergie d'inflammation passe de moins de 0,02 MJ à plus de 0,04 MJ en substituant le dioxyde de carbone d'azote. [22]

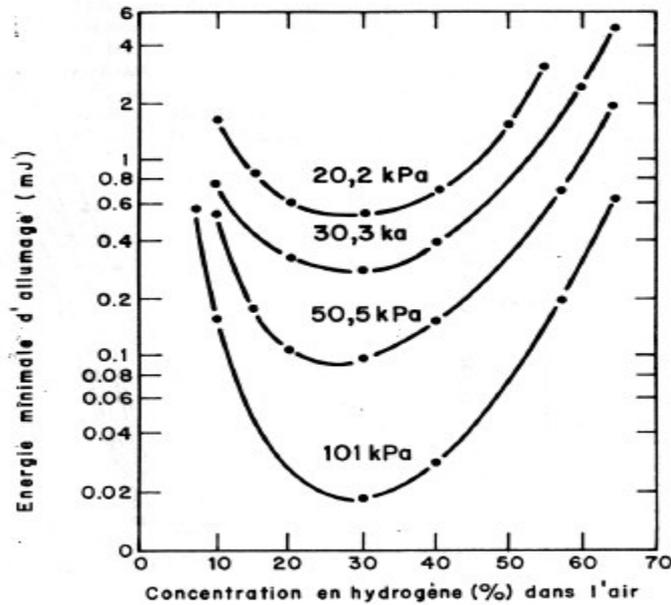


Figure (2.18) : Energie minimal d'inflammation des mélanges hydrogène-air pour différentes pressions initiales.

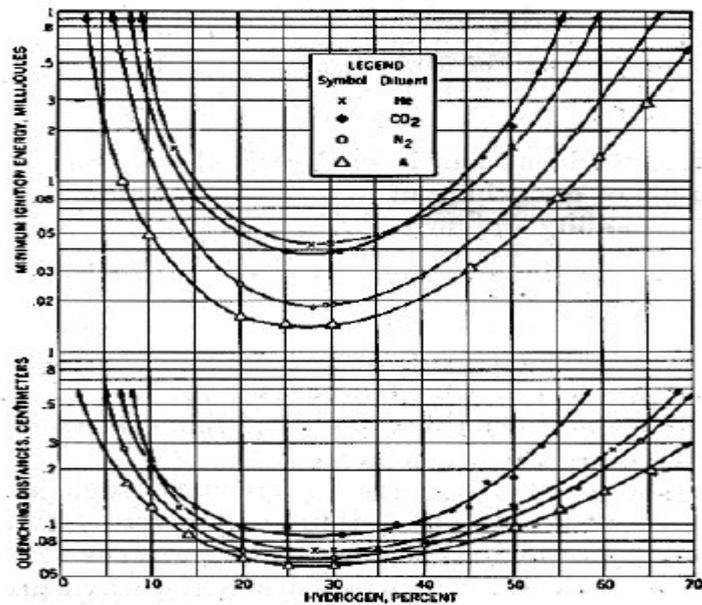


Figure (2.19) : Energie minimal d'inflammation et distance de coincement pour différent

## 2.10. Equation gouvernantes

Les équations aux dérivées partielles qui gouvernent un flux réactif sont :

### Conservation de la masse

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i)}{\partial x_i} = 0 \quad (2.12)$$

La loi des gaz parfait est utilisée pour calculer la densité (d) :

$$d = p / (RT \sum_{i=1}^N \frac{Y_i}{M_i}) \quad (2.13)$$

Avec P est la pression et T est la température N quantités de la matière Y<sub>i</sub> et M<sub>i</sub> sont respectivement la fraction massique et molaire de l'espèce i.

### Conservation de quantité de mouvement/Equation de Navier -Stokes

$$\frac{\partial(\rho u_j)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i u_j)}{\partial x_i} = -\frac{\partial p}{\partial x_j} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_i} + F_i \quad (2.14)$$

Avec F<sub>i</sub> la force du corps

Le tenseur de contrainte visqueux est donné par

$$\tau_{ij} = \mu s_{ij} - \frac{2}{3} \mu \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij}$$

$$s_{ij} = \left( \frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right)$$

### La conservation d'énergie (Enthalpie)

$$\frac{\partial \rho h_t}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j h_t}{\partial x_j} = \frac{\partial p}{\partial t} - \frac{\partial Q_j}{\partial x_j} - \frac{\partial u_i \tau_{ij}}{\partial x_j} + u_j F_j + S_r + S_e \quad (2.15)$$

$$Q_j = -k\rho \frac{\partial h_t}{\partial x_j} \quad (2.16)$$

$$h_t = \frac{1}{2} u_i u_j + \sum_{\alpha=1}^N Y_\alpha h_\alpha$$

$$h_\alpha = H_\alpha + \int_{T_{ref}}^T c_{p,\alpha} dT$$

$Q_j$  est le vecteur de flux thermique  
 $S_e$  est taux de dégagement de chaleur  
 $S_r$  est la perte de chaleur radiative  
 $H_a$  est la chaleur de formation de l'espèce a

### La conservation des espèces

$$\frac{\partial(\rho Y_\alpha)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j Y_\alpha)}{\partial x_j} = \frac{\partial(D_{L,\alpha\rho} \frac{\partial Y_\alpha}{\partial x})}{\partial x_j} + \dot{\omega}_\alpha \quad (2.17)$$

Avec  $Y_a$  est la fraction massique de l'espèce a ; a = 1 à N

$$Y = \frac{Y_F}{Y_{F,u}}$$

Avec  $Y_F$  est la fraction massique du carburant et  $Y_{F,u}$  est la fraction massique du carburant non brûlé dans le mélange.

## **2.11 Conclusion**

La combustion turbulente est un domaine très vaste d'une grande complexité sur tout lorsqu'on a à déterminer les paramètres de caractéristique à cause de la forme non-linéaire des équations régissant lors du traitement d'un phénomène de combustion turbulente, on rend compte qu'on a en effet affaire à des phénomènes combinés (turbulence-combustion).

La turbulence qui est un problème cinétique et la combustion, est un phénomène thermochimique, dans notre étude on va traiter la combustion turbulente pré-mélangée.

La flamme est un milieu réactionnel gazeux, hautement énergétique et de volume limité qui est le siège de réaction chimique de phénomène de diffusion d'espèces et de chaleur ainsi que des émissions de lumière.

Lorsqu'une flamme de pré-mélange se propage au sein du milieu gazeux, elle peut suivre deux mode de propagation un mode lent, appelé déflagration, ou la vitesse des gaz frais par rapport au front de flamme est subsonique, et un mode rapide appelé détonation ou cette vitesse devient supersonique.

# *Chapitre*

« 3 »

### 3.1. Introduction

Le principe d'un modèle est de remplacer un système complexe en un objet ou opérateur simple reproduisant les aspects ou comportements principaux de l'original (ex : modèle réduit, maquette, modèle mathématique ou numérique, modèle de pensée ou raisonnement).

Dans la nature, les systèmes et phénomènes physiques les plus intéressants sont aussi les plus complexes à étudier. Ils sont souvent régis par un grand nombre de paramètres non-linéaires interagissant entre eux (la météorologie, la turbulence des fluides...).

L'une des solutions est de recourir à une série d'expériences pour analyser les paramètres et grandeurs du système. Mais les essais peuvent s'avérer très coûteux (essais en vol, essais avec matériaux rares, instrumentations très chères...) et ils peuvent être très dangereux (essais nucléaires, environnement spatial...). Enfin il peut être difficile de mesurer tous les paramètres, échelles du problème trop petites (chimie du vivant, couche limite en fluide...) ou trop grandes (astrophysique, météorologie, géophysique...).

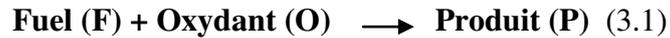
On peut aussi construire un modèle mathématique permettant la représentation du phénomène physique. Ces modèles utilisent très souvent des systèmes d'équations aux dérivées partielles (EDP) non-linéaires dont on ne connaît pas de solutions analytiques en général. Il faut alors résoudre le problème numériquement en transformant les équations continues de la physique en un problème discret sur un certain domaine de calcul (le maillage). Dans certains cas il s'agit de la seule alternative (nucléaire, astrophysique, spatial...). Dans d'autres cas, les simulations numériques sont menées en parallèle avec des expérimentations.

### 3.2. Les modèles de combustion

#### 3.2.1. Arrhenius Rate

C'est l'un des modèles de combustion de type « une seule réaction » les plus répandus car ils sont implémentés facilement et donnent des résultats très corrects surtout facilement couplés avec un code de turbulence. [12]

L'approche la plus simple pour un modèle de combustion est de supposer que seule la chimie joue un rôle important dans la détermination de la vitesse de réaction. L'équation d'Arrhenius donne la dépendance de la constante de vitesse  $k$  des réactions chimiques en fonction de la température  $T$  (en température absolue, telle que kelvins ou degrés Rankine) et l'énergie d'activation. Pour une réaction:



La vitesse de réaction est donnée par :

$$\dot{\omega} = -k\rho Y_F Y_O \quad (3.1) \quad k_r = A_f T^b \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) \quad (3.2)$$

- $E_a$  est l'énergie d'activation.
- $k_r$  est la constante de vitesse.
- $A_f$  est appelé le facteur pré-exponentiel.
- $Y_f$  et  $Y_o$  sont les fractions massique du combustible et de l'oxydant respectivement.

Cette approche néglige complètement l'effet de la turbulence et suppose que seule la chimie joue un rôle important. Ensuite, le taux de libération de chaleur est donné comme suit:

$$\tilde{\omega} = -A_f \bar{\rho} T^b Y_F Y_O \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) \quad (3.3)$$

Ce modèle devient inexact en raison de la dépendance non linéaire de la vitesse de réaction sur la température ( $T$ ) et de grandes fluctuations de température dans les flammes turbulentes.

L'inconvénient des modèles Arrhenius est la forte dépendance de la finesse du maillage. En effet affiner le maillage revient à réduire l'épaisseur de flamme.

### 3.2.2. Eddy Break-up Model (EBU)

Ce modèle suppose que la chimie en prémélangée ne joue pas un rôle direct et que la turbulence contrôle le taux de réaction, qui est représenté par une succession de tourbillons de gaz chauds et de gaz frais. Le terme source s'exprime sous la forme :

$$\tilde{w}_i = -C_{EBU} \frac{\tilde{C}(1-\tilde{C})}{\tau_t} (Y_i^o - Y_i^{eq}) \quad (3.4)$$

Où  $C_{EBU}$  est une constante empirique. On peut, en première approximation, justifier cette formule en disant que le taux de combustion ne dépend alors que de la probabilité de trouver au même endroit une particule fluide brûlée et une non brûlée, puisqu'après leur mélange, dans tous les cas, les réactions chimiques sont très rapides; or, la probabilité pour trouver une particule fluide brûler est  $\tilde{C}$ , et celle pour une particule fluide imbrûlée est  $(1-\tilde{C})$ . Cette formule est valable pour toutes les espèces  $i$ . L'utilisation de ce modèle est rendue délicate par le choix de la constante  $C_{EBU}$ . De plus les effets de l'étirement et de la chimie ne sont pas pris en compte correctement.[26]

$\tau_t = k / \varepsilon$  Est l'échelle de temps turbulent.

### 3.2.3. Eddy Dissipation Concept (EDC)

L'Eddy Dissipation Concept (EDC) a été présenté pour la première fois par Magnussen et Hjertager en 1976, auparavant, principalement utilisé pour la combustion non prémélangée, mais aussi pour la combustion prémélangée.

Ce modèle chimique, développé par Gran et Magnussen (1996), est une extension du modèle EDM. Le modèle considère que la réaction chimique a lieu dans des structures fines qui sont modélisées comme des réacteurs parfaitement agités dans l'échelle de temps. Il considère l'interaction turbulence-réaction. Dans ce modèle, le mélange à l'échelle moléculaire et les réactions chimiques prennent place dans des zones concentrées et isolées qui occupent une petite fraction du volume total de l'écoulement.

L'Eddy Dissipation Concept (EDC) est un concept général pour traiter l'interaction entre la turbulence et la chimie dans les Flammes qui offre la possibilité de traiter la turbulence-cinétique chimique d'une manière conceptuelle rigoureuse en même temps qu'il s'occupe de

beaucoup des caractéristiques importantes de la turbulence. L'EDC a été appliquée, sans qu'il soit nécessaire de modifier les constantes, pour une grande variété de problèmes de combustion prémélangées et contrôlés par diffusion.

#### 3.2.4. Eddy dissipation model (EDM)

Dans ce modèle, la réaction chimique est régie par une grande échelle de temps de mélange de remous. La combustion commence chaque fois qu'il y a une turbulence présente dans le flux. Il n'a pas besoin d'une source d'inflammation pour amorcer la combustion. Il est bon pour la combustion non prémélangée, mais pour les flammes pré mélangées, le réactif brûle au moment où ils entrent dans le modèle de calcul, ce qui est incorrect. Le réactif a besoin d'un certain temps pour atteindre la température d'inflammation pour amorcer la combustion. C'est un défaut de ce modèle.

#### 3.2.5. Modèle C équation

Une variable scalaire représentant la progression de la réaction entre non brûlé et brûlé est notée  $c$ . L'équation de transport pour  $c$  décrit l'évolution spatiale et temporelle de la progression de la réaction dans un champ d'écoulement turbulent. Devant la flamme,  $c$  est défini comme nul dans les réactifs imbrûlés et derrière la flamme  $c$  est l'unité dans les produits brûlés. Dans la brosse à flamme  $c$  varie entre zéro et un. La brosse à flamme se propage en amont à une vitesse de flamme turbulente modélisée. Fluent propose deux modèles pour la vitesse de la flamme turbulente, à savoir le modèle Zimont et le modèle Peters flamme speed.[27]

##### ➤ **Modèle de Zimont**

Zimont a proposé que les flammes prémélangées turbulentes puissent être modélisées en résolvant l'équation moyenne de Favre pour la variable de progression. Ce modèle a été développé sur la base d'une théorie selon laquelle la combustion turbulente prémélangée a lieu avec une vitesse de combustion stationnaire, qui dépend de la turbulence et des paramètres physico-chimiques du mélange. Dans les écoulements de réaction prémélangés, l'activité chimique se produit souvent dans les fronts minces en forme de feuilles appelés flammes. Les simulations pour la combustion turbulente prémélangée doivent résoudre cette zone de

réaction chimique ou suivre les flammes en continu. Mais résoudre ces fronts de flamme très minces n'est pas toujours une tâche pratique. Un front de flamme statistiquement mesuré est suivi à la place du front exact. Après l'affaissement, une zone dans laquelle une réalisation réelle et instantanée de la flamme pourrait être trouvée entourera le front moyen. La largeur de cette zone est désignée par l'épaisseur moyenne turbulente de la brousse à flamme. Ce modèle suppose une épaisseur de brousse de flamme croissante selon la loi de diffusion turbulente. Ces flammes avec une épaisseur de brousse de flamme croissante et une vitesse de combustion constante sont appelées flammes de propagation stables intermédiaires. La vitesse de réaction avec ce modèle est donnée par [30]

$$\tilde{\omega} = \rho_u S_t |\nabla C| \quad (3.5)$$

### 3.3. Les modèles de turbulence

L'un des problèmes majeurs de l'approche informatique des phénomènes physique est la représentation des systèmes gazeux, à cause de leur comportement complexe et leur géométrie floue. Leur évolution temporelle peut être représentée par les équations de Navier-Stokes et leurs formes étendues aux phénomènes turbulents.

La solution numérique de flammes pré-mélangées turbulentes avec CFD peut être obtenue par les méthodes de calcul suivantes:

#### 3.3.1. L'approche DNS pour Direct Numerical Simulation

C'est l'approche la plus précise pour la simulation de la turbulence où les équations instantanées de Navier-Stokes sont résolues. Dans ce cas, le domaine de calcul doit être aussi large que le plus grand tourbillon. Comme référence de longueur, de longueur définie De plus, dans une DNS valide, les plus petits tourbillons doivent être également résolus explicitement. Par conséquent, le maillage numérique doit avoir des cellules de taille comparable avec l'échelle de longueur de Kolmogorov pour l'écoulement considéré. Si on utilise une discrétisation uniforme du domaine de calcul et on prend en compte les contraintes des échelles de longueurs, le coût du calcul peut être estimé [26]. Pour les écoulements froids, le nombre de mailles  $N$  nécessaires est de l'ordre de  $Re_t^{9/4}$ ; avec  $Re_t$  est le nombre de Reynolds de la turbulence basé sur les fluctuations  $u'$  et l'échelle intégrale. On cherche ici à simuler

directement l'évolution de la cinétique avec toutes les échelles turbulentes (spectre fréquentiel complet) limitent les cas étudiés à des configurations simples. (DNS) est donc aujourd'hui limitée à des écoulements pour lesquels le nombre de Reynolds est très faible. [31]

$$\text{Re}_l = \text{Re}(l) = \frac{u'l}{\nu} \quad (3.6)$$

Pour la combustion turbulente, les maillages doivent être fins pour capter la structure interne de la flamme. Poinot et Veynante ont donné la relation suivante pour la génération du maillage:

$$\text{Re}_l \text{ Da} < \left( \frac{N}{Q} \right)^2$$

Où Q est le nombre de mailles nécessaires pour la résolution des échelles chimiques.

Aujourd'hui, les études DNS sont restreintes sur des petites géométries avec des faibles nombres de Reynolds. Cependant, la DNS devient un outil précieux pour la compréhension des écoulements turbulents avec ou sans réaction, ses solutions permettent une analyse profonde des phénomènes isolés et interviennent dans le développement des modèles.

### 3.3.2. L'approche LES pour Large Eddy Simulation

La LES est basée sur l'observation des petites structures turbulentes qui ont un caractère plus universel que les grandes. L'idée est de calculer la contribution des grandes échelles énergétiques, responsables du transfert de la quantité de mouvement et d'énergie, et de modéliser l'effet des petites structures qui ne sont pas résolues par le schéma numérique. Vu le caractère universel et homogène des petites structures, on peut s'attendre que les modèles dits de sous mailles soient plus simples que les modèles pour les équations RANS.

L'approche LES représente la solution instationnaire tridimensionnelle des équations. Elle est moins chère que la DNS, le nombre de mailles nécessaire pour la résolution est de l'ordre de  $\text{Re}_l^{1.8}$ . Cela fait que la LES peut résoudre des problèmes d'engineering à prix raisonnable.

Dans un code de calcul LES l'opération de filtrage est réalisée implicitement par le maillage et le schéma numérique: les structures de la turbulence de taille inférieure à l ne sont pas résolues par le calcul mais prises en compte par le modèle LES. Les erreurs de dissipation et de dispersion du schéma numérique contribuent à l'augmentation de la taille du filtre.

On ne simule que l'évolution des grandes échelles turbulentes et on modélise le comportement des échelles de tailles inférieures. Cette approche se développe rapidement et permet aujourd'hui de simuler des configurations industrielles mais dans des temps de calcul encore importants.

### 3.3.3. Le modèle k- $\omega$

Le modèle K-oméga est l'un des plus couramment utilisés modèles de turbulence. C'est un modèle à deux équations, ce qui signifie, il comprend deux équations de transport supplémentaires pour représenter les propriétés turbulentes de l'écoulement.

La première variable transportée est l'énergie cinétique turbulente k. La deuxième variable transportée dans ce cas est la dissipation spécifique  $\omega$ . Il est la variable qui détermine l'échelle de la turbulence, alors que la première variable k, et  $\omega$  détermine l'énergie de la turbulence.

Les modèles k- $\omega$  les plus utilisés sont :[32]

- k-oméga modèle de Wilcox.
- Le modèle k-oméga modifiée de Wilcox.
- SST k-oméga modèle.

### 3.3.4. Reynolds Averaged Navier-Stokes (RANS)

La méthode RANS est basée sur l'approximation de Boussinesq. Les modèles RANS offrent l'approche la plus économique pour le calcul des flux industriels turbulents complexes. Les équations du bilan pour les quantités moyennes de Reynolds sont obtenues en calculant la moyenne des équations du bilan instantané.

L'expérience a montré que les trajectoires des particules et les caractéristiques locales de l'écoulement ne sont pas reproductibles, par contre, certaines quantités "moyennes" le sont. Les mesures des valeurs moyennes de vitesse, d'énergie ou de concentration montrent qu'elles sont reproductibles. De la même manière, toutes les quantités statistiques qui peuvent être définies, moyennes, variances ou corrélations entre différentes grandeurs, sont reproductibles. De ce fait, les variables caractéristiques de l'écoulement sont représentées par une quantité fluctuant autour d'une quantité moyenne.[31]

$\phi = \bar{\phi} + \phi'$  Où  $\bar{\phi}$  est la moyenne de Reynolds et  $\phi'$  la partie fluctuante de la variable  $\phi$ .

Les équations moyennes ont besoin de modèles de fermeture un modèle de turbulence pour fermer les conditions de contraintes turbulentes et un modèle de combustion turbulent pour fermer la vitesse de libération de chaleur.

Les modèles RANS sont adaptés à de nombreuses applications d'ingénierie et fournissent généralement le niveau d'exactitude requis.

### 3.3.5. Le modèle k-ε

#### ➤ REALISABLE modèle k-ε

Un avantage immédiat du modèle k-ε de réalisation est qu'il fournit de meilleures prévisions pour le taux d'étalement des deux plans et jets ronds. Il présente également des performances supérieures pour les flux impliquant la rotation, les couches limites sous forte gradients de pression indésirables, la séparation et la recirculation. Dans pratiquement toutes les mesures de comparaison, Réalisable k-ε démontre une capacité supérieure à capturer le flux moyen des structures complexes.

#### ➤ RNG K- ε

Le modèle RNG a été développé en utilisant Re-Normalisation Groupe (RNG) méthodes par Yakhot et al pour normaliser des équations de Navier-Stokes, pour tenir compte des effets de plus petites échelles de mouvement. Dans le modèle k-epsilon standard, la viscosité turbulente est déterminée à partir d'une échelle de longueur de turbulence unique, de sorte que la diffusion turbulente calculée est celle qui se produit uniquement à l'échelle spécifiée, alors qu'en réalité, toutes les échelles de mouvement contribueront à la diffusion turbulente. L'approche de RNG, qui est une technique mathématique qui peut être utilisé pour dériver un modèle de turbulence similaire à la k-epsilon, se traduit par une forme modifiée de l'équation epsilon qui tente de rendre compte des différentes échelles de mouvement en modifiant le terme de production. [33]

#### ➤ Le modèle k-ε standard

Parmi les modèles de turbulence, le modèle  $k-\varepsilon$  est l'un des plus utilisés. Ce modèle du premier ordre repose sur le concept de viscosité turbulente introduit par Boussinesq, qui consiste à modéliser les tensions de Reynolds  $\overline{\rho u_i'' u_k''}$  par analogie avec le tenseur des contraintes visqueuses  $\overline{\tau_{ik}}$ . En faisant l'hypothèse que ces deux termes représentent des phénomènes de diffusion, l'un correspond à la diffusion moléculaire et l'autre à un processus de mélange par diffusion turbulente. Par analogie avec le transport moléculaire de quantité de mouvement qui est caractérisé par la viscosité du fluide  $\nu$ , le mélange turbulent est caractérisé par la viscosité turbulente  $\nu_T$ . Le premier est une propriété moléculaire du fluide alors que le second dépend de l'écoulement turbulent,  $\nu_T$  est donc a priori une variable du temps et de l'espace.

L'objectif de ce modèle est de donner une fermeture, à une échelle intégrale  $l$ , pour le tenseur de Reynolds et pour les termes de transport turbulent dans les équations de Navier Stokes moyennées. Ce modèle utilise le principe de la viscosité turbulente qui est propriété du champ de l'écoulement turbulent et pas du mélange gazeux.

Contrairement aux autres modèles de turbulence, le modèle  $k-\varepsilon$  se concentre sur les mécanismes qui affectent l'énergie cinétique turbulente. Le modèle de longueur de mélange manque de ce type de généralité. L'hypothèse sous-jacente de ce modèle est que la viscosité turbulente est isotrope, c'est-à-dire que le rapport entre la contrainte de Reynolds et la vitesse moyenne des déformations est le même dans toutes les directions.

Les tensions de Reynolds sont alors exprimées en fonction des gradients moyens de la façon suivante :[34]

$$\overline{\rho u_i'' u_k''} - \frac{1}{3} \overline{\rho u_l'' u_l''} \delta_{ik} = -\bar{\rho} \nu_T \left( \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_k} + \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_i} \right) + \frac{2}{3} \bar{\rho} \nu_T \frac{\partial \tilde{u}_l}{\partial x_l} \delta_{ik} \quad (3.7)$$

L'énergie cinétique turbulente  $k$  est la demi-trace du tenseur de Reynolds, elle est définie par :

$$\bar{\rho} K = \overline{\rho u_l'' u_l''}$$

L'analogie avec la diffusion moléculaire permet également d'exprimer les flux turbulents des scalaires (analogie avec la loi de Fick) :

$$\overline{\rho u_k'' \xi''} = -\bar{\rho} D_T \frac{\partial \tilde{\xi}}{\partial x_k} \overline{\rho u_k'' y''} = -\bar{\rho} D_T \frac{\partial \tilde{y}''}{\partial x_k}$$

Les flux turbulents des variances des scalaires s'écrivent alors :

$$\overline{\rho u_k'' \xi''^2} = -\bar{\rho} D_T \frac{\partial \overline{\xi''^2}}{\partial x_k} = -\bar{\rho} D_T \frac{\partial \overline{y''^2}}{\partial x_k} = -\bar{\rho} D_T \frac{\partial \overline{y'' \xi''}}{\partial x_k}$$

Le coefficient de diffusion turbulente  $D_T$  est le rapport de la viscosité turbulente  $\nu_T$  sur le nombre de Schmidt turbulent  $\sigma_T$ ,  $D_T = \nu_T / \sigma_T$ .

L'équation pour l'énergie cinétique turbulente  $k$  est obtenue à partir de l'équation des tensions de Reynolds :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} k) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} u_j k) = \frac{1}{2} [D_{ii} + P_{ii} - \bar{\rho} \varepsilon_{ii} + H_{ii}] = D^k + P^k - \bar{\rho} \varepsilon + H^k \quad (3.8)$$

Avec les termes du second membre suivants :

$$D^k = -\frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{\rho u_j'' u_i'' u_i''} - \overline{u_i'' \tau_{ij}} - \overline{u_i'' \tau_{ij}})$$

$$P^k = -\overline{\rho u_j'' u_i''} \frac{\partial u_i}{\partial x_j}$$

$$\bar{\rho} \varepsilon = \overline{\tau_{ij} \frac{\partial u_i''}{\partial x_j}}$$

$$H^k = -\overline{u_i'' \frac{\partial p}{\partial x_i}}$$

Le transport turbulent de l'énergie cinétique  $k$  est modélisée par une loi gradient, ce qui conduit à:

$$D^k = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \bar{\rho} \left( \nu + \frac{\nu_T}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right)$$

Le terme de production  $P^k$  est fermé.

Le terme de corrélation avec la pression  $H^k$  est habituellement décomposé en deux parties,

$H^k = G^k + \Phi^k$ , la première liée aux fluctuations de pression et la seconde liée à la pression moyenne :

$$G^k = -\overline{u_j''} \frac{\partial \overline{\rho}}{\partial x_j} \text{ Et } \phi = -\overline{2u_j''} \frac{\partial p'}{\partial x_j}$$

Le terme  $G^k$  lié à la pression moyenne est nul lorsque la masse volumique est constante ( $\overline{u_j''} = \overline{u_j'} = 0$ ). Cependant, il nécessite une modélisation particulière pour les écoulements à masse volumique variable.

Le terme  $\Phi^k$  est négligé car il peut aussi être exprimé de la façon suivante :

$$\phi^k = -\overline{u_j''} \frac{\partial p'}{\partial x_j} = -\overline{\frac{\partial u_j'' p'}{\partial x_j}} + \overline{p' \frac{\partial u_j''}{\partial x_j}}$$

L'expression  $\overline{\frac{\partial u_j'' p'}{\partial x_j}}$  est un terme de flux, considéré comme négligeable devant le terme de diffusion  $D^k$ , L'expression  $\overline{p' \frac{\partial u_j''}{\partial x_j}}$  est nulle lorsque la masse volumique est

Constante car l'équation de continuité implique  $\overline{\frac{\partial u_j''}{\partial x_j}} = 0$ . Il n'y a pas de raison a priori qui permette de négliger  $\Phi^k$  lorsque la masse volumique varie. Ce terme est néanmoins

Souvent négligé dans les modèles où les effets de compressibilité sont négligeables.

Le modèle  $k - \varepsilon$  utilise aussi une équation de transport pour le taux de dissipation de la turbulence  $\varepsilon$  et la connaissance de  $k$  et  $\varepsilon$  permet d'exprimer la viscosité turbulente  $\nu_T$ .

L'analyse dimensionnelle a conduit à:

$$\nu_T = C_u \frac{k^2}{\varepsilon}$$

Où  $C_u$  est une constante déterminée expérimentalement dont la valeur est estimée à 0.09 est proposé une équation modélisée qui est basée sur la forme de l'énergie cinétique turbulente :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\overline{\rho \varepsilon}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\overline{\rho u_j \varepsilon}) = D^\varepsilon + C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{k} P^k - C_{\varepsilon 2} \overline{\rho} \frac{\varepsilon^2}{k} + C_{\varepsilon 3} \frac{\varepsilon}{k} H^k \quad (3.9)$$

$$\text{Avec : } D^\varepsilon = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \overline{\rho} \left( \nu + \frac{\nu_T}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right)$$

Si les variances des scalaires sont transportées, les termes de dissipation scalaire apparaissant dans ces équations doivent également être modélisés. Les trois termes de dissipation sont respectivement :

$$\overline{\rho \varepsilon_\xi} = -2D \frac{\overline{\partial \xi'' \partial \xi''}}{\partial x_k \partial x_k} \overline{\rho \varepsilon_\xi} = -2\rho D \frac{\overline{\partial y'' \partial y''}}{\partial x_k \partial x_k} \overline{\rho \varepsilon_\xi} = -2\rho D \frac{\overline{\partial \xi'' \partial y''}}{\partial x_k \partial x_k} \quad (3.10)$$

Pour représenter l'évolution de la dissipation d'un scalaire passif, on utilise habituellement un modèle de relaxation linéaire. Ce modèle relie le taux de dissipation à un temps de mélange caractéristique, lui-même relié au temps caractéristique de la turbulence :

$$\overline{\rho \varepsilon_\xi} = \frac{\overline{\rho \xi''^2}}{T_\xi} = \frac{\overline{\rho \xi''^2}}{R_\xi \tau_T} \quad \text{Avec } \tau_T = \frac{k}{\varepsilon}$$

La constante  $R_\varepsilon$  a été déterminée dans plusieurs expériences. Cette représentation suppose une très forte similarité des spectres turbulents pour les scalaires et pour le champ de vitesse, similarité qui n'est pas toujours vérifiée même pour un scalaire passif. Pour un scalaire réactif, la modélisation de la dissipation est compliquée par le fait qu'elle peut-être entièrement pilotée par la réaction chimique. Des modèles de fermeture algébrique pour ces termes de dissipation, spécifiques à la combustion, seront proposés dans les chapitres suivants. D'autres possibilités consistant à considérer des équations de transport modélisées pour ces termes ont aussi été proposées.

Les constantes du modèle  $k - \varepsilon$  généralement utilisées sont répertoriées dans le tableau :

$C_\mu$	$C_{\varepsilon 1}$	$C_{\varepsilon 2}$	$C_{\varepsilon 3}$	$\sigma_k$	$\sigma_\varepsilon$	$\sigma_T$	$R_\varepsilon$
---------	---------------------	---------------------	---------------------	------------	----------------------	------------	-----------------

0,09	1,44	1,92	1,44	1	1,3	0,7	1,25
------	------	------	------	---	-----	-----	------

La connaissance de  $k$  et  $\varepsilon$  permet de calculer la viscosité turbulente et finalement les tensions de Reynolds et les flux turbulents des scalaires.

Le modèle  $k - \varepsilon$  est limité à des cas où la turbulence est faiblement anisotrope car ce modèle ne résout pas les différentes composantes de l'énergie cinétique. De plus, l'hypothèse de Boussinesq, qui conduit à la loi gradient pour les flux turbulents, peut se révéler inadéquate pour des écoulements à masse volumique variable. En effet, le transport turbulent peut, dans certaines configurations de combustion, être complètement dé-corrélée des gradients moyens, voire même être de signe opposé à celui donné par la loi gradient

### 3.4. Conclusion

La combustion turbulente est un domaine très vaste d'une grande complexité surtout lorsqu'on a à déterminer les paramètres caractéristiques, à cause de la forme non-linéaire des équations régissant. On a donc recours aux méthodes numériques pour simuler le système.

Lors du traitement d'un phénomène de combustion turbulente, on rend compte qu'on a, en effet, affaire à deux phénomènes combinés (turbulence-combustion): la turbulence qu'est un problème cinétique, où il faudrait relever la fermeture par l'un des modèles de la turbulence ( $k-\varepsilon$ , RNG  $k-\varepsilon$ , LES, ...) ainsi que les tensions de Reynolds par l'hypothèse de Boussinesq. La combustion est un phénomène thermo-chimie il faut donc choisir un modèle pour modéliser le phénomène, ce doit respecter le genre de la combustion (prémélange ou non-prémélange) car chaque type doit modéliser par ces propres modèles.

L'objectif de ce travail, est de traiter la combustion turbulente prémélangé, en choisissant le modèle «  $k-\varepsilon$  standard » pour la turbulence et « EDM » comme modèle de combustion.

# *Chapitre*

*« 4 »*

## 4.1. Présentation de la CFD

### 4.1.1. La dynamique des fluides numérique CFD

La dynamique des fluides numérique (CFD) est une branche de la mécanique des fluides qui utilise l'analyse numérique et les structures de données pour résoudre et analyser les problèmes qui impliquent des flux de fluide. Des ordinateurs sont utilisés pour effectuer les calculs nécessaires pour simuler l'interaction des liquides et des gaz avec des surfaces définies par les conditions aux limites.

La CFD consiste à étudier les mouvements d'un fluide, ou leurs effets, par la résolution numérique des équations régissant le fluide. En fonction des approximations choisies, qui sont en général le résultat d'un compromis en termes de besoins de représentation physique par rapport aux ressources de calcul ou de modélisation disponibles, les équations résolues peuvent être les équations d'Euler, les équations de Navier-Stokes, etc.[34]

La CFD a grandi d'une curiosité mathématique pour devenir un outil essentiel dans pratiquement toutes les branches de la dynamique des fluides, cette approche est l'objet d'un effort important, car elle permet l'accès à toutes les informations instantanées (vitesse, pression, concentration).

La simulation numérique (CFD) est de plus en plus utilisée en combustion. des simulations numériques sont faites à partir d'un code de calcul commercial pour faire différentes comparaisons entre des données expérimentales et des modèles de la chimie et de la physique d'un phénomène de combustion. [35]

### 4.1.2. Méthodologie

Comme toutes les approches, une procédure de base doivent être suivi :

- **La géométrie** et les limites physiques du problème
- **Le volume** occupé par le fluide est divisé en cellules discrètes (la maille). Le maillage peut être uniforme ou non uniforme, structuré ou non structuré, consistant en une combinaison d'éléments hexaédriques, tétraédriques, prismatiques, pyramidaux ou polyédriques

- **La modélisation** physique est définie - par exemple, les équations du mouvement fluide, enthalpie, rayonnement, conservation des espèces ect. [35]
- **Les conditions limites** sont définies. Cela implique de spécifier le comportement et les propriétés des fluides dans toutes les surfaces limites du domaine fluide. Pour les problèmes transitoires, les conditions initiales sont également définies.
- **La simulation** est lancée et les équations sont résolues de façon itérative en mode stationnaire ou transitoire.
- Enfin, un post processeur est utilisé pour l'analyse et la visualisation de la solution résultante.

## 4.2. La méthode des volumes finis

La méthode des volumes finis est une approche commune utilisée dans les codes CFD. Les équations qui régissent le fluide sont résolues sur des volumes de contrôle discret. En analyse numérique, la méthode des volumes finis est utilisée pour résoudre numériquement des équations aux dérivées partielles, comme la méthode des différences finies et celle des éléments finis.

Les méthodes des volumes finis exploitent des approximations d'intégrales. Toutefois, cette méthode se base directement sur la forme dite forte de l'équation à résoudre, alors que la méthode des éléments finis se fonde sur une formulation variationnelle de l'équation. L'équation aux dérivées partielles est résolue de manière approchée à l'aide d'un maillage constitué de volumes finis qui sont des petits volumes disjoints (en 3D, des surfaces en 2D, des segments en 1D) dont la réunion constitue le domaine d'étude. Les volumes finis peuvent être construits autour de points d'un maillage initial, mais ce n'est pas une nécessité. [36]

## 4.3 Le software FLUENTE

FLUENT est un programme informatique ultramoderne pour la modélisation du flux de fluide et de la chaleur Transfert en géométries complexes. Il offre une flexibilité du maillage complète, résout les Problèmes des flux avec des maillages non structurés qui peuvent être générés dans des géométries complexes. Les types de maillage pris en charge incluent triangulaire / quadriatique 2D, 3D tétraédrique / hexaédrique / pyramide / wedge, et des

mailles mixtes (hybrides). Ça peut aussi affiner ou grossir la grille en fonction des différents paramètres d'écoulement.

FLUENT est écrit dans le langage informatique C et utilise pleinement la flexibilité et la puissance offert par le langage. Par conséquent, c'est une véritable mémoire dynamique, les structures de données efficaces et le contrôle flexible du solveur sont tous possibles. En outre, FLUENT utilise une architecture client / serveur, ce qui lui permet de s'exécuter en tant que Procédés simultanés séparés sur les postes de travail du bureau client et le calculer avec la puissance du serveur, pour l'exécution efficace, le contrôle interactif et la flexibilité complète de la machine ou bien les types de systèmes d'exploitation. Toutes les fonctions requises pour calculer une solution et Les résultats sont accessibles en FLUENT à l'aide d'un menu interactif piloté par un menu d'interface. [37]

FLUENT est un solveur très utilisé dans l'industrie à travers le monde. Il est souvent considéré comme une référence dans le domaine de la modélisation fluide. Le paramétrage du modèle se fait par une interface graphique. Il dispose d'une interface de scripts pour automatiser les processus de calcul. L'un des intérêts de ce logiciel de simulation généraliste, est qu'il dispose d'un nombre relativement important de modèles, pouvant faire face à divers aspects de la mécanique des fluides : écoulements diphasiques (miscible, non miscible, cavitation, solidification), turbulence (LES, KE, Kw, SA, Reynolds stress...), combustion (pré-mélangé et non pré-mélangé), transport de particules, écoulements en milieux poreux, maillages mobiles et dynamiques avec reconstruction du maillage, entre autres. Les schémas numériques temporels et spatiaux peuvent être modifiés pour améliorer la convergence. Fluent est parallélisé et permet de tirer parti de systèmes multiprocesseurs aussi bien au sein d'une seule machine qu'en réseau (cluster, dualcore, plateforme multi-CPU). [38]

# *Chapitre*

« 5 »

### 5.1. L'installation ENACCEF

Les expériences ont été menées dans l'installation d'essai ENACCEF située à Orléans, en France. Les mesures ont été effectuées par le Centre national de la recherche scientifique. L'installation d'essai est consistée d'un dôme et un tube d'accélération, comme il est indiqué dans la figure (5.1).le tube d'accélération fait 3,2 m de longueur avec un diamètre interne de 0,154 m et un volume total de 62,1 l. Il se compose de 9 déflecteurs annulaires avec un taux de blocage variable. Le taux de blocage est défini comme suit :

$$BR = [1 - (\frac{d_b}{d_p})]$$

$d_b$  : diamètre du déflecteur

$d_p$  : diamètre du tuyau

Le premier déflecteur est situé à une distance de 0,776 m et la distance entre les déflecteurs est de 0.154 m. L'épaisseur des déflecteurs est de 2 mm. Le dôme mesure 1,7 m de long et a Un diamètre interne de 0,738 m avec un volume de 658 l.

Experiment	Hydrogen concentration	Blockage Ratio	Mixture %
765	11.6-8.1	0.63	Negative gradient
736	11.4-5.8	0.63	Negative gradient
733	5.7-12	0.63	Positive gradient
160	13	0	Uniform
158	13	0.33	Uniform
153	13	0.63	Uniform

Table (5.1) : Expériences effectuées dans les installations ENACCEF

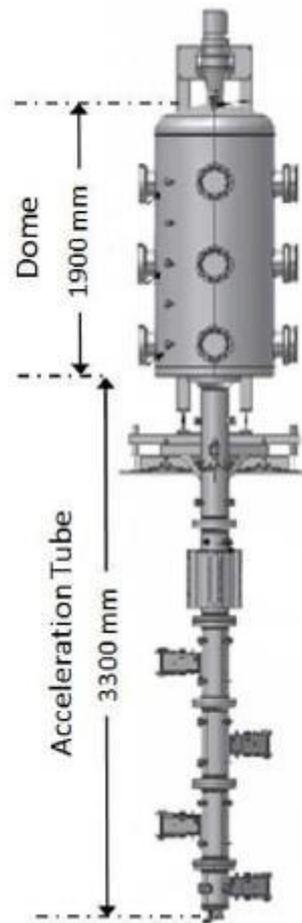


Figure (5.1) : installations ENACCEF

Plusieurs expériences de propagation hydrogène-air ont été effectuées dont six expériences ont été utilisées pour l'analyse comparative des codes. Trois tests (RUN 765, 736 et 733) avec des mélanges non-uniformes et trois tests avec des mélanges uniformes ont été utilisés pour l'analyse comparative du code CFD.

Ces expériences sont résumées dans le tableau 5.1. L'objectif des tests avec les mélanges non uniformes visait à étudier les effets des gradients de concentration d'hydrogène sur la propagation et la dynamique de la pression. L'objectif des tests avec une concentration uniforme avec des rapports de blocage différents était d'étudier le rapport de blocage sur la propagation et la pression dynamique.

Dans ce travail, nous avons utilisé l'expérience ENACCEF RUN 153 qui a une concentration uniforme d'hydrogène gazeux de 13% en volume, avec un taux de blocage BR de 0,63. Dans cette expérience, la flamme et la pression dynamique à une température initiale de 296 K

Et une pression de 100 kPa sont étudiées. Le mélange est allumé en utilisant deux tungstène minces des électrodes (2 mm de diamètre) qui sont reliées à une source haute tension (10 kV). la tension et l'intensité de la décharge sont réglables. L'énergie des étincelles livrée est estimé entre 10 et 20 mJ. Le point d'inflammation est situé à 0.138 m de en bas de l'installation.[29]

## **5.2. L'installation THAI**

Le THAI-HD (HD = Hydrogen Deagration) est une installation d'essai exploitée par Becker Technologies GmbH Eschborn, en Allemagne, sous le parrainage du ministère allemand de l'Economie et de la Technologie.

La composante principale de l'installation est un récipient cylindrique en acier inoxydable de 9,2 m de hauteur et 3,2 m de diamètre avec un volume total de 60 m<sup>3</sup>. Sa surpression maximale autorisée s'élève à 14 bar à 180 ° C.[39]

Le testes THAI HD-2R est une expérience avec propagation de flamme vers le haut, la concentration d'hydrogène est de 8%, sans vapeur, la température initial 25 C°, la pression initial est de 1,5 bar.

Les structures de l'installation THAI sont en acier inoxydable et sont complètement enveloppés par une isolation thermique à laine de roche de 120 mm. La partie cylindrique du THAI la paroi du vaisseau (ID = 3156 mm) est à double paroi, la paroi intérieure étant de 22 mm d'épaisseur. L'écart de 16,5 mm entre les murs est rempli d'huile thermique du système de chauffage / refroidissement mural. Le mur extérieur est fabriqué à partir de l'acier inoxydable 6 mm. Son extérieur est isolé par la couche de laine de roche de 120 mm. [50]

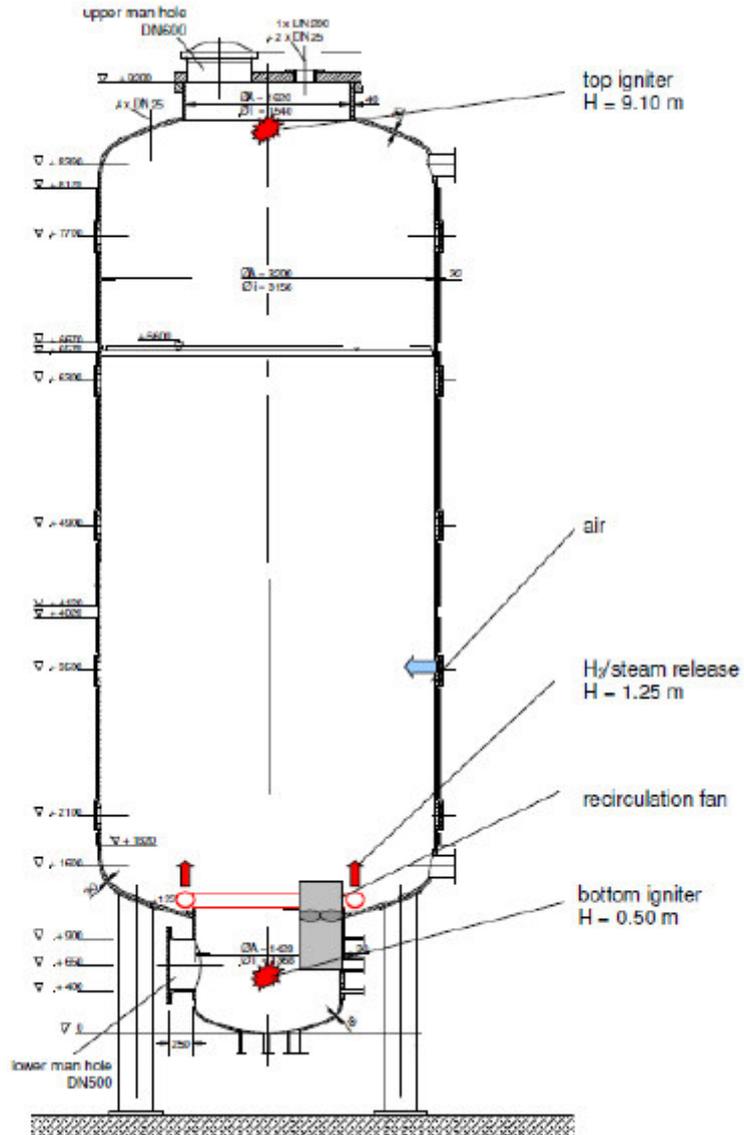


Figure (5.2) : installation THAI

# *Chapitre*

*« 6 »*

## 6.1. Les méthodes de résolution

Dans cette partie une étude de validation a été menée pour les deux expériences ENACCEF RUN-153 et THAI HD-2R

Les tableaux suivant représente les conditions initiale de chaque teste, table (6.1) et (6.2)

Température Initiale	300K
Pression Initiale	100kPa
Concentration de l'hydrogène	13%

Table (6.1) : Condition initiale pour l'expérience ENACCEF RUN-153

Température initiale	298K
Pression initiale	150KPa
Concentration de l'hydrogène	8%

Table (6.2) : Condition initiale pour l'expérience THAI HD-2R

Le software ANSYS (Dising Modeler) a été utilisé pour créer les géométries simplifié en 2D axisymétrique. Le volume de contrôle et divisé en 18000 cellules quadratique pour ENACCEF et 14000 cellules pour THAI.

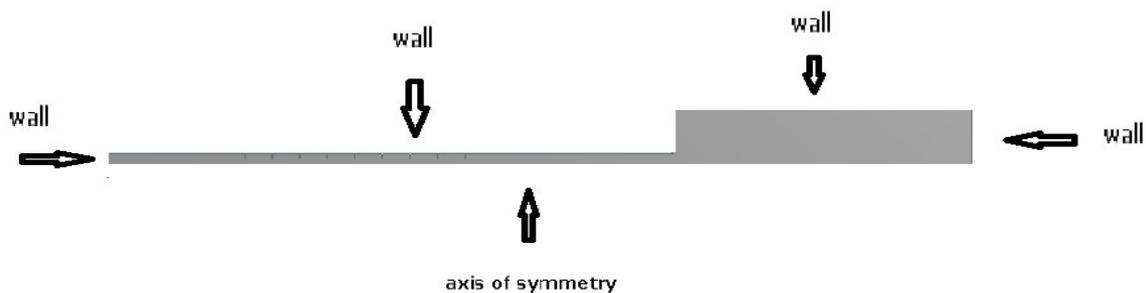


Figure (6.1) : Géométrie simplifiée de l'installation ENACCEF

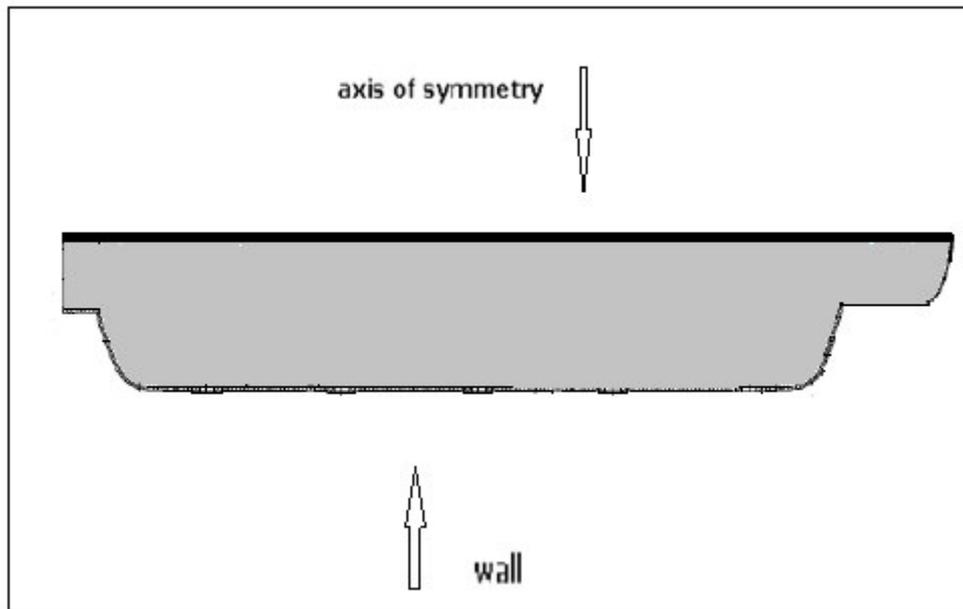


Figure (6.2) : géométrie simplifiée de l'installation THAI

### 6.1.1. Les méthodes de résolution CFD

On a utilisé le code ANSYS FLUENT pour résoudre l'équation URANS (Unsteady Reynolds Averaged Navier-Stokes). Le model  $k-\epsilon$  standard pour la modélisation de la turbulence, le model EDM (Eddy Dissipation Model) pour la modélisation de la combustion, les conditions imposées sur les parois sont adiabatique.

Pour l'allumage on a créé une zone (ignition zone) à une distance de  $x = 0.138\text{m}$  et  $x = 0.5\text{m}$  dans la région de la paroi inférieure pour la configuration ENACCEF et THAI respectivement en faisant un PATCH dans cette zone, on impose une valeur de la fraction massique de la vapeur d'eau ( $Y_{\text{H}_2\text{O}} = 0.1$ ) et une température relativement élevée dans la zone d'allumage ( $T = 1200\text{K}$ ) afin d'indiquer que la combustion a été initiée.

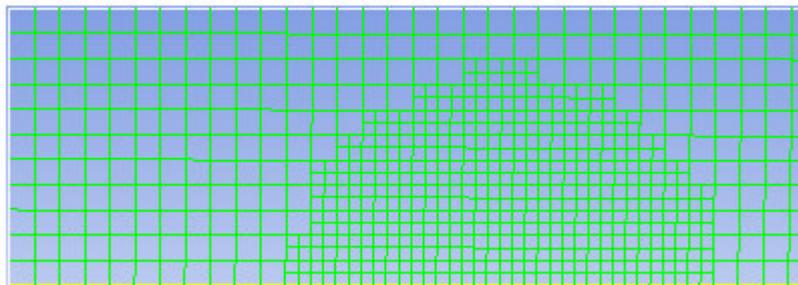


Figure (6.3) : La zone d'adaptation

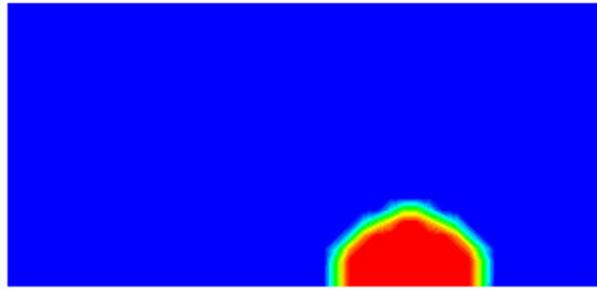


Figure (6.4) : la zone d'allumage

Pour un calcul transitoire les développeurs recommandent d'utiliser un pas de temps qui correspond à un nombre de courant (courant number) de 20 dans les zones critiques, pour assurer l'indépendance des résultats par rapport au pas du temps le nombre de courant doit être très petit.

Solver	Pressure-based
Spatial discretization	second order upwind
Temporal formulation	second order implicit
Model de combustion	Species transport
Model de turbulence	Finite rate/ eddy dissipation
Mixture Material	Hydrogen-air
Density	Ideal gas
Thermal conductivity	Mass-weighted-mixing-law

Table (6.3) : Caractéristiques du modèle CFD

## 6.2. RESULTAT DE LA SEMULATION

### 6.2.1. Résultats de la simulation de l'expérience THAI HD-2R

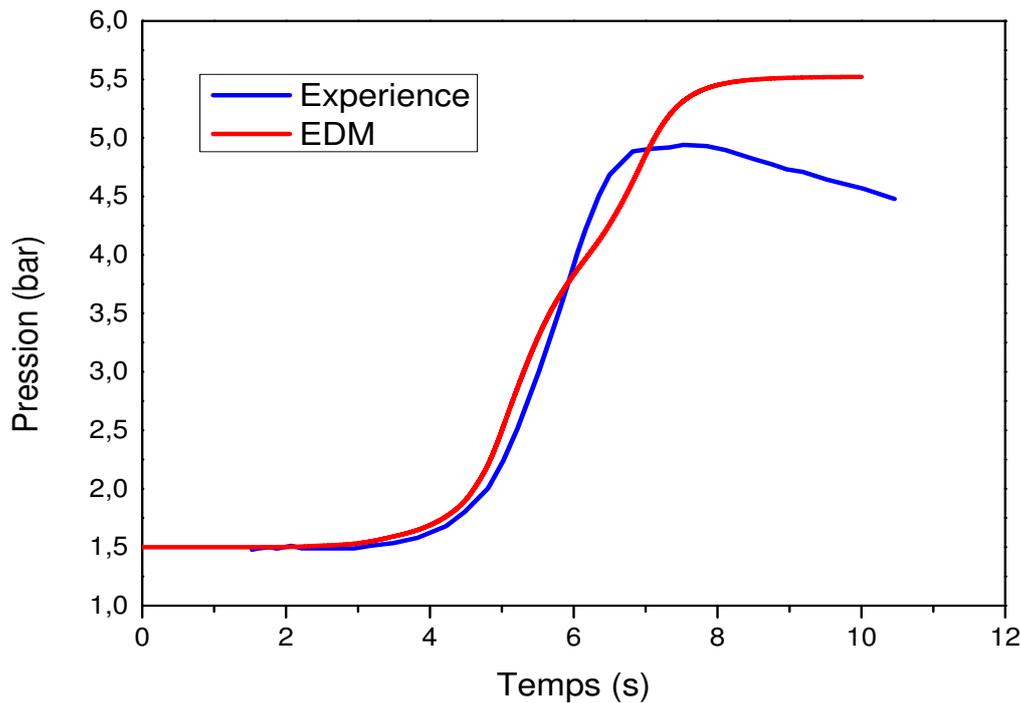


Figure (6.5) : courbes de pression absolue obtenues par l'expérience THAI HD-2R et le test de simulation par le modèle EDM

(Kanzeleiter et langer, Quicktook report hydrogen deflagration tests HD-2R, report 150-1326 QLR I, avril 2008)

La figure (6.5) représente une comparaison entre les courbes de pression absolue de l'expérience de l'installation THAI et le test de simulation par le code CFD en utilisant le modèle EDM. L'accord de profil obtenu par « FLUENT » est remarquable par rapport à celui de l'expérience et il prend la même allure jusqu'à la fin de combustion à environ  $t=5s$ , la pression commence à baisser dans l'expérience par contre elle se stabilise pour l'EDM.

Dans le modèle EDM on considère notre système parfaitement adiabatique et on a pris le mélange gazeux comme un gaz idéal ce qui n'est pas vrai dans l'expérience réelle.

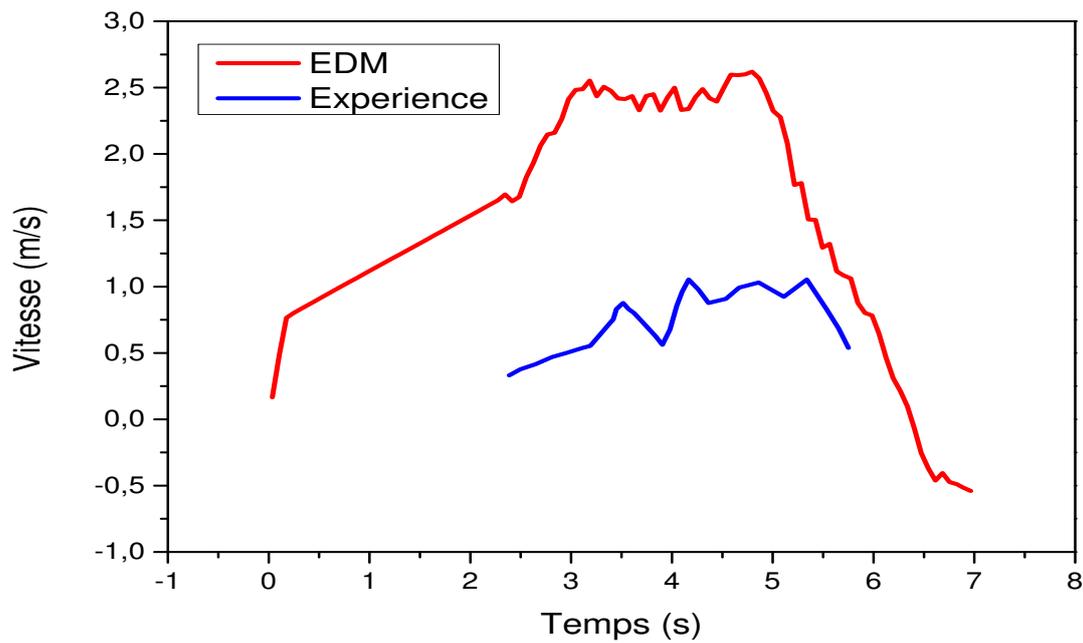


Figure (6.6) : les courbes de vitesse de l'expérience de l'installation THAI et le test de simulation avec le model EDM.

La figure (6.6) illustre les deux graphes obtenus par expérience de l'installation THAI et par le test de simulation, on aperçoit que pour l'expérience la flamme commence sa propagation à environ  $t=2s$ , par contre pour EDM ça commence à  $t=0s$  car le model EDM prend en valeur la turbulence.

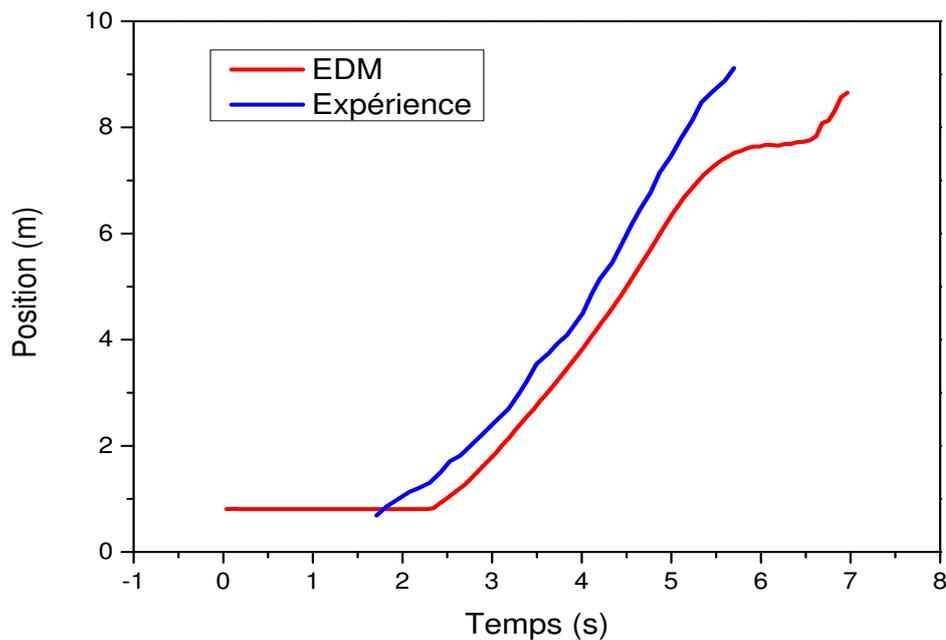


Figure (6.7) : les courbes de position de flamme de l'expérience l'installation THAI et le test de simulation avec EDM.

Figure (6.7) montre la position de flamme (m) sur l'axe de symétrie au cours de la combustion en fonction de temps (s), la flamme présente une propagation linéaire. La simulation capture la première phase sauf vers la fin de combustion où le modèle marque une divergence par rapport à l'expérience

Le retard observé dans la simulation est principalement causé par l'absence ou l'insuffisant de l'intensité turbulente, car le modèle EDM contrôle le taux de réaction de combustion par la turbulence.

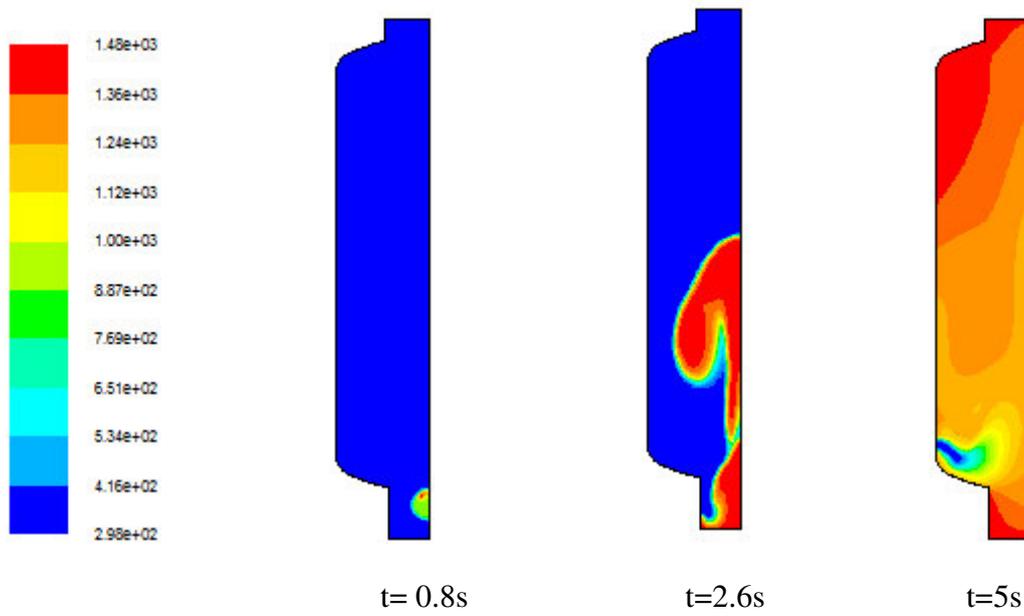


Figure (6.8) : contour de température (THAI HD-2R)

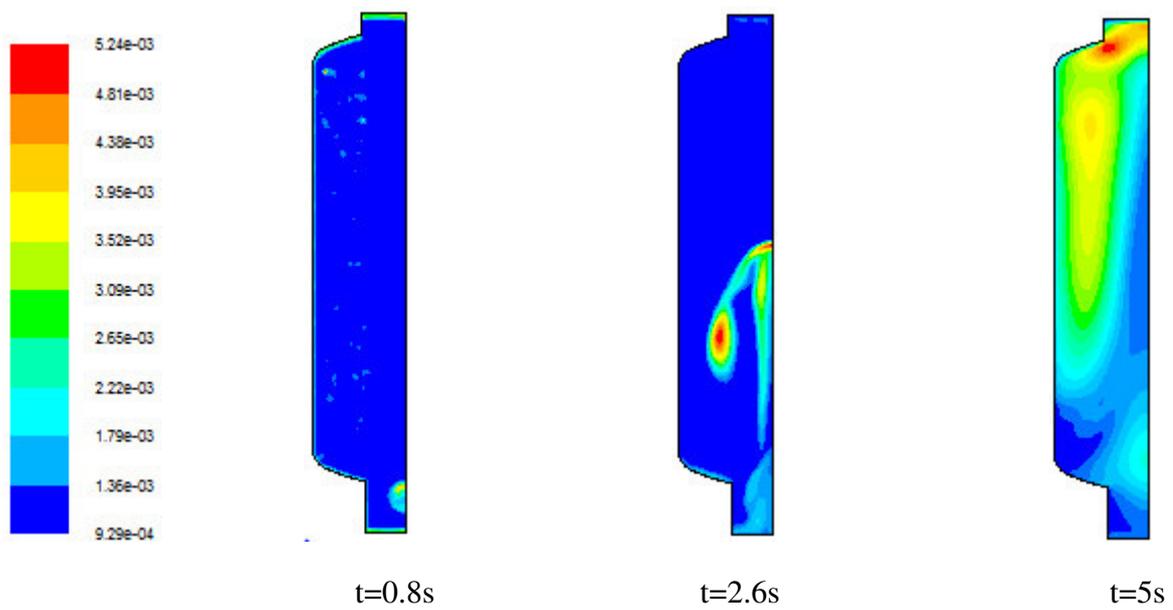


Figure (6.9) : contour de l'énergie cinétique de turbulence (k) (THAI HD-2R)

Les figures (6.8) (6.9) et (6.10) donnent un aperçu sur le comportement des paramètres physique.

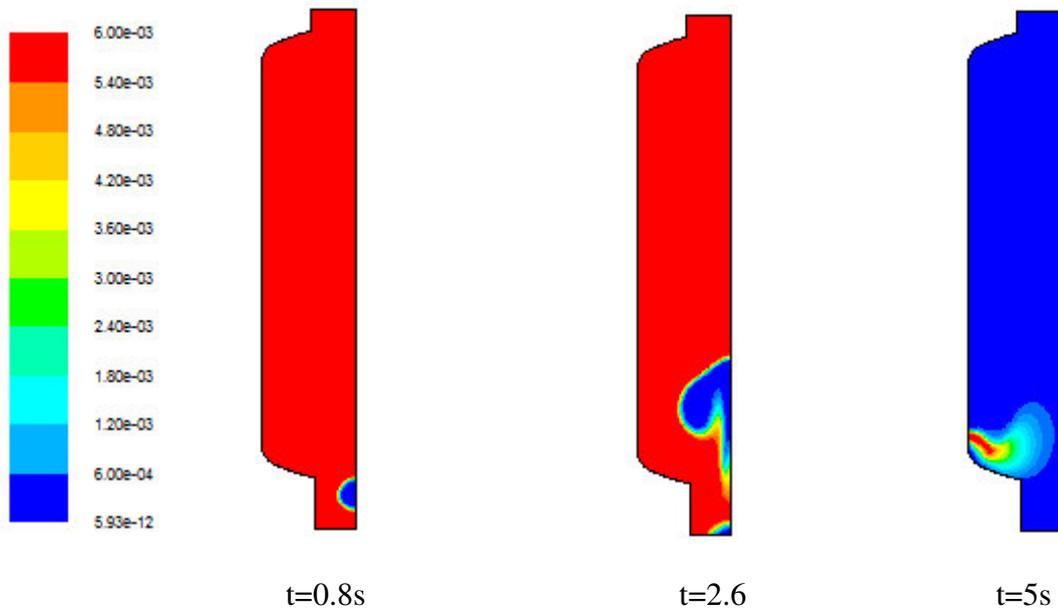


Figure (6.10) : contour de fraction massique d'hydrogène ( $H_2$ ) (THAI HD-2R)

### 6.2.2. Résultats de simulation de l'expérience ENACEEF

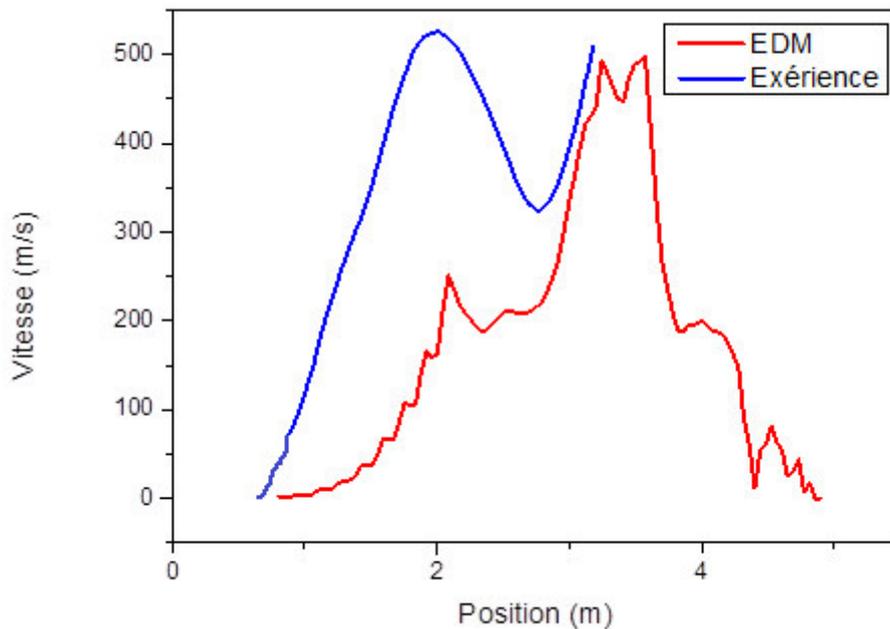


Figure (6.11) : les courbes de vitesse de flamme de l'expérience ENACEEF RUN 153 et le test de simulation.

La Figure (6.11) présente les deux courbes de vitesse de flamme en fonction de sa position obtenues par l'expérience ENACEEF et le test de simulation avec le modèle EDM. Les deux

courbes sont semblables avec des pics de vitesse. Il est difficile de positionner la flamme expérimentalement, c'est ce qui fait la différence.

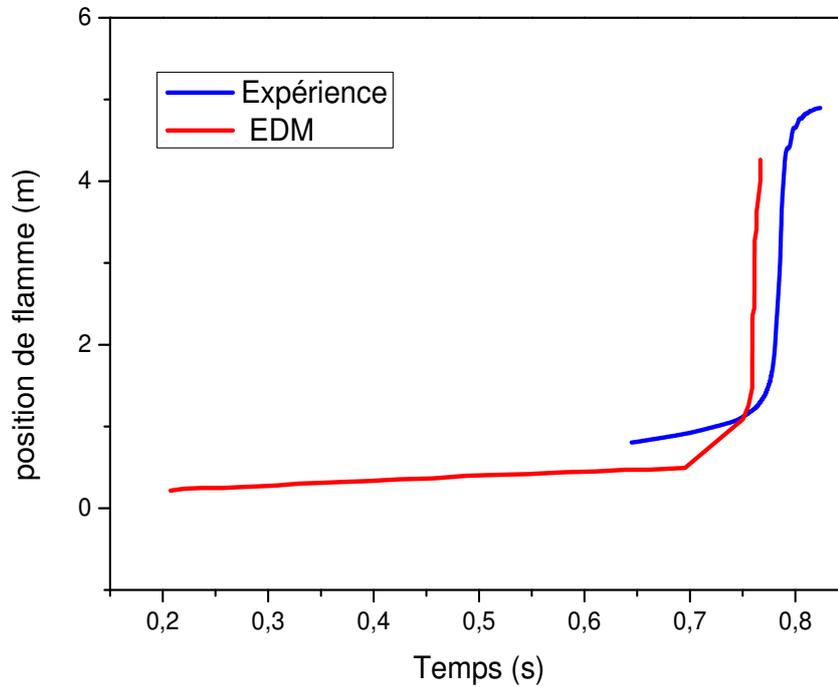


Figure (6.12) : les courbes de position de flamme de l'expérience ENACEEF RUN 153 et le test de simulation.

La figure (6.12) montre la position de flamme au cours de la combustion en fonction de temps (s), les deux courbes prennent la même allure croissante jusqu'à la fin de combustion.

On remarque que les courbes sont presque identiques, cela confirme que le modèle EDM prend en considération la turbulence.

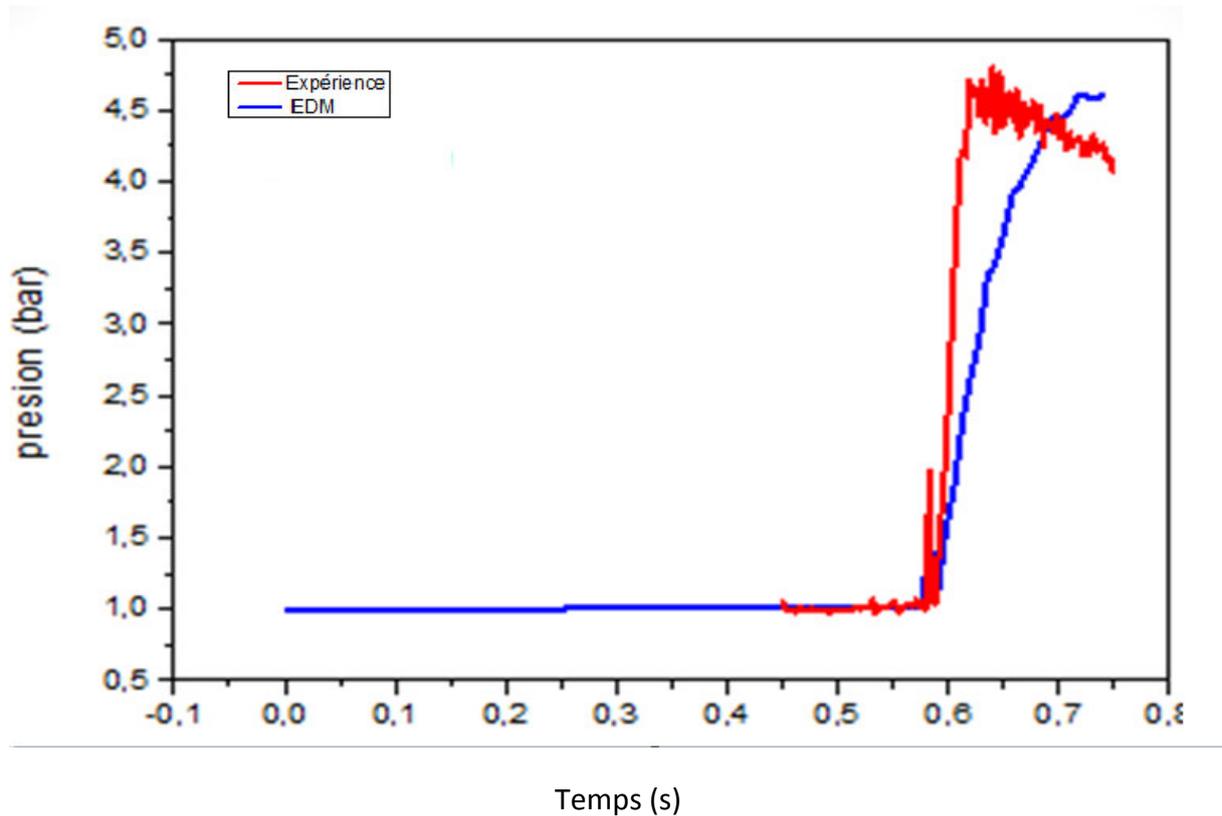


Figure (6.13) : les courbes de pression de l'expérience ENACEEF RUN 153 et le test de simulation.

La figure (6.13) représente la pression d'un point durant la combustion en fonction du temps. La courbe expérimentale montre un premier pic correspondant à la position de flamme entre le dernier obstacle et l'entrée du dôme. L'augmentation constante de la pression commence lorsque la flamme atteint la zone du dôme où existe la plus grande quantité de mélange combustible.

La simulation prédit bien l'évolution de la pression pendant la combustion, avec quelques différences dans la valeur de pression maximale ainsi que la diminution de la pression après la combustion. Ce dernier peut être attribué aux pertes de chaleur ainsi que des effets de rayonnement qui ne sont pas considérés dans cette étude.

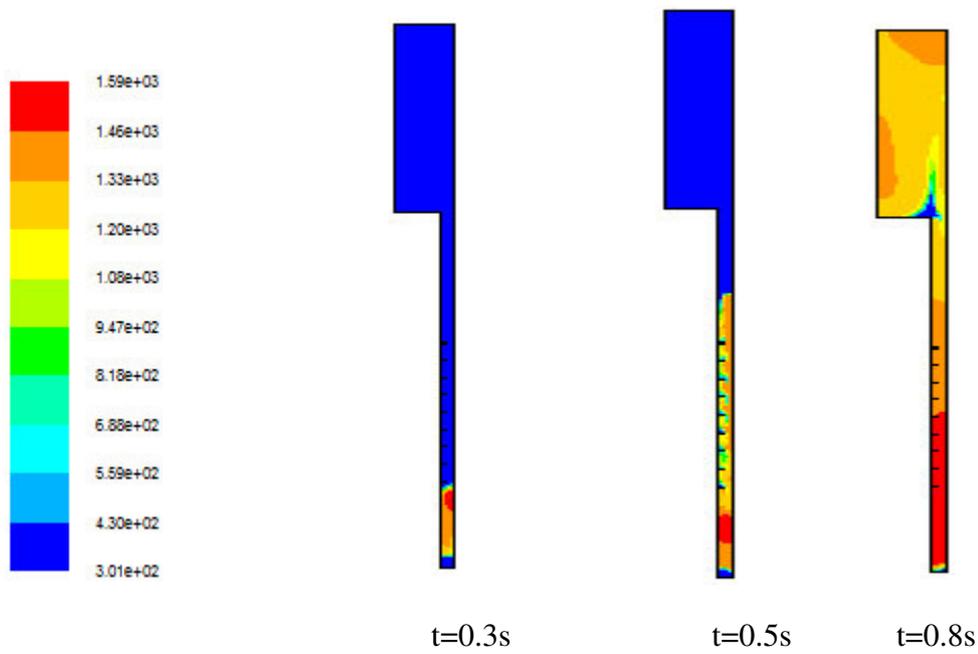


Figure (6.14) : contour de température (ENACEEF RUN 153)

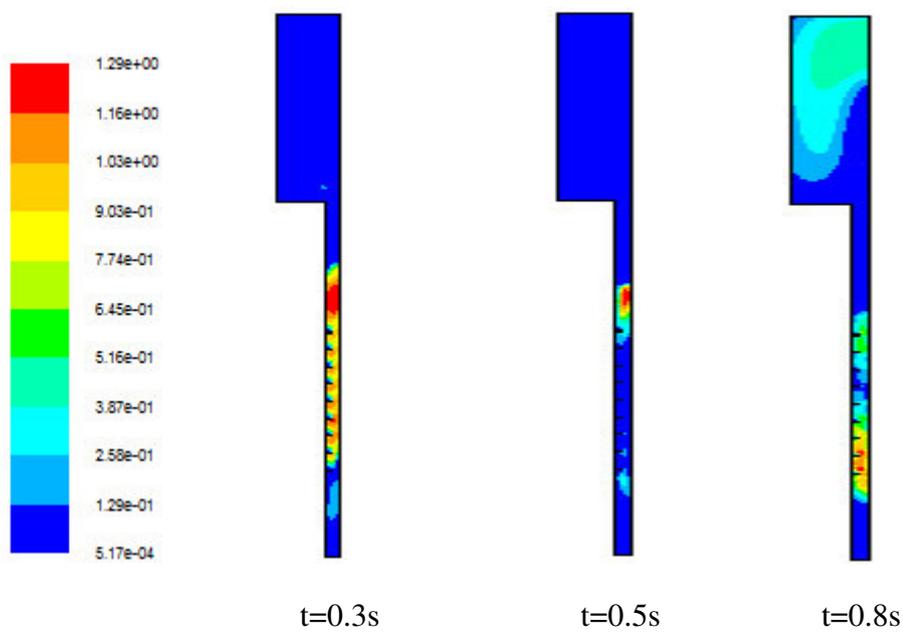


Figure (6.15) : contour de l'énergie cinétique de turbulence (ENACEEF RUN 153)

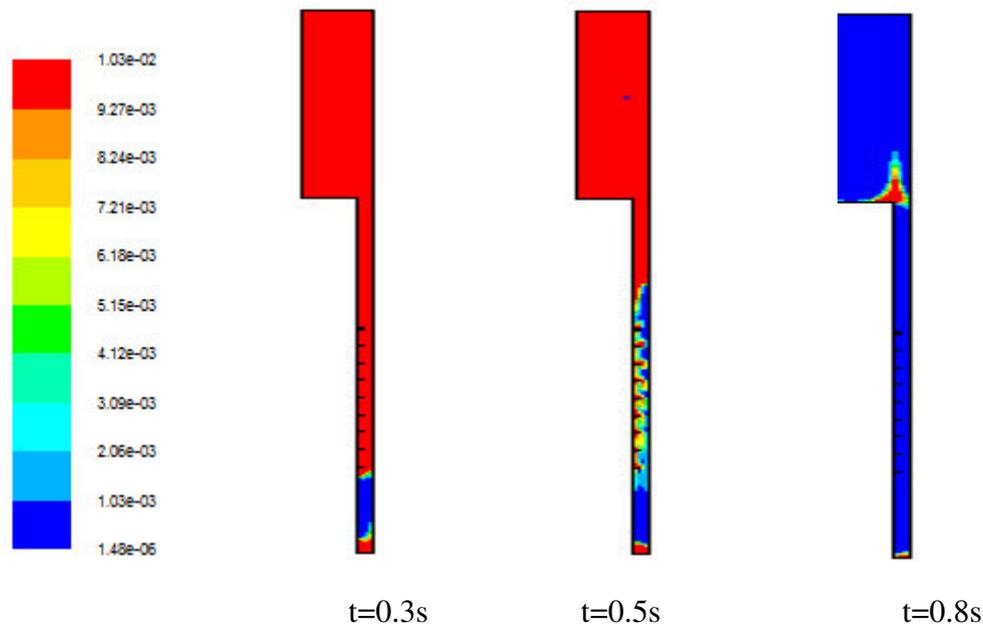


Figure (6.16) : contour de fraction massique d'hydrogène (ENACEEF RUN 153)

Les figures ci-dessus donnent un aperçu sur le comportement des paramètres physiques.

### 6.3. Conclusion

Dans ce travail, on s'est concentrés sur la propagation de flamme d'un mélange gazeux hydrogène-air uniformes dans deux régimes qui sont la déflagration lente et rapide. Le modèles de combustion considérés est l'EDM (Eddy dissipation model), pour la validation de ce modèle deux expériences ont été choisies.

La première expérience, l'ENACCEF RUN-153 a été choisie pour effectuer la validation de test de simulation numérique des flammes à déflagration rapide. Cette installation présente des obstacles sous la forme des baies qui génèrent une forte turbulence (la vitesse est élevée dans cette expérience).

A partir de la validation des résultats présentées dans ce chapitre on peut dire que le modèle EDM prédit assez bien la turbulence.

La deuxième expérience, l'expérience THAI HD-12, a été réalisée pour la validation de test de simulation de flammes à déflagration lente. Il s'agit d'une géométrie de type de navire relativement simple sans obstacles et la vitesse de flamme est faible.

Le modèle EDM présente certaines limites dans la phase laminaire il donne des résultats plus précis et plus proche dans la phase turbulente.

Le modèle EDM a donné des résultats assez bon, mais pour un cas où on n'a pas de turbulence il est préférable d'utiliser d'autres modèles.

## Conclusion

---

L'accident de Three Mile Island (TMI-2, 1979) a attiré l'attention de la communauté de la sécurité nucléaire sur la menace de contention posée par les grandes quantités d'hydrogène rejetées dans le bâtiment de confinement pendant et après un accident grave.

Plusieurs programmes de recherche pour étudier le comportement et le contrôle de l'hydrogène lors d'accidents ont également été initiés au début des années quatre-vingt. Les deux principales options d'atténuation étaient la dilution de l'atmosphère de confinement avec un gaz inerte pour empêcher la combustion et l'allumage volontaire d'hydrogène à de faibles concentrations pour limiter les conséquences des phénomènes de combustion.

. Les deux principales options d'atténuation étaient la dilution de l'atmosphère de confinement avec un gaz inerte pour empêcher la combustion et l'allumage volontaire d'hydrogène à de faibles concentrations pour limiter les conséquences des phénomènes de combustion.).

Dans les années quatre-vingt-dix, une nouvelle stratégie d'atténuation fondée sur l'oxydation catalytique de l'hydrogène utilisant l'oxygène de l'atmosphère de confinement et un métal noble en tant que catalyseur a émergé: le recombinaut catalytique passif (PAR). Ce moyen de contrôler le risque d'hydrogène dans les centrales nucléaires est très efficace en raison de sa caractéristique passive, son vaste domaine de bonne efficacité (accident de conception-base et accident de conception), sa robustesse vers Les conditions accidentelles et les dangers internes, un coût réduit par rapport à d'autres stratégies d'atténuation une maintenance bien définie.

Dans un accident grave, les opérateurs de l'installation pourraient désactiver les recombinaut thermiques afin de les empêcher de fonctionner dans des concentrations élevées d'hydrogène. Cependant, pour utiliser de manière sûre les recombinaut thermiques, les opérateurs devraient avoir une instrumentation fournissant des informations opportunes sur les concentrations locales d'hydrogène Tout au long du confinement. Cependant, le problème des PAR entraînant des allumages dans des concentrations élevées d'hydrogène reste non résolu.

Une autre méthode a été proposée dans le but d'éviter la présence d'importante concentration d'hydrogène. L'énergie d'activation pour la recombinaison de l'hydrogène et de l'oxygène peut être considérablement réduite par l'utilisation de substances catalytiques, de sorte que la réaction peut commencer automatiquement à basse température sans propagation de la réaction à l'atmosphère environnante. Le mécanisme d'un catalyseur (platine, palladium)

## Conclusion

---

consiste à diminuer la délimitation des molécules d'hydrogène et à former des radicaux qui réagiront plus facilement avec les radicaux oxygène. Les recombinaisons catalytiques favorisent la réaction  $H_2 + 1/2 O_2 \rightarrow H_2O$  en abaissant le seuil d'énergie d'activation afin que la réaction chimique ait lieu à basse température et concentration.

L'oxydation catalytique de l'hydrogène sur les métaux suit le mécanisme de Langmuir-Hinshelwood. Les deux étapes principales sont: (1) la diffusion des réactifs sur le catalyseur, et (2) la réaction des réactifs absorbés sur le catalyseur.

Un recombinaison catalytique est décrit comme «passif» car un tel dispositif est auto-démarrant et auto-alimenté, et ne nécessite aucune énergie externe. Un recombinaison autocatalytique passif entre en action spontanément dès que les concentrations d'hydrogène commencent à augmenter dans l'atmosphère de construction du réacteur. En pratique, le recombinaison catalytique démarre avec une concentration en hydrogène égale à 1-2%.

**Références**

- [1] A. Bentaib, IRSN research and development on hydrogen risk during severe pressurized water reactor accidents. Technical report,2002.
- [2] F.Malet, Flame acceleration of hydrogen - air - diluent mixtures at middle scale using ENACCEF: experiments and modeling,2005.
- [3] A. Bentaib et al, « hydrogen combustion with concentration gradient in experiment and simulation preliminary of ENACCEF benchmark » 2007.
- [4] V.V. Molkov et al. Hydrogen-air deflagrations in open atmosphere,2007.
- [5] P.Sathiah et al, (The role of CFD combustion modeling in hydrogen safety management), 2012.
- [6] P. Sathiah, The role of CFD combustion modeling in hydrogen safety management—II Validation based on homogeneous hydrogen–air experiments, 2012.
- [7] P. Sathiah, The role of CFD combustion modeling in hydrogen safety management – III Validation based on homogeneous hydrogen–air–diluent experiments, 2015
- [8] P. Sathiah, The role of CFD combustion modeling in hydrogen safety management–V validation for slow deflagrations in homogeneous hydrogen-air experiments, 2016.
- [9] P. Sathiah, The role of CFD combustion modeling in hydrogen safety management–IV Validation based on non-homogeneous hydrogen–air experiments, 2016.
- [10] Y. Halouane et A. Dehbi (Comparaison des prévisions d'accélération de la flamme d'hydrogène à l'aide de la dissipation de Foucault et des modèles turbulents de fermeture de flamme), 2016.
- [11] M. Sahli. Etude de la production d'hydrogène par électrolyse et pile a combustion. Thèse de MAGISTER : Université Mentouri de Constantine, 2010
- [12] O.Ulleberg. Modeling of advancedalkalineelectrolyzers : system simulation approach, international journal of hydrogen, 2003.
- [13] M.Viseur. Etude de faisabilité de l'utilisation de l'hydrogène comme vecteur alternative d'énergie. These MASTER : Université Libre de Bruxelles, 2008.
- [14] G.Gondor. Pour le stockage de l'hydrogène : analyse thermodynamique de la formation

- d'hydrures métalliques et optimisation du remplissage d'un réservoir. Thèse  
DOCTORAT : Université Franche-Comté, 2008
- [15] D.Mori.et K.Hirose.Recent challenges of hydrogenstorage technologies for fuel cell  
vehicules. In proceedings world hydrogen technologies convention, 2007.
- [16] G.Sandrock. A panoramic overview of hydrogen storage alloys from a gas reaction point  
Of view, 1999.
- [17] <http://connaissancedesenergies.org/> hydrogène est plus dangereux que les combustible  
ofview, 1999.
- [18] V.Fichet.Modélisation de la combustion du gaz naturelle par réseaux de réacteur avec  
Cinétique chimie détaillée .Modélisation et simulation. Thèse de Doctorat :Ecole  
Centrale Paris,2008
- [19] P.Smith Stevens, les formes dans la nature ,1976 .
- [20] G.Batchelor, introduction to fluide dynamic.2000.
- [21] A.Lipatnikov, Fundamentals of premixed turbulence combustion, 2013.
- [22] A.ThallamThatai. A validation study for turbulence premixed flame propagation in  
Vassels.Thèse de Master, Delft University of Technology, 2010.
- [23] R. Borghi. Turbulent combustion modelling. Progress in Energy and Combustion  
Science,1988.
- [24] J.Savre. Simulation numérique instationnaire de la combustion turbulente au sein des  
Foyers aéronotiques et prédiction des émission polluants, Université INSA de Rouen,  
2010.
- [25] N. Peters et F.A. Williams. The asymptotic structure of stoichiometric methane-air  
Flames.Combustion and flame,1987.
- [26] F.A. Williams. Combustion theory. 2éme édition,1994.
- [27] M. Rullaud, Modélisation de la combustion turbulente via une méthode de tabulation de  
La cinétique détaillée couplée a des fonctions densités de probabilité et application aux

- Foyers aéronautique. These PhD, INASA de Rouen,2004.
- [28] L. Andry, Etude expérimentale des modes de combustion essence sous forme pression et forte dilution, thèse Doctorat, université d'Orléans,2009.
- [29] K. Coudoro, Etude expérimental et modélisation de la propagation de flamme en milieu Confiné et semi-confiné
- [30] Van TIGGELEN, A.Oxydations et CombustionsL'institut Français du pétrole,1968
- [31] H. Le chatelier et E. Mallard, Sur la vitesse de propagation de l'inflammation dans les mélanges gazeux explosifs,1881
- [32] F.Malet, Etude expérimental et numérique de la propagation de flammes prémélangées turbulentes dans une atmosphère pauvre en hydrogène et humide, thèse Doctorat Universitéd'Orleans, 2005.
- [33] Z.M. Shapiro. T.R.Mofette, Hydrogene flammability data and application to PWR LOCA 1958
- [34] S.R. Tieszen. M.P.Sherman. W.B.Benedick. J.E.Sheperd. R. Knystautas. J.H.S. Lee. Astronaut, Aeronaut, 1986
- [35] D.W.Stamps, Déflagrationcelles widths in hydrogen-air-diluent mixturs, Western State Section of the combustion institute, San Diego California, 1990
- [36] <https://www.researchgate.net/publication/260248670>
- [37] ANSYS Fluent Theory Guide.
- [39] J. Varun. Slow and Fast Hydrogen Deflagration ,Faculty of Aerospace Engineering, 2013.
- [40] A. Mameri. Etude numérique de la combustion turbulente du prémélange pauvre méthane/air enrichi a l'hydrogène. Autre. Université d'Orléans, 2009.
- [41] [https://www.cfd-online.com/Wiki/K-omega\\_models](https://www.cfd-online.com/Wiki/K-omega_models).
- [42] <https://www.researchgate.net/publication/260248670>.

- [43] Vincent Robin. Contribution à la modélisation des écoulements turbulents réactifs Partiellement premélangés. Energie électrique. Université de Poitiers; ENSMA, 2007.
- [44] M. Thomson. Theoretical Aeronodynamics, 1973
- [45] [https://fr.wikipedia.org/wiki/M%C3%A9canique\\_des\\_fluides\\_num%C3%A9rique](https://fr.wikipedia.org/wiki/M%C3%A9canique_des_fluides_num%C3%A9rique)
- [46] R.Eymard, T. Gallouët et R. Herbin, The finite volume method , 2000
- [47] Jiônyi. Du, Combustion CFD Simulation, thèse de Ph D, Faculté des études supérieures de l'université Laval Québec, 2000
- [48] <https://fr.wikipedia.org/wiki/ANSYS>
- [49] Y. Halouane, A. Dahbi, Comparition of hydrogen flame acceleration prediction using the Eddy dissipation and the turbulent flame closure , article scientifique, Institut Paul des Recherche
- [50] ISP -49 On hydrogen combustion, Nuclear Energy Agency, 2012
- [51] F. ARNOULD, E. BACHELLERIE, M. AUGLAIRE, B.DE BOECK, O. BRAILLARD, STATE OF THE ART ON HYDROGEN PASSIVE AUTOCATALYTIC RECOMBINER