

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE
SCIENTIFIQUE
UNIVERSITE M'HAMED BOUGARA BOUMERDES



Faculté de TECHNOLOGIE
Département Génie Mécanique

Mémoire de Master

En vue de l'obtention du diplôme de **MASTER** en :

Filière : Génie mécanique
Spécialité : Energétiques

THEME

Simulation numérique d'un Recombineur
Auto-catalytique Passif (PAR)

Réalisé par :

KIBACHI Sara

NEKKAA Chourouk

Suivi par :

Dr. HALOUANE Yacine

Promotion 2019- 2020

Résumé

Dans les centrales nucléaires, l'un des problèmes rencontrés durant les accidents grave, la production de grande quantité de gaz d'hydrogène en raison de l'oxydation du zirconium avec la vapeur d'eau. Un mélange gazeux explosif sera accumulé à l'intérieur du bâtiment de réacteur nucléaire (Hydrogène/air).

Généralement, dans les centrales nucléaires utilise le Recombineur Autocatalytique Passif (PAR) pour éliminer le gaz d'hydrogène et bien sûr son risque d'explosion. Le PAR est constitués d'un canal verticale équipé des plaques de catalyseur qui induisent passivement la recombinaison d'hydrogène et de l'oxygène en produisant la vapeur et la chaleur.

Dans cette étude, on va présenter une simulation numérique pour modéliser l'écoulement et la recombinaison chimique dans une unité de PAR, par l'utilisation de la méthode des volumes finis. Une configuration bidimensionnelle a été utilisé pour simuler le comportement d'un écoulement réactive a traves une unité de PAR.

La modélisation donne une prédiction acceptable pour les faibles concentrations de l'hydrogène dans le mélange $<4\%$, par contre pour les grandes concentrations $\geq 4\%$ les modèles proposé, sont nécessite une amélioration.

Summary

In nuclear power plants, one of the problems encountered during severe accidents, large amounts of hydrogen gas could be produce due to the oxidation of zirconium with steam. An explosive gas mixture will accumulate inside the nuclear reactor building (Hydrogen / air).

Generally, nuclear power plants use the Passive Autocatalytic Recombiner (PAR) to remove hydrogen gas and of course its risk of explosion. The PAR consists of a vertical channel fitted with the catalyst plates that passively induce the recombination of hydrogen and oxygen to produce steam and heat.

In this study, we will present a numerical simulation to model the flow and chemical recombination through a PAR unit. A two-dimensional configuration was used to simulate the behavior of a PAR, using the finite volume method.

The modeling gives an acceptable prediction for low concentrations of hydrogen in the mixture $<4\%$, on the other hand for large concentrations $\geq 4\%$ the models proposed are needs improvement.

ملخص

في محطات الطاقة النووية، من المشاكل التي نواجهها اثناء الحوادث الشديدة، انتاج كميات كبيرة من غاز الهيدروجين نتيجة اكسدة الزركونيوم مع بخار الماء. يتراكم خليط الغازات المتفجرة داخل مبنى المفاعل النووي (الهيدروجين/ الهواء).

عادة ما يستخدم في محطات الطاقة النووية المعيد التحفيزي السلبي (PAR) لإزالة غاز الهيدروجين وبالطبع خطر الانفجار ، يتكون من قناة عمودية مزودة بالواح محفزة تؤدي بشكل سلبي الى إعادة اتحاد الهيدروجين والاكسجين لإنتاج البخار والحرارة.

في هذه الدراسة، سوف نقدم محاكات عددية لنموذج التدفق وإعادة التركيب الكيميائي في وحدة (PAR) باستخدام طريقة الحجم المحدد وتم استخدام تكوين ثنائي الابعاد لمحاكاة سلوك PAR .

تعطي النمذجة تنبؤاً مقبولاً لتركيزات منخفضة من الهيدروجين في الخليط $>4\%$ ، و من ناحية أخرى لتركيزات كبيرة $\leq 4\%$ ، النماذج المقترحة تحتاج إلى التحسين.

Remerciements

Tout d'abord, nous remercions Allah, notre créateur de nous avoir donné les forces, la volonté et le courage afin d'accomplir ce modeste travail.

Nous tenons à remercier notre encadreur « Dr. HALOUANE Yacine » qui a proposé le thème de ce mémoire, pour sa gentillesse, son soutien, et ses conseils judicieux et son grand bien vaillance durant l'élaboration du début à la fin de ce travail.

Finalement, nous tenons à exprimer notre profonde gratitude à nos familles qui nous ont toujours soutenues et à tous ces ceux qui ont participé à la réalisation de ce travail.

Dédicace



Je tiens tout d'abord à remercier ALLAH de m'avoir aidé à réaliser ce
mémoire que je dédie :

Principalement à mon père ALLAH YARHMO qui a été toujours mon
soutien dans ma carrière d'études

A ma mère bien sûr qui m'a toujours soutenu et encouragé que dieu la
protège

A ma sœur AMINA qui est chère à mon cœur.

A mes chers frères : ABDELLAH et BRAHIM qui m'en ont donné la force et
m'en ont encouragé

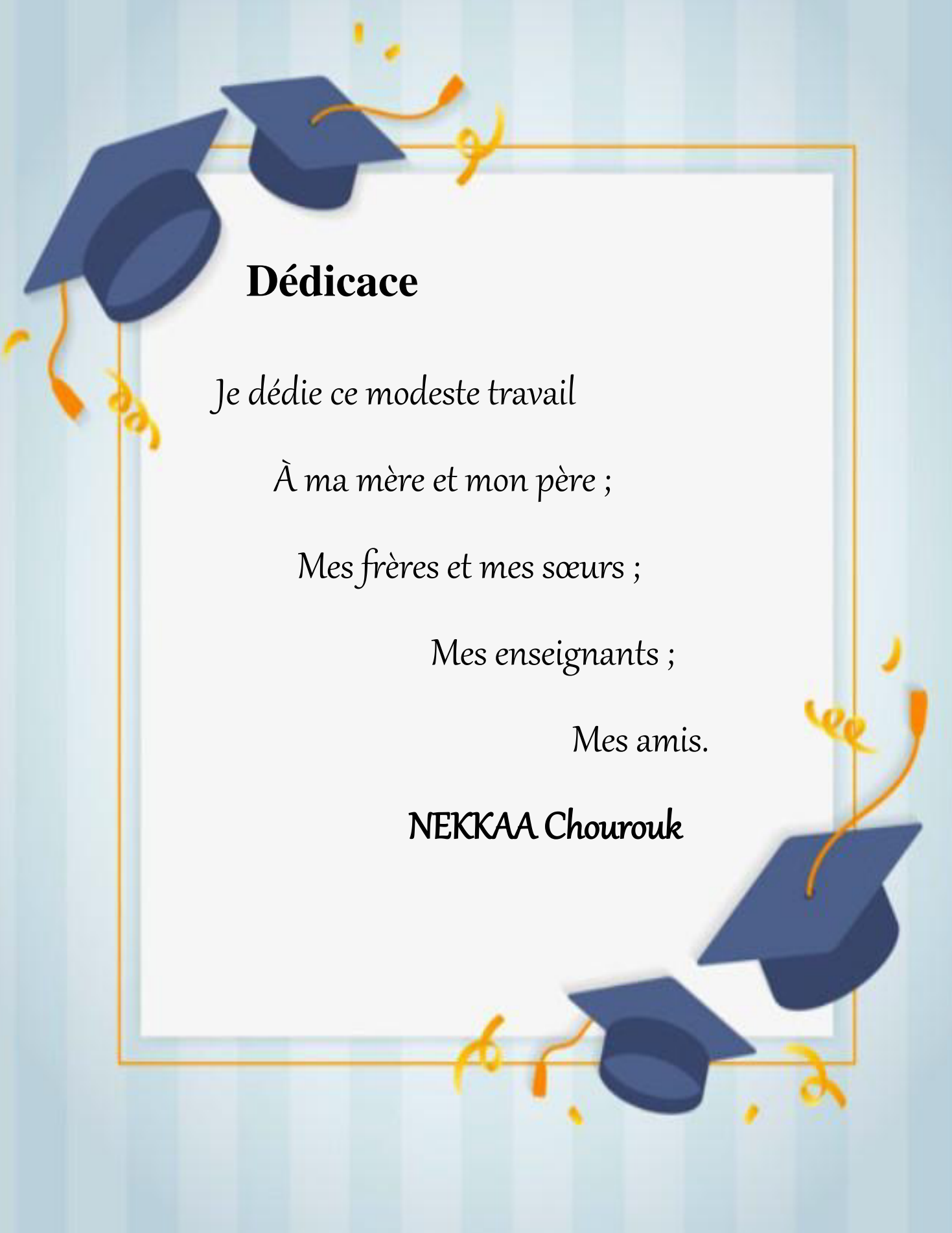
A mes cousines RAHMA et ZOLA.

A ma grand mère.

A mes oncles, tantes ... et toute la famille.

A ma très cher amis KHADIDJA et à tous mes collègues de la promotion
2019/2020.

Et tous ceux qui aiment SARA.



Dédicace

Je dédie ce modeste travail

À ma mère et mon père ;

Mes frères et mes sœurs ;

Mes enseignants ;

Mes amis.

NEKKA Chourouk

Sommaire

Liste des figures.

Liste des tableaux.

Liste des abréviations.

Introduction générale.....1

Chapitre 01 : recombineurs auto catalytiques passifs (PAR)

1.1.Rapport générale.....4

1.2.Fonctionnement du recombineur auto-catalytique passif.....6

1.3. Processus de recombinaison du recombineur autocatalytique passif.....7

1.4. L'équipement des enceinte.8

1.5. Présentation des modèles commerciaux des PAR9

1.5.1. Énergie atomique Canada limitée(AECL)9

1.5.2. Electro Watt Engineering Ltd10

1.5.3. Société NIS..11

1.5.4. Siemens KWU.....12

1.5.5. AREVA PAR.....12

1.5.5.1. Applications d'atténuation de l'hydrogène avec AREVA PAR.....13

1.5.5.2. Dimensionnement.....14

1.6. Autre système d'atténuation de l'hydrogène14

1.6. 1. Principaux systèmes d'atténuation de l'hydrogène et leurs limites intrinsèques.....15

1.7. Les moyens pour limiter le risque d'hydrogène16

1.8. Pour quoi le recombineur catalytique peut être considéré comme la technique d'atténuation de l'hydrogène la plus approprié ?.....18

1.9. Etude bibliographique.....19

Chapitre 02 : modélisation mathématique et procédure numérique

2.1. Equation de gouvernantes.....20

2.1.1. Conservation de masse (continuité)20

2.1.2. Conservation de quantité de mouvement.....21

2.1.3. Conservation de l'énergie.....	22
2.1.4. Conservation des espèces.....	22
2.2. Modèle de turbulence.....	23
2.2.1. Le modèle k- ϵ standard.....	23
2.3. Modèle de recombinaison	24
2.3.1. Cinétique derecombinaison.....	24
✓ Equation de Scheffer.....	24
2.4. Présentation de la CFD.....	25
2.4.1. La dynamique des fluides numérique CFD.....	25
2.5. La méthode des volumes finis.....	25
2.5.1. Caractéristiques de méthode des volumes finis	26
2.5.2. Différentes étapes de la résolution d'un problème avec la méthode des volumes fini.	26
2.5.3. Discrétisation volumes finis	27
2.6. Le software FLUENTE.....	28

Chapitre 03 : présentation de la simulation numérique

3.1. Installation REKO-3.....	29
3.2. La géomètre et maillage	30
3.2.1. Configuration et condition aux limites.....	31
3.2.2. L'Independence de maillage.....	32
3.2.3. Résultats de sensibilité de maillage.....	34
3.2.4 Conclusion.....	38
3.2.5. Validation des calculs avec l'expérimentale.....	39
3.3. Résultats et discussions	43
3.4.Presentation des contours	56
3.5.Conclusion.....	59
Conclusion générale.....	60
Bibliographie	

Liste des figures

Figure 1.1 : Schéma de recombinaison	1
Figure 1.2 : processus de recombinaison du recombineur auto catalytique passif	2
Figure 1.3 : le recombineur EACL.....	3
Figure 1.4 : le recombineur catalytique NIS.....	4
Figure 1.5: schéma du recombineur SIEMENS FR90/1-150 sur H2-PAR.....	5
Figure 1.6 : Recombineur d'hydrogène AREVA.....	7
Figure 2.1 : Discrétisation en volumes finis du domaine d'étude dans le cas bidimensionnel.....	8
Figure 3.1 : banc d'essais REKO-3.....	9
Figure 3.2 : Schéma de PAR.....	10
Figure 3.3 : la géométrie de PAR	11
Figure 3.4 : Configuration 2D et les différentes tailles de maillage utilisé.....	12
Figure 3.5 : Différents position test (verticale sur la deuxième plaque et horizontale (Y1, Y2 et Y3)).....	13
Figure 3.6 : Comparaison du profil de température à longueur de la plaque catalytique pour différentes tailles de maillage numérique ($T_{in} = 298\text{ k}$, $V = 0.8\text{ m/s}$ et $[H_2] = 2\%$).....	14
Figure 3.7 : Comparaison du profil de vitesse le long de la plaque catalytique pour différentes tailles de maillage numériques ($T_{in} = 298\text{ k}$, $V = 0.8\text{ m/s}$ et $[H_2] = 2\%$).....	15
Figure 3.8 : Comparaison du profil de fraction molaire le long de la plaque catalytique pour différentes tailles de maillage numérique ($T_{in} = 298\text{ k}$, $V = 0.8\text{ m/s}$ et $[H_2] = 2\%$).....	16
Figure 3.9 : Comparaison du profil de taux de réaction le long de la plaque catalytique pour différentes tailles de maillage numérique. ($T_{in} = 298\text{ k}$, $V = 0.8\text{ m/s}$ et $[H_2] = 2\%$).....	17
Figure 3.10 : Comparaison des données expérimentales (Magdalena et al., 2015) avec les résultats obtenus avec différents modèles de maillage.....	18
Figure 3.11 : Comparaison du profil de fraction molaire à la longueur de la plaque catalytique pour différentes concentrations d'hydrogène d'entrée (2% et 4%) avec expérimentale.....	19
Figure 3.12 : Comparaison du profil de température à la longueur de la plaque catalytique pour différentes concentrations d'hydrogène d'entrée (2% et 4%) avec expérimentale.....	20
Figure 3.13 : profile de température à la surface de longe de la plaque catalytique pour une fraction molaire d'hydrogène à l'entrée à 2% et 4% et $T = 298\text{ k}$	21
Figure 3.14 : profile de vitesse d'écoulement à la surface de longueur de la plaque catalytique pour une fraction molaire d'hydrogène à l'entrée 2% et 4% et $T = 298\text{ k}$	22

Figure 3.15 : profile de taux de réaction à la longueur de la plaque catalytique pour une fraction molaire d'hydrogène à l'entrée 2% et 4% et $T = 298\text{ k}$	23
Figure 3.16 : profile de fraction molaire d'hydrogène à la surface de longueur de la plaque catalytique pour une fraction molaire d'hydrogène à l'entrée 2% et 4% et $T = 298\text{ k}$	24
Figure 3.17 : profile de température le long de la plaque catalytique pour une fraction molaire d'hydrogène Y_1 à l'entrée 2% et 4% et $T = 298\text{ k}$, comparaison les résultats avec l'expérimentales.....	25
Figure 3.18 : profile de température au niveau horizontale des plaques catalytique (Y_3) pour une fraction molaire d'hydrogène à l'entrée égale 2% et 4%, $T = 298\text{ k}$ et $V = 0.8\text{ m/s}$	26
Figure 3.19 : profile de température au niveau horizontale des plaque catalytique (Y_4) pour une fraction molaire d'hydrogène à l'entrée égale 2% et 4%, $T = 298\text{ k}$ et $V = 0.8\text{ m/s}$	27
Figure 3.20 : profile de vitesse d'écoulement au niveau horizontale des plaques catalytiques (Y_1) pour une fraction molaire d'hydrogène à l'entrée égale 2% et 4% et $T = 298\text{ k}$	28
Figure 3.21 : profile de vitesse d'écoulement au niveau horizontale de les plaques catalytique (Y_3) pour une fraction molaire d'hydrogène à l'entrée égale 2% et 4% et $T = 298\text{ k}$	29
Figure 3.22 : profile de vitesse d'écoulement au niveau horizontale des plaques catalytiques (Y_4) pour une fraction molaire d'hydrogène à l'entrée égale 2% et 4% et $T = 298\text{ k}$	30
Figure 3.23 : profile de fraction molaire au niveau horizontale des plaques catalytiques (Y_1) pour une fraction molaire d'hydrogène à l'entrée 2% et 4% et $T = 298\text{ k}$	31
Figure 3.24 : profile de fraction molaire au niveau horizontale des plaques catalytiques (Y_3) pour une fraction molaire d'hydrogène à l'entrée égale 2% et 4% et $T = 298\text{ k}$	32
Figure 3.25 : profile de fraction molaire de l'hydrogène au niveau horizontale des plaques catalytique (Y_4) pour une fraction molaire d'hydrogène à l'entrée égale 2% et 4%, $T = 298\text{ k}$ et $V = 0.8\text{ m/s}$	33
Figure 3.26 : Contours de la fraction molaire, la température et la vitesse d'écoulement dans le PAR pour une concentration d'hydrogène d'entrée égale à 2 % ($V_{ent} = 0.8\text{ m/s}$ et $T = 298\text{ K}$)...	34
Figure 3.27 : Contours de la fraction molaire, la température et la vitesse d'écoulement dans le PAR pour une concentration d'hydrogène d'entrée égale à 4 % ($V_{ent} = 0.8\text{ m/s}$ et $T = 298\text{ K}$)...	36

Liste des tableaux

Tableau 1.1 : La capacité correspondante de recombinaison de l'hydrogène.....	1
Tableau 1.2 : les différents compartiments de différentes tailles d'AREVA PAR.....	2
Tableau 1.3 : Principaux systèmes d'atténuation de l'hydrogène et leurs limites intrinsèques.....	3

NOMENCLATURE

R : La constante des gaz parfait

P : La pression.

N : Les quantités de la matière

Y_i : La fraction massique de l'espèce.

M_i : La fraction molaire de l'espèce.

Fi : La force du corps.

ρ : La densité.

t : Le temps.

u : La composante de la vitesse.

x : Cordonnée spatiale.

P : La pression.

t : Tenseur de contrainte visqueuse.

F : Force corporelle.

E : L'énergie totale.

J : Le flux de diffusion.

λ_{eff} : Conductivité thermique effective.

q_c : Terme source.

v_t : La viscosité turbulente.

k : L'indice de k espèces.

Se : Taux de dégagement de chaleur.

Sr : La perte de chaleur radiative.

ν : viscosité cinématique (m\ s²).

h : L'enthalpie (J).

Cu : Constante déterminée expérimentalement.

ΔH : La chaleur de combustion (J / kg).

B : Le facteur pré-exponentiel (KJ/mol).

E : La réaction d'énergie d'activation (KJ/mol).

T : La température (K).

[H₂] : La concentration molaire d'hydrogène à la surface du catalyseur (Kmol/m³).

T_{ent} : Température à l'entrée de recombineur (K).

V_{ent} : La vitesse à l'entrée de recombineur (m/s).

L : La longueur (mm).

W : La largeur (mm).

Liste d'abréviation

CFD : Computational Fluid Dynamic.

EDM : Eddy dissipation model.

PWR : les réacteurs à eau pressurisée.

EPR : Réacteur pressurisé européen.

PAR: passif autocatalytice recombinaison.

AECL: Atomic Energy Canada Ltd.

EWE: Electro watts Engineering Ltd.

TPN : température égale à 293.15 K et pression absolue de 101,325 kPa.

NIS : Naval Investigative Service.

2D : bidimensionnel.

3D : tridimensionnelle.

Introduction générale

L'hydrogène présente aujourd'hui une grande aptitude à être utilisé comme source d'énergie alternative et facteur important de stockage d'énergie renouvelable [6]. Par exemple, dans le domaine de la combustion, l'hydrogène peut être utilisé comme additif ou carburant alternatif avec du gaz naturel ou du diesel pour augmenter les performances du moteur et ainsi réduire ou éliminer les émissions à effet de serre [7]. L'hydrogène a des limites d'inflammabilité très large, une très faible densité, une très faible énergie d'allumage, une chaleur de combustion très élevée, une conductivité thermique élevée et des difficultés de contrôler les feux d'hydrogène [8].

Les installations de production ou de stockage d'hydrogène présentent des risques d'explosions et d'incendies. Donc les mesures de sécurité sont nécessaires pour réduire le risque à un niveau acceptable et contrôlable, pour les petits systèmes véhicules à hydrogène par exemple, ainsi que pour les installations grandes et complexes telles que les centrales nucléaires (NPP Nucléaire Power Plant) [9].

L'hydrogène a été la principale cause d'incendie dans presque tous les plus grands accidents nucléaires observés à ce jour dans le monde. De nombreuses approches ont été étudiées et développées dans le monde pour atténuer les conséquences de l'accumulation d'hydrogène à l'intérieur du bâtiment de confinement des centrales nucléaires dans des scénarios d'accidents graves [8].

La sûreté de l'hydrogène est l'une des plus grandes priorités des centrales nucléaires (NPP). Pendant la progression de l'accident, des grandes quantités d'hydrogène peuvent être libérées dans l'atmosphère de confinement pour former des mélanges inflammables [10]. L'hydrogène est transporté dans l'atmosphère de confinement par des boucles de convection naturelles qui le mélangent avec de la vapeur et de l'air. La limite d'inflammabilité du mélange gazeux dépend de sa température, de la concentration en espèces (H_2 , O_2 , H_2O) et la pression [9].

L'atténuation des risques liés à l'hydrogène pour les centrales nucléaires est très importante pour assurer la sécurité des centrales nucléaires [11]. 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.

Différentes méthodes actives et passives sont utilisées dans les centrales nucléaires pour atténuer le risque d'inflammation incontrôlée de l'hydrogène, par exemple : allumage contrôlé, recombinaison catalytique, circulation forcée, injection de gaz neutre. La recombinaison catalytique de l'hydrogène avec l'oxygène de l'air est une méthode passive (ne nécessite pas de l'énergie pour son fonctionnement), qui est réalisée dans des recombineurs auto-catalytiques passifs (PAR) [12].

Aujourd'hui les recombineurs auto-catalytiques passifs (PAR) sont fréquemment utilisés comme dispositifs de sécurité pour atténuer le risque d'accumulation d'hydrogène dans les espaces confinés [13], qui fonctionne sur le principe de la réaction chimique de l'hydrogène H_2 avec l'oxygène O_2 de l'air ambiant sur les surfaces catalytiques pour former de la vapeur d'eau et libérer la chaleur de réaction [8].

Dans ce travail, l'objectif principal est de faire une étude numérique de comportement d'un Recombineur Passif Autocatalytique (PAR) durant son opération en présentant les différents variables tel que la concentration des espèces chimiques, les champs dynamique et thermique, ANSYS_DESIGN MODELER software a été utilisé comme outils numérique pour la création d'une configuration bidimensionnelle avec son maillage qui correspond à la géométrie d'une unité de PAR. La modélisation numérique a été effectuée par le code de calculs ANSYSE FLUENT les résultats de notes études ont été validé avec les données expérimental existant.

Le présent mémoire se compose en trois chapitres principaux :

Après cette introduction, nous allons présenter dans le premier chapitre des généralités sur les recombineurs passif auto-catalytique, leur principe de fonctionnement, les différents types existant, ses avantages et ses inconvénients.

Le deuxième chapitre est principalement dédié au présentation de la procédure numérique et la modélisation mathématique utilisé dans cette étude .

Dans le troisième chapitre, on a évalué et discute les résultats trouvés.

Finalement, ce mémoire sera terminé par une conclusion générale qui résume les principaux résultats obtenus avec quelques perspectives qui pourraient constituer une suite à notre recherche.

Chapitre 01 :

Recombineurs Passifs Autocatalytiques

(PAR)

Dans ce chapitre, nous allons présenter un rappel sur les risques qui sont accompagner l'hydrogène, les recombineurs autocatalytique passifs, et leur installation, quel sont les modèles (PAR) commerciaux existant et d'autres systèmes d'atténuations d'hydrogène.

1.1. Généralité sur Les Recombineurs Passifs Autocatalytique

Dans le cadre de l'étude des accidents de fusion du cœur d'un réacteur, le « risque hydrogène » est défini comme la possibilité d'une perte de l'étanchéité ou de l'intégrité de l'enceinte de confinement du réacteur ou d'une défaillance des systèmes de sûreté du réacteur à la suite d'une explosion d'hydrogène. L'hydrogène est produit principalement par l'oxydation des métaux présents dans le cœur du réacteur lors de la dégradation de celui-ci et par l'oxydation des métaux présents (cette interaction dégage de plus du monoxyde de carbone également inflammable).

L'hydrogène produit est relâché dans l'enceinte de confinement. La distribution de l'hydrogène dans l'enceinte de confinement est plus ou moins homogène suivant l'intensité du brassage de son atmosphère. En cas de forte hétérogénéité, il peut exister des concentrations importantes d'hydrogène de telle sorte que le seuil d'inflammabilité du mélange gazeux peut être dépassé. Aussi en présence de sources d'inflammation (actionneurs, points chauds...), l'inflammation pourrait se produire assez rapidement. Dans certaines conditions (forte concentration en hydrogène en particulier), la déflagration associée à la propagation d'une flamme initialement laminaire (vitesse de l'ordre du mètre par seconde) est susceptible de s'accélérer sous l'effet d'instabilités hydrodynamiques et de la turbulence [14].

Pour limiter l'accumulation d'hydrogène et le risque de combustion dans l'enceinte de confinement des réacteurs, ont été envisagées différentes stratégies. Elles consistent à utiliser une ou une combinaison des solutions suivantes [14] :

- Provoquer de manière délibérée l'inflammation des nuages inflammables au fur et à mesure de leur formation au moyen d'un système actif ; pour ce faire, des igniteurs sont utilisés sur certains réacteurs.
- Consommer l'hydrogène au fur et à mesure de son relâchement dans bêtement de confinement en utilisant un système passif : les recombineurs catalytiques passif (PAR).

- Diluer la concentration d'hydrogène dans l'atmosphère de l'enceinte de confinement en utilisant des enceintes de confinement ayant un grand volume (système passif).
- Injecter un gaz inerte tel que l'azote (système actif) de manière à limiter voire supprimer la présence d'oxygène et donc le risque de l'explosion.

La présence de vapeur d'eau joue également un rôle en diminuant la fraction relative d'hydrogène et d'oxygène ainsi l'atmosphère de l'enceinte de confinement.

Le principe de fonctionnement d'un recombineur catalytique passif est basé sur la réaction chimique de l'hydrogène avec l'oxygène sur une plaque catalytique, qui se produites la vapeur d'eau avec la chaleur qui va chauffer le gaz, par l'effet de flottabilité un écoulement naturelle se développe à l'intérieur de l'unité de PAR dirigé vers le haut comme monter (la figure 1.1).

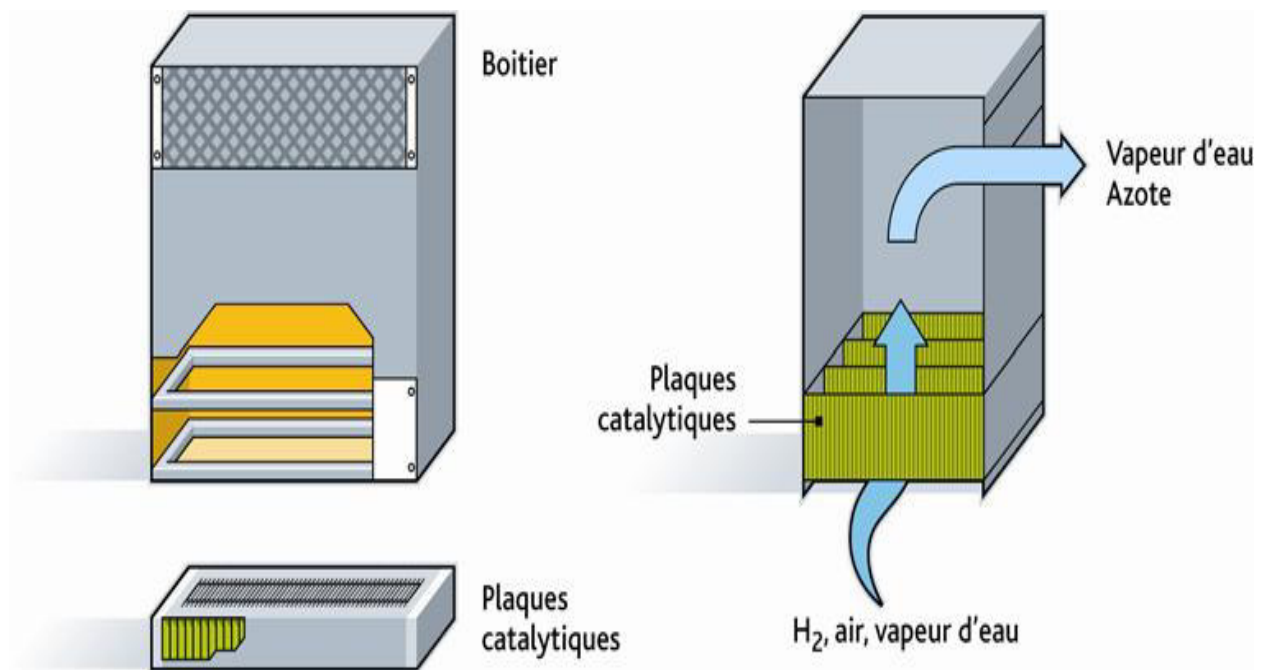


Figure1.1 : Schéma de recombineur .

Les recombineurs sont conçus pour fonctionner dans les conditions de pression, de température, d'humidité et d'ambiance radioactive correspondant aux conditions rencontrées lors d'un accident grave et la qualification des matériels tient compte des risques d'empoisonnement

des plaques catalytiques par les aérosols provenant du fonctionnement éventuel du système d'aspersion. Les recombineurs sont également dimensionnés pour résister aux chargements de pression et température pouvant résulter d'un accident grave et fonctionnent à partir d'une concentration en hydrogène d'environ 0,5 % en volume [14]. Pour former un mélange inflammable, la fraction volumique d'hydrogène doit dépasser 4% pour une concentration en vapeur jusqu'à 30% vol. Pour une concentration de vapeur entre 30 vols% et 65 vols%, la concentration minimale d'hydrogène pour l'allumage passe de 4 vol% à 12 vols%. Peut-être le considéré le mélange comme inerte, au-dessus de la concentration de vapeur à 65% en volume [16].

1.2. Fonctionnement du recombineur auto-catalytique passif

L'énergie d'activation pour la recombinaison de l'hydrogène et l'oxygène peut être considérablement réduite par l'utilisation des substances catalytiques, de sorte que la réaction peut commencer automatiquement faible sans propagation de la réaction à l'atmosphère environnante. Le mécanisme d'un catalyseur (platine, palladium) est de diminuer la délimitation des molécules d'hydrogène.

Les recombineurs catalytiques favorisent la réaction $H_2 + 1/2 O_2 \rightarrow H_2O$ en abaissant le seuil d'énergie d'activation pour que la réaction chimique lieu à basse température et concentration (figure 1.1) [15]. Les deux étapes principales sont : (1) la diffusion des réactifs sur le catalyseur, et (2) la réaction des réactifs absorbés sur le catalyseur. Un recombineur catalytique est qualifié de « passif » car ce dispositif est auto-démarrant et auto-alimenté, et ne nécessite aucune énergie externe. Un recombineur autocatalytique passif entre en action spontanément dès que les concentrations d'hydrogène commencent à augmenter dans l'atmosphère du bâtiment réacteur. En pratique, le recombineur catalytique démarre avec une concentration d'hydrogène égale à 1-2%. La combustion de l'hydrogène dans l'air nécessite au moins 4 % de concentration d'hydrogène, et même plus pour une explosion [16].

Un recombineur auto-catalytique passif se compose d'un canal vertical (cheminée) équipé d'un lit de catalyseur recouvert en Platinium où Palladium dans la partie inférieure. En cas d'accident, le lit de catalyseur est en contact avec le mélange gazeux de l'enceinte (Figure 1.1).

Les molécules d'hydrogène entrant en contact avec la surface du catalyseur réagissent avec l'oxygène de l'air. La chaleur de la réaction à la surface du catalyseur induit un écoulement convectif, sans assistance mécanique ou alimentation extérieure.

Le dégagement de chaleur de la réaction dans la partie inférieure du recombineur provoque une flottabilité, taux d'afflux accélérant et ainsi alimentant le catalyseur avec une grande quantité des gaz porteurs d'hydrogène assurant une recombinaison à haute efficacité. Une circulation naturelle de l'air lié au recombineur autocatalytique passif dans le volume de contrôle partiellement confiner autour. Les courants naturels de convection favorisent le mélange des gaz combustibles dans l'enceinte de confinement et éviter l'hydrogène probable sur concentrations « poches d'hydrogène » La circulation naturelle d'air assure une alimentation continue en air recombineur catalytique [16].

1.3. Processus de recombinaison du recombineur autocatalytique passif

Le mélange gazeux pénètre dans la boîte à l'ouverture inférieure et quitte la boîte à partir de l'ouverture au sommet de la boîte.

Initialement, le mélange gazeux (hydrogène-vapeur-air) pénètre dans la boîte de recombinaison en raison de la convection externe et de la diffusion moléculaire. Lorsque le mélange vapeur-hydrogène-air entre en contact avec les plaques catalytiques, la réaction d'oxydation exothermique a lieu sur la surface catalytique. La chaleur exothermique est partiellement absorbée par la plaque catalytique provoquant une augmentation rapide de sa température.

Une partie de la chaleur exothermique est dissipée dans le mélange de gaz environnant par convection et rayonnement provoquant une élévation de sa température et l'initiation d'un mouvement de gaz induit par la flottabilité vers le haut. Avec l'augmentation de la vitesse de réaction due à une température de catalyseur plus élevée, le débit induit par la flottabilité devient dominant. Cela fait que de plus en plus de mélange vapeur-hydrogène-air frais entre dans la boîte par le bas et qu'un mélange de gaz plus maigre sort par le haut de la boîte. Il y a donc trois phénomènes de transport à savoir : (1) mouvement du mélange gazeux par flottabilité à travers la boîte, (2) réaction d'oxydation catalytique et (3) dissipation de la chaleur exothermique à modéliser [8].

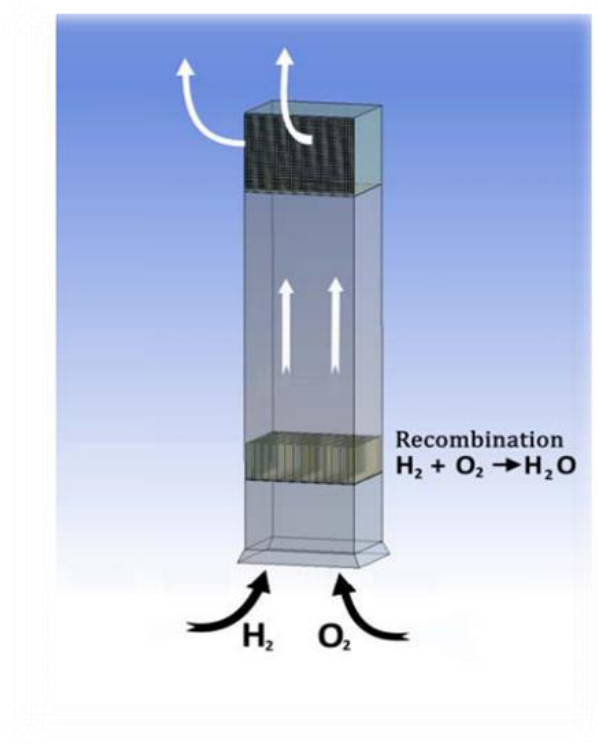


Figure 1.2 : processus de recombinaison du recombineur auto catalytique passif.

1.4. L'équipement des enceintes

Les concentrations moyennes d'hydrogène dans l'enceinte de confinement ne dépassent pas 8% en volume de manière à éviter l'inflammation complète de l'ensemble de l'hydrogène.

Les concentrations locales d'hydrogène ne dépassent pas 10% en volume pour éviter l'occurrence de phénomènes de combustion dynamiquement susceptibles de générer des chargements capables d'endommager l'enceinte de confinement et des équipements importants pour la sûreté.

La capacité correspondante de recombinaison de l'hydrogène est indiquée dans le tableau suivant :

Fraction molaire D'hydrogène (%)	Température moyenne (c°)	Taux de recombinaison
4%	80	109
	100	103
	120	97
8%	80	273
	100	257
	120	243

Tableau 1.1 : La capacité correspondante de recombinaison de l'hydrogène [14].

1.5. Présentation des modèles commerciaux des PAR

On a quatre différents types (catalyseur) et modèles de recombineurs auto-catalytiques passifs ont été développé : AtomicEnergy Canada Ltd. (AECL) (Canada), Electro Watts Engineering Ltd. (EWE) (Allemagne), Nis company et Siemens (Allemagne) KWU et AREVA (France).

1.5.1. Énergie atomique Canada limitée (EACL)

La conception du catalyseur et du recombineur d'AECL est le résultat de plus de 15 ans de recherche. Le catalyseur était développé à l'origine pour la fabrication d'eau lourde au moyen d'un procédé d'échange catalytique. La conception se compose d'une boîte rectangulaire ouverte (32 cm x 62 cm x 52 cm) avec couvercle et grilles (figure1.3).



Figure1.3 : Le recombineur AECL.

Le catalyseur AECL fonctionne à des températures allant jusqu'à 1000 K sans perte d'activité catalytique et il est insensible aux fortes expositions aux rayonnements. Le recombineur démarre automatiquement à de faibles concentrations d'hydrogène dans atmosphères saturées à une température aussi basse que 13 ° C [16].

1.5.2. Électro Watt Engineering Ltd

Le recombineur autocatalytique passif développé par la compagnie Electro Watt Engineering AG et CCI AG (anciennement Sulzer Thermtec) s'appelle KATAREK. L'appareil ou module KATAREK se compose d'un boîtier la forme d'une section carrée ou rectangulaire creuse avec dimensions standard de 300 x 300 mm les plaques de catalyseur sont placées dans la partie inférieure. Les plaques de catalyseur entièrement métalliques de chaque couche sont légèrement inclinées et fixée avec plaques de maintien. Les différentes couches sont perpendiculaires à l'une et l'autre. Ce type de disposition garantit un optimum transfert de masse entre le gaz et le catalyseur [16].

1.5.3. Nis company (Société NIS)

Le recombineur catalytique développé et commercialisé par la société NIS a été parrainé par RWE. Les unités de recombinaison catalytique NIS sont fournies dans une variété de tailles pour assurer le taux d'épuisement requis. Demi-mètre une longue section de rallonge de cheminée est disponible pour augmenter le taux d'épuisement. 8 tests supplémentaires dans une grande enceinte de béton à plusieurs compartiments ont confirmé les performances d'un prototype en taille réelle et a démontré la capacité du PAR à résister à des brûlures jusqu'à 10% vol.

Les dimensions extérieures de l'entrée du recombineur catalytique composé de 88 cartouches (45 x 20 x 1 cm), sont de 1000 x 1000 mm [19] Le recombineur catalytique NIS contient un rectangle cartouche plat remplis de pastilles céramiques sphériques poreuses, qui sont recouverts de palladium Figure (1.4).



Figure 1.4 : le recombineur catalytique NIS

1.5.4. Siemens KWU

Le recombineur catalytique exemple FR90 / 1 comprend un métal boîtier conçu pour favoriser l'écoulement naturel avec le gaz entré disposée en bas et sortie de gaz en haut.

Nombreuses plaques parallèles à catalyse active revêtement sont disposés verticalement dans le bas du logement (Figure 1.5). Le catalyseur est constitué d'une fine plaque en acier inoxydable revêtu d'un catalyseur spécial multi-métaux précieux. Le catalyseur permet de basses températures de démarrage [16].

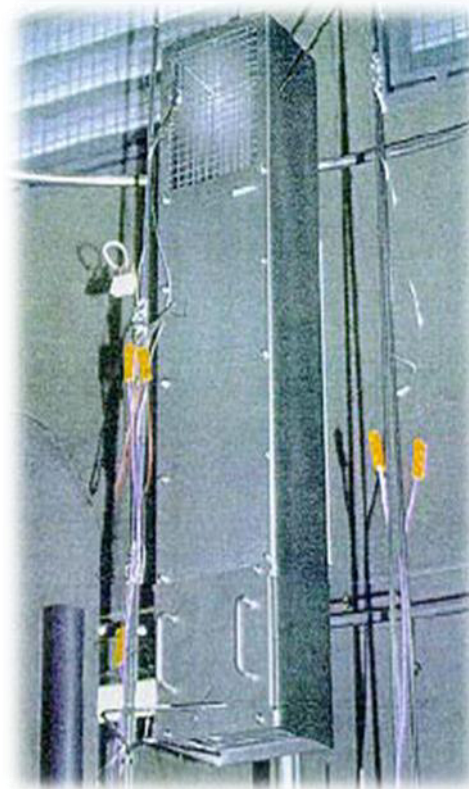
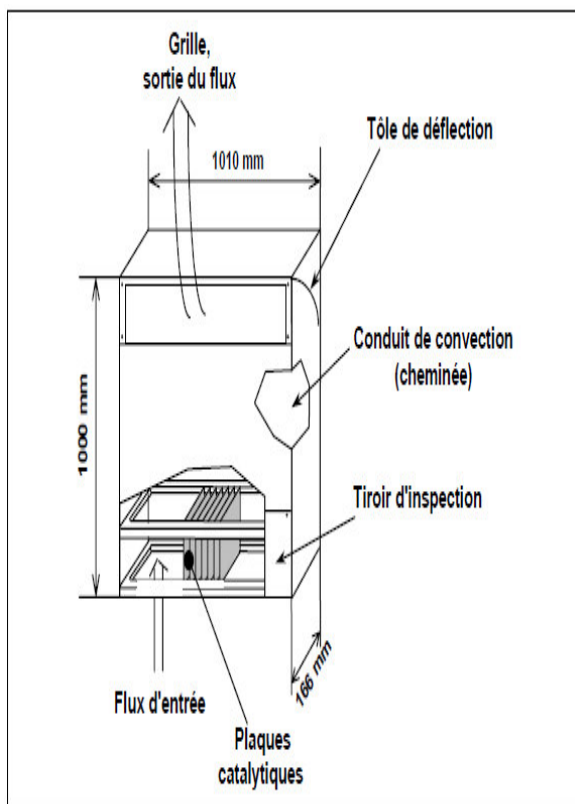


Figure 1.5 : schéma du recombineur SIEMENS FR90/1-150 sur H2-PAR.

1.5.5. AREVA PAR

AREVA PAR parmi les systèmes le plus nouvellement utilisé. 140 centrales dans le monde entier sont équipées ou vont être équipées des recombineurs autocatalytiques passifs d'AREVA, C'est aussi la solution de choix pour la dernière génération d'énergie nucléaire

plantes : l'EPR, permet une atténuation efficace du risque d'hydrogène dans l'enceinte de confinement, caractérisé par sa haute fiabilité fonctionnelle, d'excellentes performances d'atténuation de l'hydrogène et une capacité de traitement de gaz de jusqu'à 1500 m³/h par unité PAR [17].

1.5.5.1. Applications d'atténuation de l'hydrogène avec AREVA PAR

- Remplacement de l'hydrogène existant recombineurs pour les accidents de dimensionnement
- Atténuation de l'hydrogène lors des accidents graves
- Limitation générale de concentration des gaz combustibles
- Combinaison avec évacuation post-accidentelle et fonctions d'allumages possibles [17].

AREVA PAR est disponible en différentes tailles, permettant meilleure disposition possible dans les différents compartiments, La 3^{ème} colonne correspond au recombineur utilisé dans cette étude. En voir ça dans le tableau 1.2.

	FR1-150	FR1-320	FR1-960	FR1-380T	FR1-750T	FR1-1500T
Longueur (mm)	200	370	1,010	430	800	1,550
Profondeur (mm)	166	166	166	326	326	326
Hauteur (mm)	1,000	1,000	1,000	1,400	1,400	1,400
Poids approximatif	18	26	60	50	80 130	
Nombre des plaques catalytiques	15	32	96	38	75	150
Débit d'entrée à 1 bar et 60 ° C (m ³ / h) jusqu'à	50	110	330	330	660	1,500
Taux d'épuisement (kg / h) à 1,5 bar et 4% en volume	0.18	0.40	1.20	1.20	2.40	5.36

Tableau 1.2 : les différents compartiments de différentes tailles d'AREVA PAR [17].

1.5.5.2. Dimension

La section catalyseur de ce recombineur AREVA se compose de 38 feuilles d'acier inoxydable mesurant 0,280 m de large et 0,140 m de haut Figur1.7. Les feuilles sont placées à des intervalles de 0,01 m et leurs surfaces latérales encadrant les canaux verticaux, sont recouvert de platine. L'ensemble du PAR est 10 fois plus élevé que la section de catalyseur, et la plupart de cette hauteur est attribuée à la cheminée. L'intérieur section transversale du boîtier PAR a une largeur de 0,41 m et 0,32 m de profondeur. Trois sorties de gaz supérieures sont situées à la paroi avant et latérales du PAR [18].

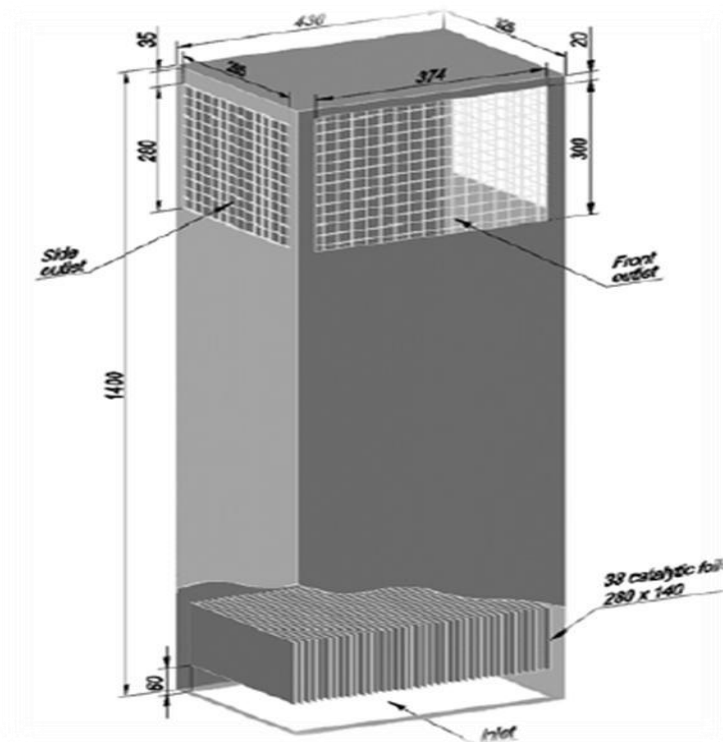


Figure 1.6 : Recombineur d'hydrogène AREVA.

1.6. Des autres systèmes d'atténuation de l'hydrogène

1.6. 1. Principaux systèmes d'atténuation de l'hydrogène et leurs limites intrinsèques

Les autres systèmes d'atténuation mis en œuvre dans les centrales nucléaires et dans d'autres installations industrielles comme monter le tableau 1.3 [16], [19] :

- Les recombineurs thermiques
- Les allumeurs.

- Les systèmes d'inertie et les systèmes de mélange.
- La recombinaison de l'hydrogène.
- Adsorption d'hydrogène.
- Élimination de l'oxygène.

Méthode	Limitations intrinsèques
Recombineurs catalytique	Peut induire une combustion supérieure à 7% de concentration d'hydrogène (auto-inflammation) Taux d'épuisement limité par transfert de masse.
Recombineurs thermiques	Système actif (alimentation en énergie) + Mise en œuvre en dehors du confinement Faible taux de recombinaison d'hydrogène Coût d'entretien élevé
Allumeurs	Peut déclencher une détonation locale en cas de mauvaise position. Inefficace dans des conditions inertes (vapeur, enrichissement en azote)
Systèmes de pré-inertage	Contraintes opérationnelles importantes en fonctionnement normal (risque d'anoxie)
Systèmes de mélange	Système actif Allumage statique de la combustion
Absorption d'hydrogène	Coût élevé et quantités importantes de getters Grandes incertitudes des connaissances en phénoménologie
Recombinaison d'hydrogène	Grandes incertitudes des connaissances en phénoménologie
Élimination de l'oxygène	Utilisation du système de pulvérisation et d'importantes quantités de getters Grandes incertitudes des connaissances en phénoménologie.

Tableau 1.3 : Principaux systèmes d'atténuation de l'hydrogène et leurs limites intrinsèques

1.7. Les moyens pour limiter le risque d'hydrogène

Différents moyens ont été étudiés, puis développés et sont proposés pour limiter les risques engendrés par la combustion de l'hydrogène :

- L'ignition contrôlée, provoquée par une étincelle électrique ou par l'échauffement catalytique de fils de platine, permet la combustion de l'hydrogène au moment où sa concentration dépasse localement la limite inférieure d'inflammabilité (Fineschi, Heck, Rohde, 1992 ; Bezlepkin, Heck, 1995 ; Fineschi, 1996). Cette inflammation provoque des surpressions moindres qu'une éventuelle détonation plus tardive et ne met pas en péril l'étanchéité de l'enceinte de confinement. Cependant la localisation de ces dispositifs doit être effectuée très attentivement, afin qu'ils ne soient pas à l'origine d'une accélération de flamme pouvant conduire à une détonation. Des dispositifs de ce type sont déjà installés sur des réacteurs à eau bouillante, notamment américains (Karwat, 1990 ; Reim, 1995).
- Le post-inertage consiste à injecter du dioxyde de carbone ou de l'azote liquide, ce qui rend le mélange gazeux inerte (Karwat, 1994 ; Stolze, 1997). L'inconvénient de ce dispositif est qu'il conduit à une surpression supplémentaire, due au gaz d'inertage dans l'enceinte de confinement. De plus, son application aux grandes enceintes de confinement des réacteurs à eau pressurisée est beaucoup plus complexe que pour les petites enceintes des réacteurs à eau bouillante, dans lesquelles il est déjà utilisé.
- Les recombineurs catalytiques (Heck, 1995 ; Blanchat, 1999) sont des dispositifs contenant un catalyseur qui facilite l'oxydation lente de l'hydrogène par l'oxygène de l'air, selon la réaction exothermique :



L'élimination progressive de l'hydrogène permet de rester en dessous des limites d'inflammabilité du mélange gazeux. Ce moyen de mitigation offre l'avantage d'être complètement passif, dans le sens qu'il ne nécessite ni l'intervention d'un opérateur, ni l'apport d'énergie extérieure [19].

1.8. Pour quoi le recombineur catalytique peut être considéré comme la technique d'atténuation de l'hydrogène la plus approprié ?

Le recombineur catalytique peut être considéré comme la technique d'atténuation de l'hydrogène la plus approprié car [16] :

1. Un recombineur catalytique est un système passif sans alimentation en énergie.
2. Un recombineur catalytique fonctionne dans des conditions d'accidents graves et d'accidents de dimensionnement.
3. Un recombineur catalytique démarre à faible concentration d'hydrogène, bien en dessous de l'hydrogène.
4. La phénoménologie physique du recombineur est bien connue.
5. La technologie de recombinaison autocatalytique passive est simple et ne nécessite pas de système complexe.

1.9. Etude bibliographique

Des nombreuses études et projets de recherches ont été effectués sur le comportement et les performances des PAR. L'objectif de cette partie est de faire une étude bibliographique sur les méthodes et outils employés pour l'amélioration de ces performances.

Magdalena et al [20], ont présenté la modélisation numérique des recombineurs passifs autocatalytiques (PAR). L'objectif principal de ce travail était de développer un modèle numérique sur le recombineur passif autocatalytique (PAR) en utilisant le logiciel de dynamique des fluides computationnelle (CFD) ANSYS-FLUENT. L'expérience REKO-3 [21] a été utilisée pour comparer ses résultats. L'expérience a été réalisée à l'Institut de recherche sur la sûreté et de technologie des réacteurs de Julich (en Allemagne). Elle a été réalisée pour différentes concentrations d'hydrogène, différents débits, la présence de vapeur et différentes températures initiales du mélange d'entrée. A la fin de cette étude ils ont démontré que le modèle de Scheffer [22], décrit bien l'oxydation catalytique de l'hydrogène dans le recombineur.

Serrano et al [23], ont présenté une méthodologie pour l'emplacement et le nombre des unités des PAR afin de minimiser le risque d'accumulation de l'hydrogène lors d'un accident grave dans une centrale nucléaire. Un code à paramètres regroupés (Lumped Parameter Code) (MAAP4 -1D) a été utilisé pour obtenir les sources de masse et d'énergie pour les scénarios d'accident, puis cette information a été utilisée dans un autre code de confinement (GOTHIC -3D) pour analyser la distribution d'hydrogène dans l'atmosphère de bâtiment de confinement. Enfin, le dimensionnement et l'emplacement des PAR ont été étudiés afin d'optimiser le système d'atténuation. Les simulations ont montré une réduction significative de l'accumulation d'hydrogène ainsi que du risque de combustion lorsque l'atténuation avec les PAR est prise en compte.

En 2019 V. Shukla [8] a été réalisé des études présente les principales caractéristiques du modèle du recombineur, sa validation par rapport aux données de la littérature ouverte et les résultats des études paramétriques effectuées pour étudier l'influence de divers paramètres de processus et de conception. Le modèle validé et optimisé est ensuite appliqué pour les calculs de pré-test sur les expériences en HRTF.

R.Raman, et al2020 [15], ont proposé une méthode précise et efficace pour simuler l'élimination de l'hydrogène en utilisant le PAR dans un bâtiment de confinement de réacteur nucléaire. À l'aide d'un modèle ponctuel et d'un ensemble détaillé d'équations cinétiques de réaction chimique. En utilisant les corrélations développées, un modèle CFD a été développé pour simuler les tests réalisés dans le dispositif expérimental REKO-3.

Dernièrement ils sont confirmés que le CFD est un outil fiable pour prédire le comportement du PAR dans des écoulements et des géométries complexes.

Chapitre 02 :
Modélisation Mathématique et
Procédure Numérique

La modélisation numérique, généralement exprimée sous forme d'un système algébrique, suivie d'une résolution itérative, permet l'accès aux variables physiques du problème à l'étude.

Dans ce chapitre, nous allons présenter les équations gouvernantes et la formulation mathématique pour notre problème (Le modèle turbulence k-ε et le modèle de recobination). Ensuite nous allons présenter une description sommaire de la CFD et de la méthode des volumes finis, et l'utilité numériques (software Fluent).

2.1. Equation de gouvernantes

Dans un cas général, les équations utilisées dans les problèmes d'écoulement dans les dérivent des équations fondamentales de la mécanique : (équations de continuité, de quantité de mouvement, Conservation des espèces, et d'énergie). Qui se présentent sous formes différentielles ou intégrales.

2.1.1. Conservation de masse (continuité)

Le principe physique stipule que la masse de matière se conserve [25], par conséquent un volume V fixe dans l'espace peut accumuler de la matière ou en échanger avec l'extérieur mais pas en créer ni en détruire. Cette relation étant valable quel que soit V , en déduit l'équation de continuité qui est une équation locale valable en tout point du fluide.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div}(\rho \vec{u}) = 0 \quad (2.1)$$

Le mélange est considéré comme un gaz idéal, donc la densité d du mélange est calculée par la relation suivante [24] :

$$d = p / \left(RT \sum_{i=1}^N \frac{Y_i}{M_i} \right) \quad (2.2)$$

Avec :

- R est la constante de gaz idéale.

- P est la pression.

- T est la température.

- Y_i et M_i sont respectivement la fraction massique et molaire de l'espèce chimique i .

- N présente le nombre des espèces chimiques.

2.1.2. Conservation de quantité de mouvement

L'équation de conservation de la quantité de mouvement traduit l'équilibre entre la somme des forces extérieures qui exercent une influence sur le fluide et le taux de variation de la quantité de mouvement du fluide de masse m (principe fondamentale de la dynamique) [25].

$$\frac{\partial(\rho u_j)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i u_j)}{\partial x_i} = -\frac{\partial p}{\partial x_j} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_i} + F_i \quad (2.3)$$

Avec :

F_i est la force du corps

Le tenseur de contrainte visqueux est donné par [26] :

$$\tau_{ij} = \mu s_{ij} - \frac{2}{3} \mu \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \quad (2.4)$$

Avec :

$$s_{ij} = \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) \quad (2.5)$$

Donc :

$$\tau_{ij} = \mu \left[\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right] \quad (2.6)$$

2.1.3. Conservation de l'énergie

Le premier principe de la thermodynamique montre que la dérivée temporelle dE/dt de l'énergie totale est égale à la somme de la puissance des forces extérieures et de la puissance calorifique reçue (par la surface S ou produite par unité de temps et de volume) [25], soit :

$$\frac{\partial(\rho E)}{\partial t} + \frac{\partial \rho(\rho u_i E)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\lambda_{eff} \frac{\partial T}{\partial x_i} - \sum_{k=1}^N h_k \bar{J}_k + u_i \tau_{ij} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho \bar{u}_i' h_s') + q_c \quad (2.7)$$

Avec :

ρ est la densité, t le temps, u est la composante de la vitesse, x est le coordonnées partiale, P est la pression, τ le tenseur de contrainte visqueuse. F est une force corporelle.

E est l'énergie totale, T est la température, h l'enthalpie, J le flux de diffusion, λ_{eff} est la conductivité thermique effective, q_c termes de source et k l'indice de k espèces.

2.1.4. Conservation des espèces

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho y_k) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i y_k) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D \frac{\partial y_k}{\partial x_i} \right) + \rho S y_k \quad (2.8)$$

y_k est la fraction massique de la k espèce, la diffusivité massique de l'espèce et $S y_k$ le terme source de la k ème espèce.

Le taux de chaleur moyen libéré lors de la combustion est ajouté à l'équation énergétique comme terme source. Il est obtenu par l'expression suivante [15] :

$$q_c = \rho S y_i \Delta H \quad (2.9)$$

Où ΔH est la chaleur de combustion (J / kg).

2.2. Modèle de turbulence

L'un des problèmes informatiques des phénomènes physiques 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.

2.2.1. Le modèle k-ε standard

Parmi les modèles de turbulence, le modèle $k - \varepsilon$ est l'un des plus utilisés [26]. L'objectif de ce modèle est de donner une fermeture à une échelle pour les termes de transport de l'énergie turbulent k et sa dissipation ε 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.

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

L'analyse dimensionnelle a conduit à [27] :

$$\nu_T = c_u \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (2.10)$$

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

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j \varepsilon) = D^\varepsilon + C_{\varepsilon_1} \frac{\varepsilon}{k} p^k - c_{\varepsilon_2} \bar{\rho} \frac{\varepsilon^2}{k} + C_{\varepsilon_3} \frac{\varepsilon}{k} H^k \quad (2.11)$$

2.3. Modèle de recobination

2.3.1. Cinétique de recombinaison

Recombinaison hétérogène d'hydrogène et l'oxygène est un processus complexe composé de nombreux réactions élémentaires se déroulant au niveau du catalyseur surface [28]. Le schéma global du catalyseur la réaction de recombinaison se lit comme suit [29] :



Cette réaction est suffisamment rapide pour être contrôlée en grande partie par diffusion moléculaire des réactifs vers la zone de réaction, on peut donc utiliser un simple modèle cinétique à une équation (mécanisme de Scheffer) équation (2.13), comme suit [21] :

$$r_{h_2} = 2r_{o_2} = -r_{H_2O} = B \cdot \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) \cdot [H_2] \quad (2.13)$$

B : Le facteur pré-exponentiel (m/s).

E : La réaction d'énergie d'activation. (KJ/mol).

T : La température(K).

[H2] : La concentration molaire d'hydrogène dans le gaz adjacent à la surface du catalyseur (Kmol/m³).

Les constantes $B = 14$ m/s et $E = 14,9$ kJ /mol a été calculée d'après les données expérimentales rapportées par (Scheffer et al) [21].

✓ Equation de Scheffer

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 [30]. 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.

2.4. Présentation de la CFD

2.4.1. 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. Les équations résolues peuvent être équations d'Euler, les équations de Navier-Stokes, etc [29].

La CFD a été établie à partir d'un problème mathématique pour devenir un outil essentiel dans pratiquement toutes les branches de la dynamique des fluides.

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 [31].

Pour notre travail, nous avons utilisé le code CFD Fluent V17.2, à dimension 2D.

2.5. 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 (forme intégrale des équations de conservations). 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 vibrationnelle 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 le domaine d'étude. Les volumes finis peuvent être construits autour de points d'un maillage initial, mais ce n'est pas une nécessité [32].

2.5.1. Caractéristiques de méthode des volumes finis

Les caractéristiques principales de la méthode des volumes finis en mécanique des milieux continus [33] :

- Approche physique (bilan des flux).
- Formulation conservative.
- S'adapte à des géométries quelconques.
- Existence de plusieurs schémas pour la résolution des termes non-linéaires
- Utilisée par plusieurs codes commerciaux en mécanique (Fluent et (ANSYS)... , etc.) et pour notre travail nous utilisons ANSYSE- FLUENT comme code numérique.

2.5.2. Différentes étapes de la résolution d'un problème avec la méthode des volumes finis

1. Maillage : découpage du domaine en éléments géométriques.
2. Initialiser la grandeur du champ inconnu sur le domaine de calcul.
3. Calcul du bilan de flux maillé par un schéma numérique.
4. Calcul du terme source.
5. Calcul de l'incrément temporel par une méthode d'intégration numérique.
6. Prise en compte des conditions aux limites sur les inconnues. Application des conditions aux limites.
7. Résolution du système linéaire et détermination du champ en tout point.
8. Calcul des dérivées sur les mailles élémentaires [33].

2.5.3. Discrétisation volumes finis

Elaboration d'un maillage (décomposition de la géométrie en mailles élémentaires) :

On découpe le domaine de calcul Ω en élément géométriques (volumes de contrôle). Ces mailles élémentaires doivent assurer la couverture totale du domaine.

On définit les nœuds de calcul (nœuds des variables) aux centres de gravité des volumes de contrôle. Les variables sur les frontières des volumes de contrôle sont interpolées à partir des variables des centres de gravité [34].

La formulation bidimensionnelle consiste à subdiviser le domaine d'étude (Ω) en un nombre d'éléments finis. Chaque élément contient quatre nœuds, un volume fini entoure chaque nœud [35] Figure (2.1).

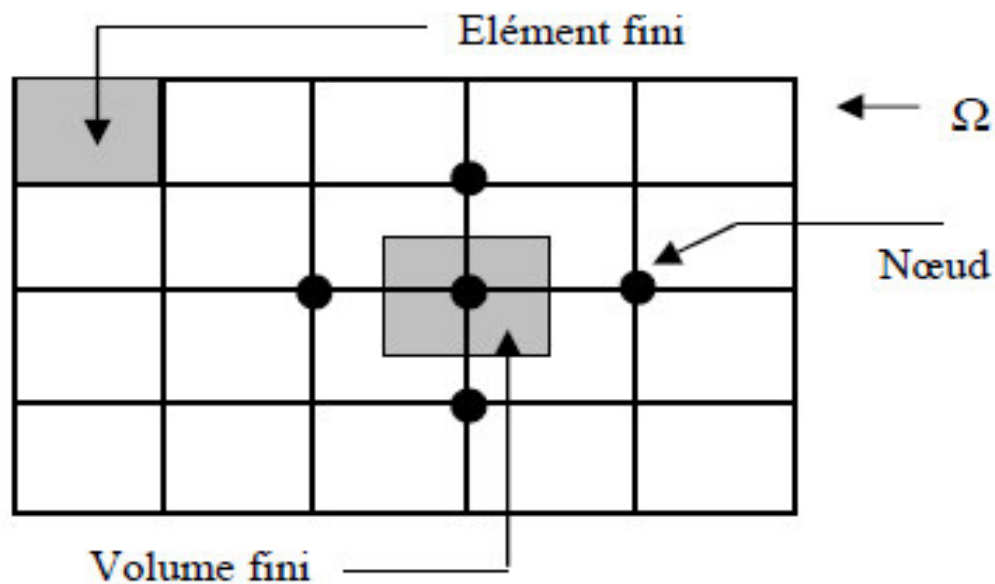


Figure 2.1 : Discrétisation en volumes finis du domaine d'étude dans le cas bidimensionnel.

2.6. Le software FLUENT

FLUENT est un programme informatique ultramoderne pour la modélisation du flux de fluide et du transfert chaleur en géométries complexes. Il donne 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 / quadratique 2D, 3D tétraédrique / hexaédrique / pyramide et des mailles mixtes (hybrides). Ça peut aussi affiner ou grossir la grille en fonction des différents paramètres d'écoulement [36].

FLUENT est écrit dans le langage informatique C. les structures de données efficaces et le contrôle flexible du solveur sont tous possibles.

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 et l'automatisation des processus de calcul se fait par une interface de scripts. L'un des intérêts de ce logiciel de simulation généraliste est qu'il dispose d'un nombre relativement important de modèles dans la mécanique des fluides : écoulements diphasiques (miscible, non miscible, cavitation, solidification), turbulence (Ke, Kw, SA, Reynolds etc....), 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 [26].

Chapitre 03 :
Présentation de la simulation
numérique

Dans ce chapitre nous avons adapté une description sommaire de l'installation expérimentale REKO-3 et nous avons présenté les résultats de notre simulation numérique et leurs interprétations pour les différentes variables autour des plaques catalytiques et à l'intérieur de PAR.

3.1. Installation REKO-3

L'installation REKO-3 a été conçue pour étudier le comportement d'une petite section de recombineur dans des conditions d'équilibre et permanent bien définies. Les températures du catalyseur et l'appauvrissement de la concentration d'hydrogène la longue des feuilles de catalyseur sont les principales mesures pour fournir des informations sur les processus de conversion. Ces expériences fournissent une excellente base de données pour la validation des codes de calculs numériques. Cette installation se compose d'un canal d'écoulement vertical de dimension 46x146mm de section rectangulaire et d'une hauteur d'environ 500mm comme montre (la figure 3.1) [37].

Les expériences de l'installation d'essai REKO-3 (Figure 3.1) servent essentiellement à clarifier les interactions de la réaction cinétique, le transfert de chaleur et de masse et les conditions d'écoulement à l'intérieur du recombineur. La configuration expérimentale permet l'étude d'échantillons de catalyseur à l'intérieur d'un canal d'écoulement vertical dans des conditions bien définies comprenant le mélange gazeux, le débit et la température d'entrée. Les feuilles de catalyseur (acier inoxydable revêtu d'une couche de lavage / matériau de catalyseur au platine) sont disposées en parallèle formant des canaux d'écoulement rectangulaires verticaux [38].



Figure 3.1: banc d'essais REKO-3.

3. 2. La géométrie et maillage

Pour modélisation numérique (CFD) de ce dispositif expérimental, une géométrie simplifiée en 2D a été créée comme une première étape, d'abord la géométrie du PAR a été dessinée sous forme de rectangle de dimension 380x40mm contient 4 petits rectangles d'épaisseur de 2mm et de 120mm de longueur qui présenteront les plaques catalytiques. Le bas présente l'entrée du mélange frais, et la sortie sera par la partie haut (la figure 3.2).

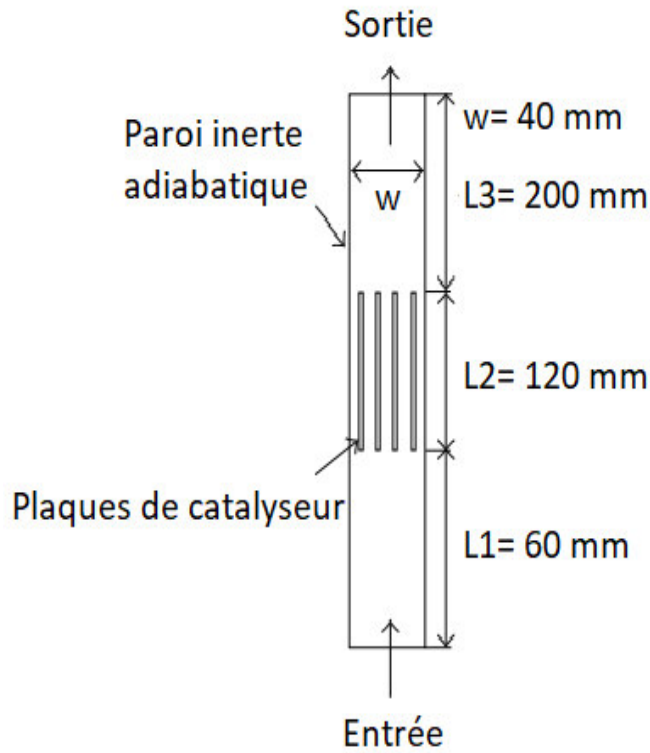


Figure 3.2 : Schéma de PAR

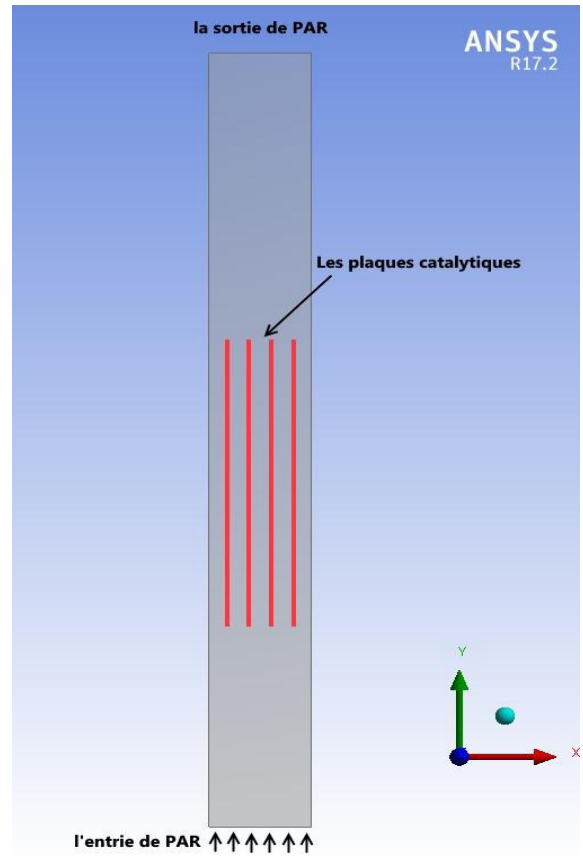


Figure 3.3 : la géométrie de PAR

3.2.1 Configuration et condition aux limites

On a utilisé le solveur ANSYS-FLUENT pour notre simulation avec le modèle turbulent $k - \varepsilon$. Ensuite, on met en place les mécanismes réactionnels qui sont le plus important en raison de cette réaction sur l'hydrogène avec l'oxygène est converti en vapeur par un type de réaction surfacique.

On utilise le mécanisme de réaction à une seule étape qui est proposé par Scheffer [9] sur les surfaces des plaques catalytiques.

$$r_{h_2} = 2r_{o_2} = -r_{H_2O} = B \cdot \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) \cdot c_{H_2} \quad (2.1)$$

Le mécanisme de réaction qui est à la base du fonctionnement du PAR est donné comme :



Les conditions aux limites qu'on a utilisées à l'entrée comme suit :

- ❖ La vitesse de mélange = 0.8 m/s.
- ❖ La température d'entrée = 298 K.
- ❖ Fraction molaire d'hydrogène = 2%.
- ❖ Fraction molaire d'oxygène = 21%.
- ❖ Fraction molaire d'azote = 77%.
- ❖ La pression est atmosphérique.
- ❖ Le modèle de turbulence $k - \varepsilon$.
- ❖ Paroi externe considéré adiabatique.

3.2.2. L'Indépendance de maillage

Avant d'effectuer l'étude paramétrique on a fait une étude d'indépendance de maillage et son effet sur nos résultats et pour sélectionner le maillage qu'on va utiliser dans notre étude. Plusieurs maillages de tailles différentes sont utilisés dans l'objet de faire l'étude de maillage, on utilise des configurations de 1000, 5000, 21000, 48000 et 85000 mailles (figure 3.4). Plusieurs variables (Température, Vitesse, Fraction molaire et Taux de réaction) sont comparées et à des différentes positions figure (3.5).

La figure (3.4) présente différentes tailles de maillage utilisé.

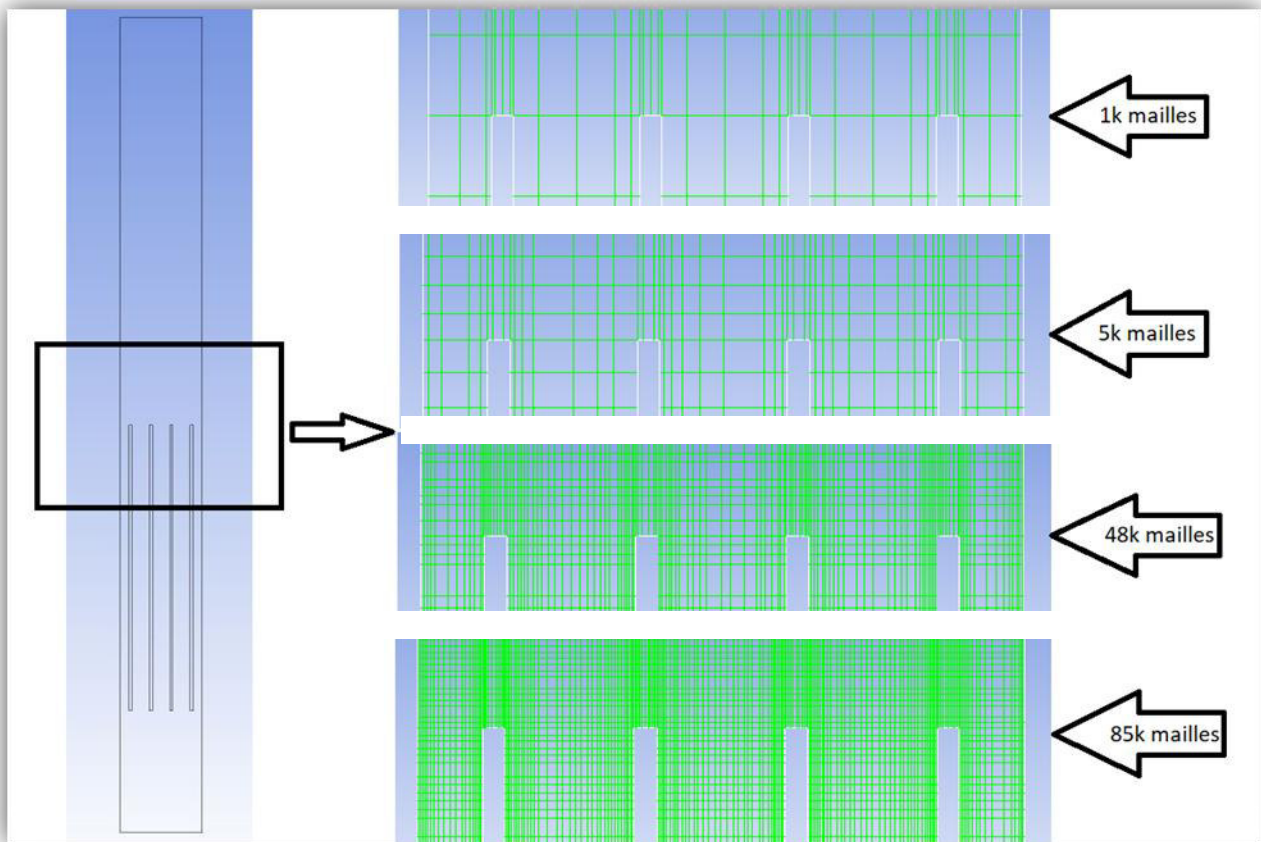


Figure 3.4: Configuration 2D et les différentes tailles de maillage utilisé

La figure (3.5) suivante présente les différents directions verticale X1 à la section de surface du 2eme plaque catalytique et horizontale Y1, Y2 et Y3 dans le domaine de calculs, où on va présenter les différentes variables tel que la température, vitesse et la concentration.

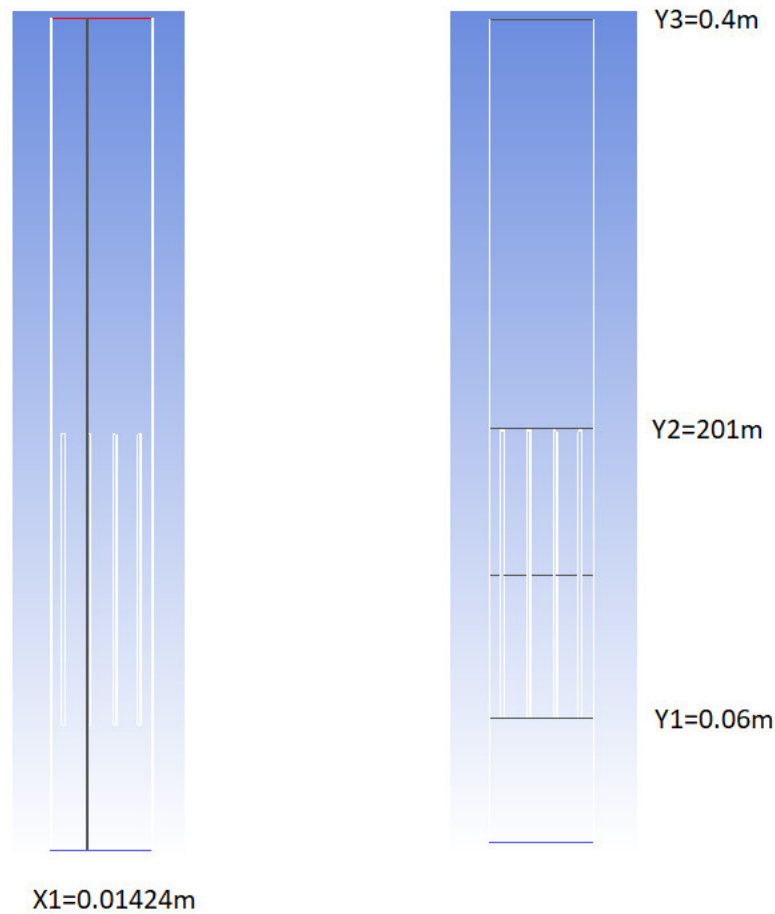


Figure 3.5 : Différents directions verticale X1 à la section de surface de la deuxième plaque catalytique et horizontale Y1, Y2 et Y3.

3.2.3. Résultats de sensibilité de maillage

Les résultats de l'étude de l'indépendance des maillages d'après les tests variations numériques et expérimentaux sont présentés sur les figures (fig3.6, fig3.7, fig3.8et fig3.9).

La figure (3.6) présent le profil de température à la direction verticale X1 sur la surface de la plaque catalytique pour différentes tailles de maillage. On remarque que profile de température

de nombre de maillage égale 1000 est loin par rapport les autres différents nombres de maille (5k ,48k et 85k mailles) qui ils sont similaire.

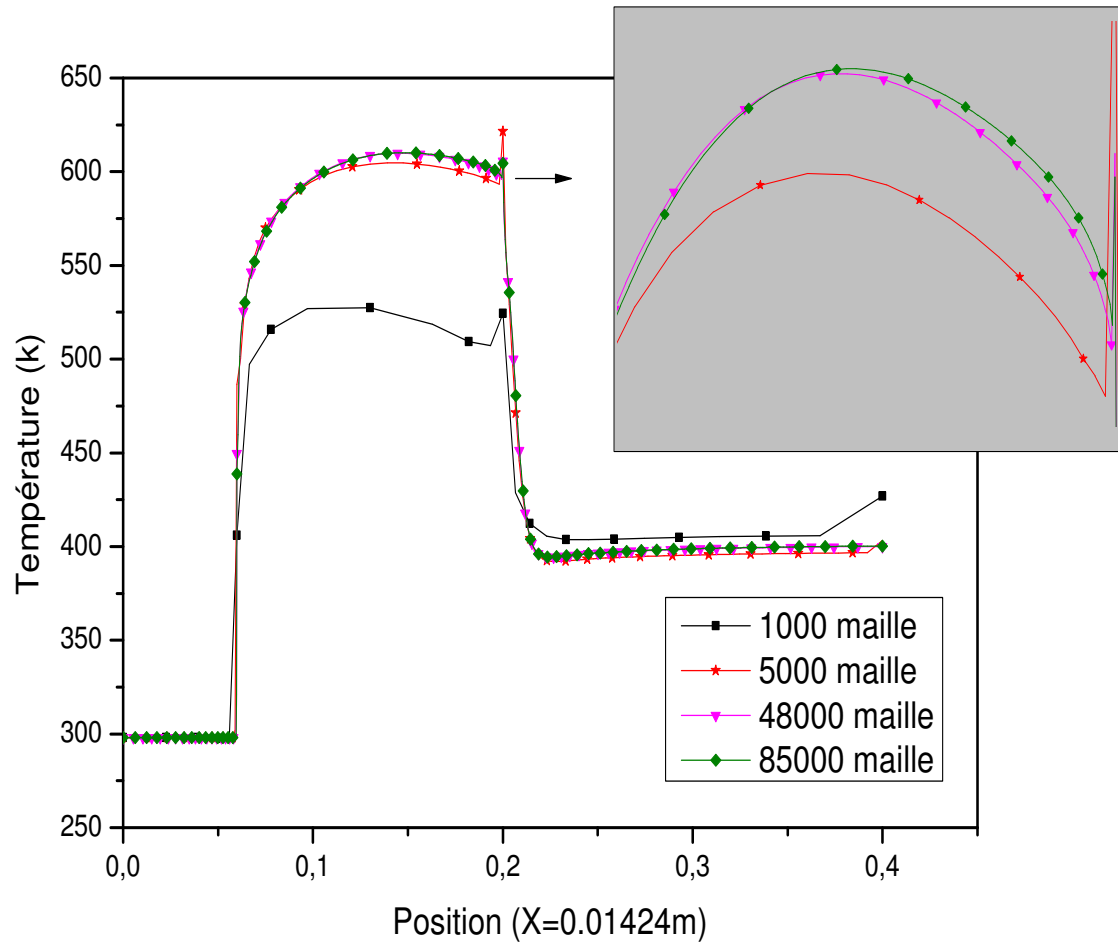


Figure 3.6 : Comparaison du profil de température à la section verticale X1 sur la surface la plaque catalytique pour différentes tailles de maillage numérique ($T_{in} = 298 \text{ K}$, $V = 0.8 \text{ m/s}$ et $[H_2] = 2\%$).

La figure (3.7) présente le profil de vitesse à la section verticale X1 sur la surface de la plaque catalytique pour différentes tailles de maillage. On remarque que le profil de température de nombre de maillage égal 1000 est loin par rapport aux autres différents nombres de mailles (5k, 48k et 85k mailles) qui sont similaires à un faible écart.

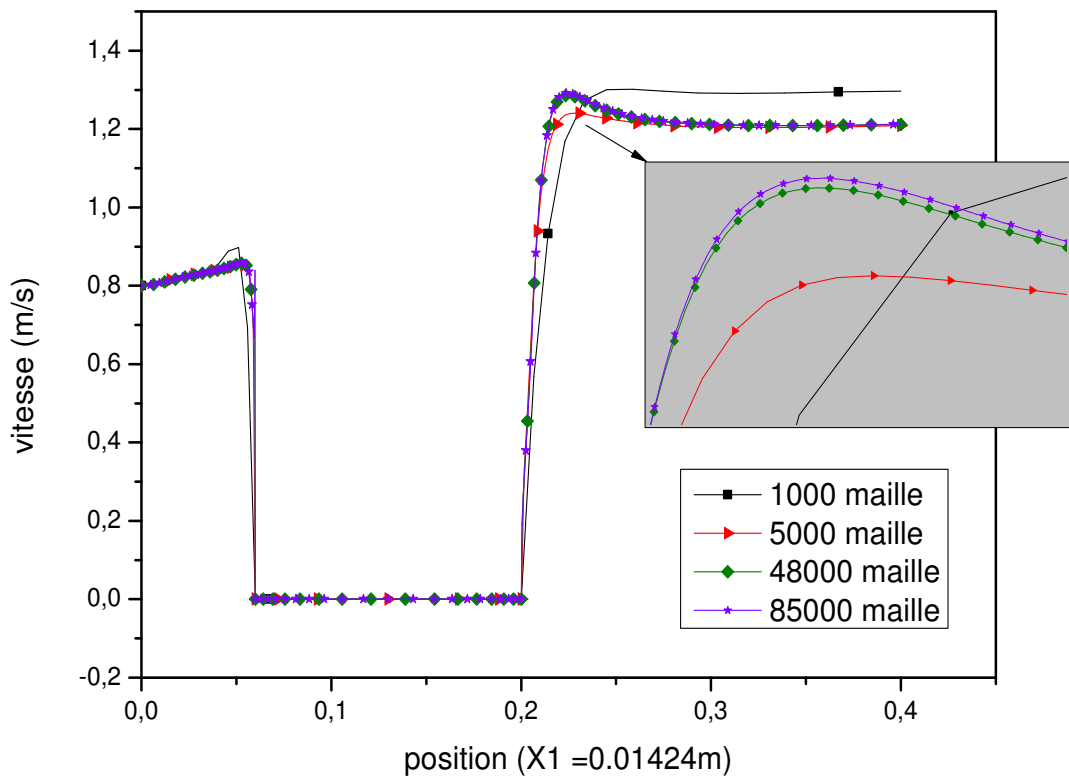


Figure 3.7 : Comparaison du profil de vitesse à la section verticale X1 sur la surface la plaque catalytique pour différentes tailles de maillage numériques ($T_{in} = 298 \text{ K}$, $V = 0.8 \text{ m/s}$ et $[H_2] = 2\%$).

La figure (3.8) présente le profil de fraction molaire à la section verticale X1 sur la surface de la plaque catalytique pour différentes tailles de maillage. On remarque que le profil de température de nombre de maillage égal 1000 est loin par rapport aux autres différents nombres de mailles (5k, 48k et 85k mailles) qui sont similaires à un faible écart.

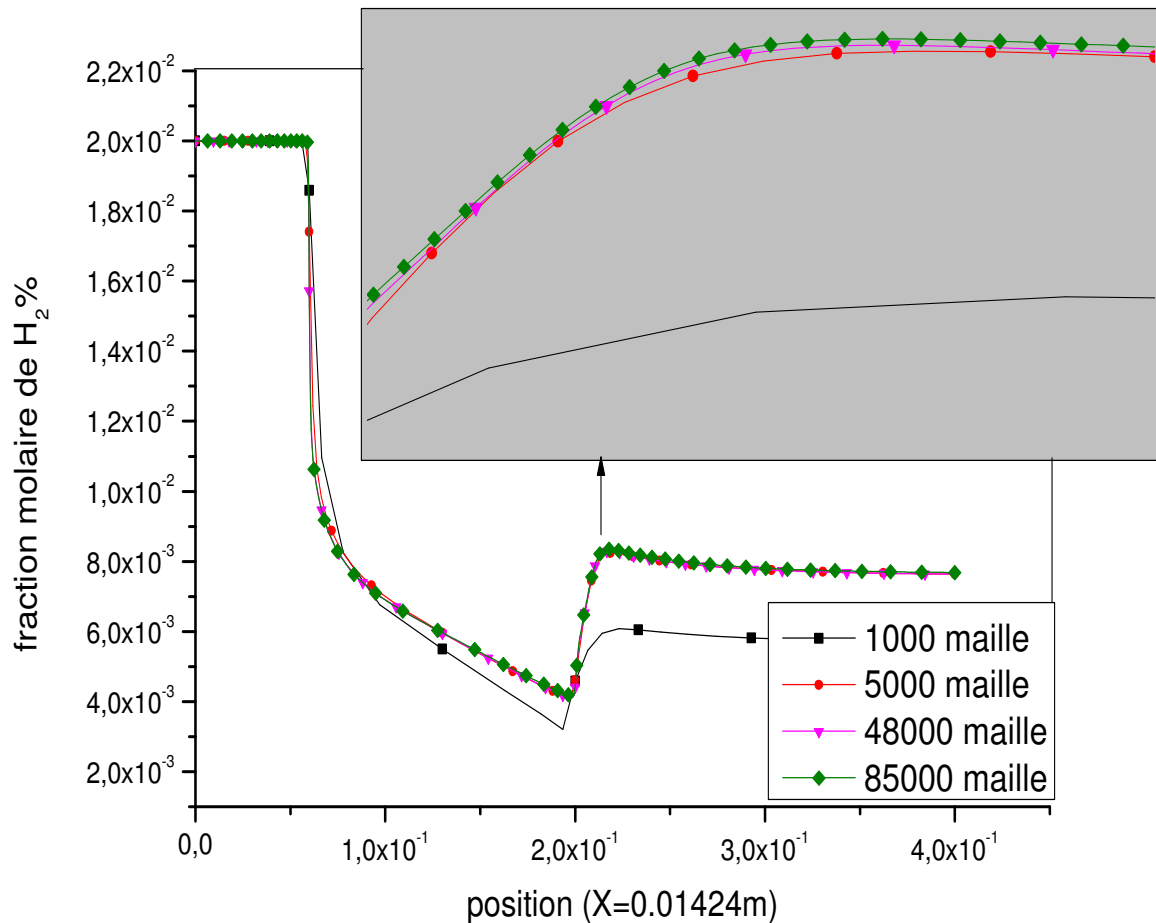


Figure 3.8 : Comparaison du profil de fraction molaire à la section verticale X1 sur la surface de la plaque catalytique pour différentes tailles de maillage numérique ($T_{in} = 298$ K, $V = 0.8$ m/s et $[H_2] = 2\%$).

La figure (3.6) présente le profil de taux de réaction à la section verticale X1 sur la surface de la plaque catalytique pour différentes tailles de maillage. On remarque que le profil de température de nombre de maillage égale 1000 est loin par rapport aux autres différents nombres de maillage (5k, 48k et 85k mailles) qui sont similaires à un faible écart.

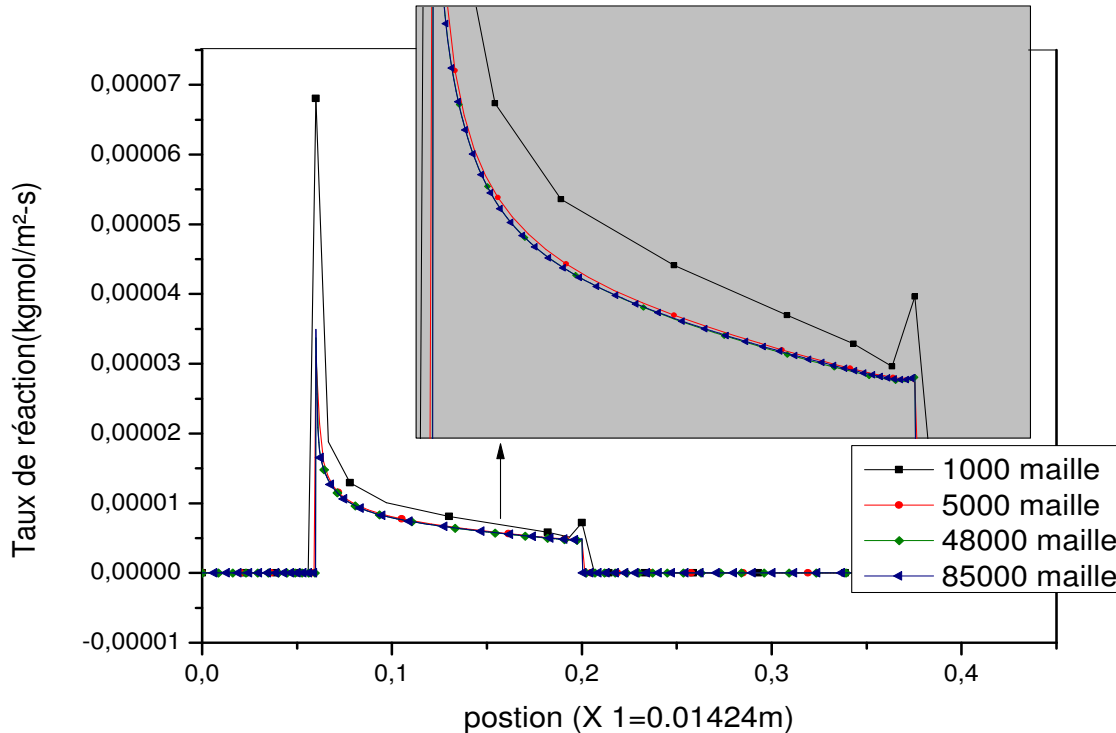


Figure 3.9 : Comparaison du profil de taux de réaction à la section verticale X1 sur la surface de la plaque catalytique pour différentes tailles de maillage numérique. ($T_{in} = 298$ k, $V = 0.8$ m/s et $[H_2] = 2\%$).

3.2.4 Conclusion

A partir des résultats trouvés concernant les 4 mailles avec différentes variables (température, vitesse, fraction molaire et taux de réaction). On remarque quand le maillage de nombre des mailles plus, a permis une meilleure prédiction. Grâce aux résultats des tests de maillages avec différentes variables on trouve à partir de maillage 48k les courbes sont identiques comparativement, donc nous choisissons le maillage 48k mailles comme un maillage satisfaisant pour le reste de notre étude.

3. 2.5. Validation des calculs avec l'expérimentale

La figure (3.10) suivante présente la comparaison entre les résultats de température obtenue de tests de maillage et les données expérimentales.

D'après la figure 3.10 on remarque que le profil de température entre le maillage 1000 et les autres maillages il y a un écart mais à partir du maillage de 48000 les profils des températures sont similaires à faible écart, et on observe que les profils de température sont surestimation par rapport à l'expérimentale.

Le profil du résultat d'expérimentale est proche de la courbe de 1000 mailles mais on ne prend pas comme un bon maillage à cause de la compensation d'erreur.

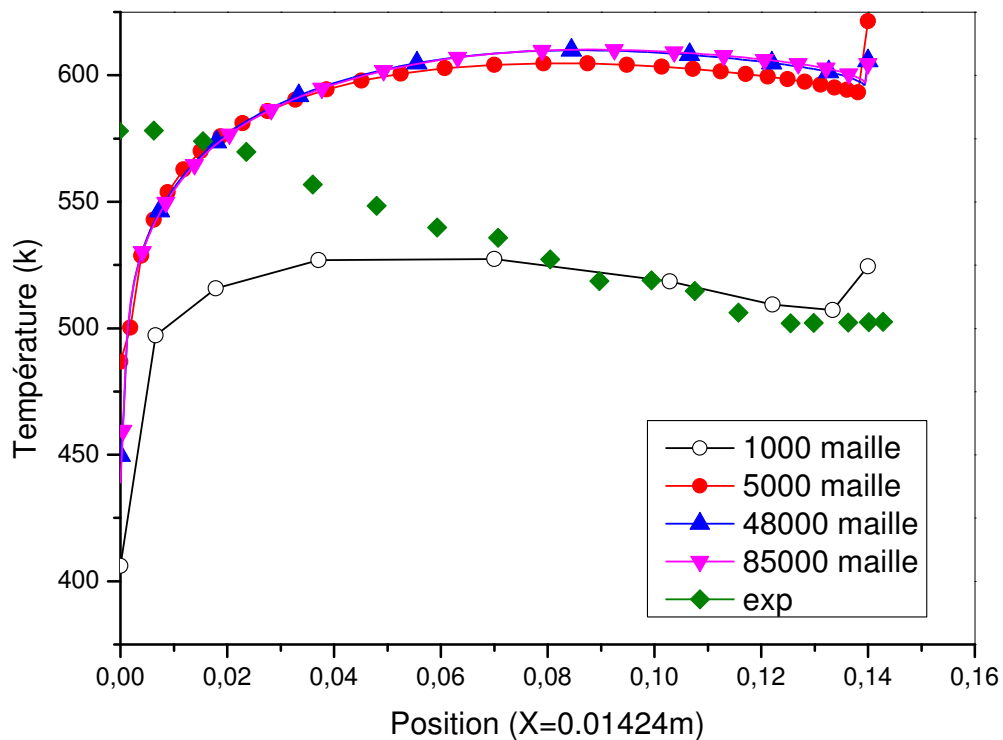


Figure 3.10 : Comparaison des données expérimentales avec les résultats obtenus avec différents modèles de maillage pour différentes concentrations d'hydrogène d'entrée (2%) avec expérimentale.

La figure (3.11) suivante montre la comparaison des résultats de nos simulations avec des résultats expérimentaux des profils de fraction molaire d'hydrogène pour les deux concentrations d'hydrogène d'entrée 2% et 4%, la forme du profile de nos résultats sont bien reproduites par les résultats expérimentaux. Pour 4% on remarque au début une consommation d'hydrogène moins par rapport le résultat expérimentale (surestimation).et après (0.03m) on observe une consommation plus par rapport les résultats expérimentale (sous-estimation), et pour 2% on remarque une surestimation jusqu'a (0.09m) et puis on observe une similarité de consommation.

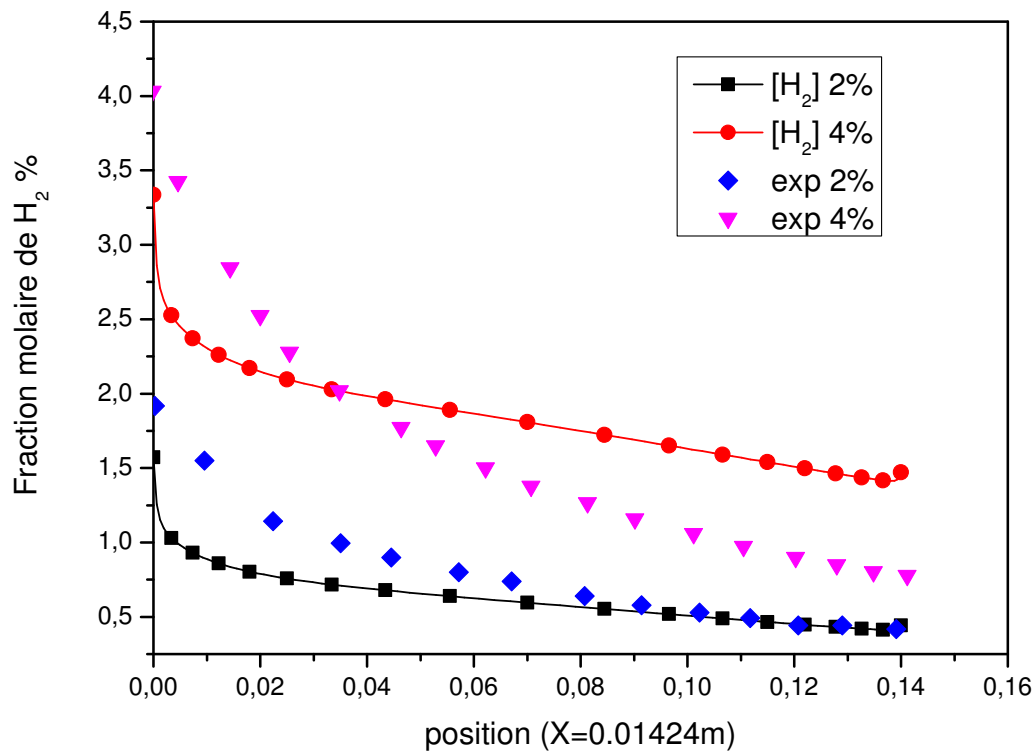


Figure 3.11 : Comparaison du profil de fraction molaire à la section verticale X1 sur la surface de la plaque catalytique pour différentes concentrations d'hydrogène d'entrée (2% et 4%) avec expérimentale.

La figure (3.12) suivante montre la comparaison des résultats de nos simulations avec des résultats expérimentaux de température pour les deux concentrations d'hydrogène d'entrée à 2% et 4%, on remarque que la température de nos résultats est augmentée par rapport à les résultats de l'expérimentale qui sont diminués.

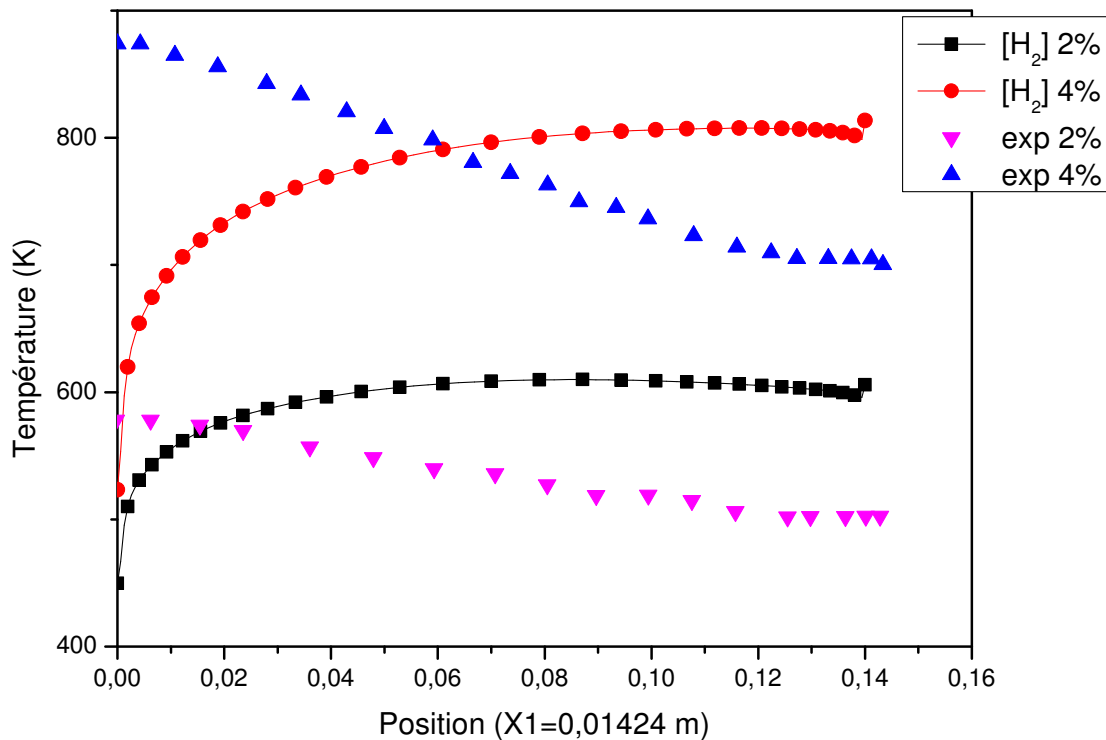


Figure 3.12 : Comparaison du profil de température réaction à la section verticale X1 sur la surface de la plaque catalytique pour différentes concentrations d'hydrogène d'entrée (2% et 4%) avec expérimentale.

3.3. Résultats et discussions

Dans cette partie nous avons vérifié l'exactitude des résultats numériques obtenus dans le travail, la validation de nos simulations numériques sont comparais aux résultats expérimentaux [20], on a gardé les mêmes conditions aux limites que [20] pour un recombineur auto catalytique.

On a fixé les paramètres initiaux du mélange, on a seulement varié la concentration d'hydrogène à l'entré 2% et 4%.

D'après la figure (3.13) qui présente le profil de température pour différentes concertations d'hydrogène d'entrée (2% et 4%), à l'entrée de PAR dans la zone [0 à 0.06 m] avant les plaques, la température est constante à $T = 298\text{k}$. Juste au plaque catalytique [0.06 à 0.2m] on observe une augmentation progressive de la température jusqu'au seuil à cause de transport de chaleur par convection et de la réaction exothermique qui produise un énergie thermique sur les plaques pour les deux concentrations atteint (2%, $T=600\text{k}$ et 4%, $T=800\text{k}$) (consomme plus, produit plus de la chaleur).A $x=0.2$ on remarque un pique de température car la dimension des grilles reste petite à la tête de la plaque catalytique et la production de chaleur continue dans cette zone (réaction chimique) . Just après la plaque on remarque une chute de température pour les deux concentrations ($T=350\text{k}$ à 2% et $T=450$ à 4%) c'est car le mélange devienne homogène. Après on observe la température devient constante à la température supérieure que l'entré.

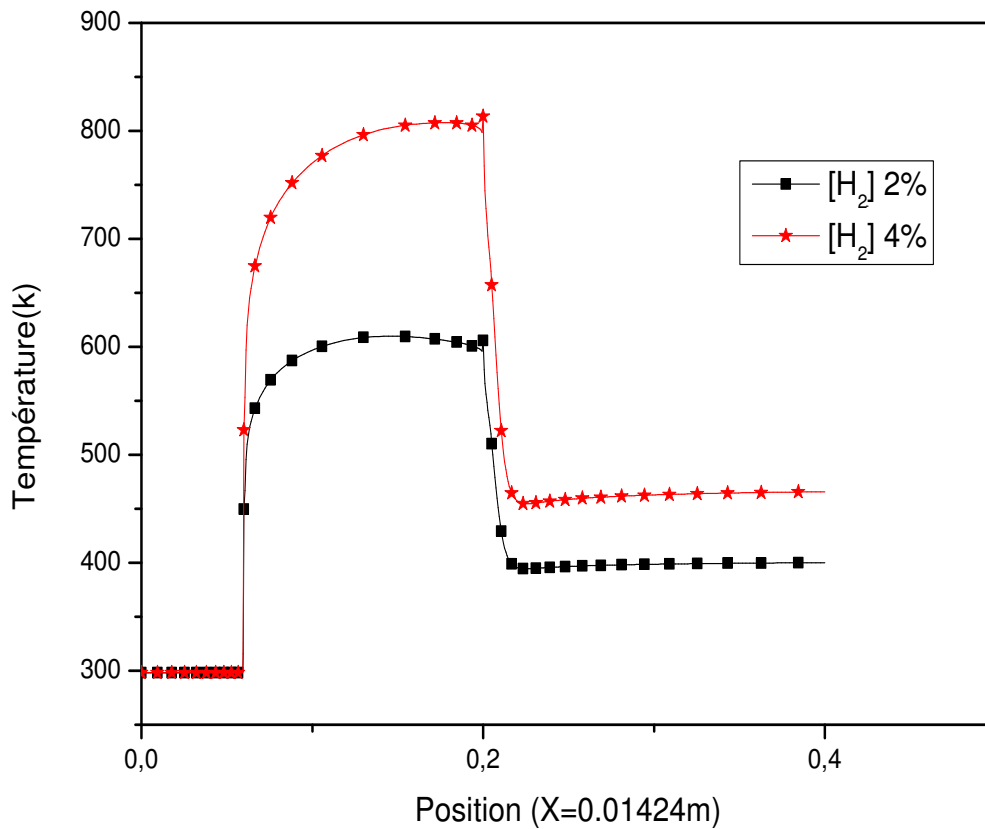


Figure 3.13 : profile de température à la surface de longe de la plaque catalytique pour une fraction molaire d'hydrogène à l'entrée à 2% et 4% et $T = 298$ k.

La figure (3.14) présente la vitesse de l'écoulement sur la section verticale X1 situé à la même position que la deuxième plaque catalytique. On remarque que la vitesse est nul à la frontière de la plaque catalytique [0.06 à 0.2m] par de l'effet d'adhérence pour les deux concertations, après on remarque une augmentation de vitesse $V=3\text{m/s}$ lorsque la concentration d'entrée est 2%, et $V=1.5\text{m/s}$ lorsque la concentration d'entrée est 4%.

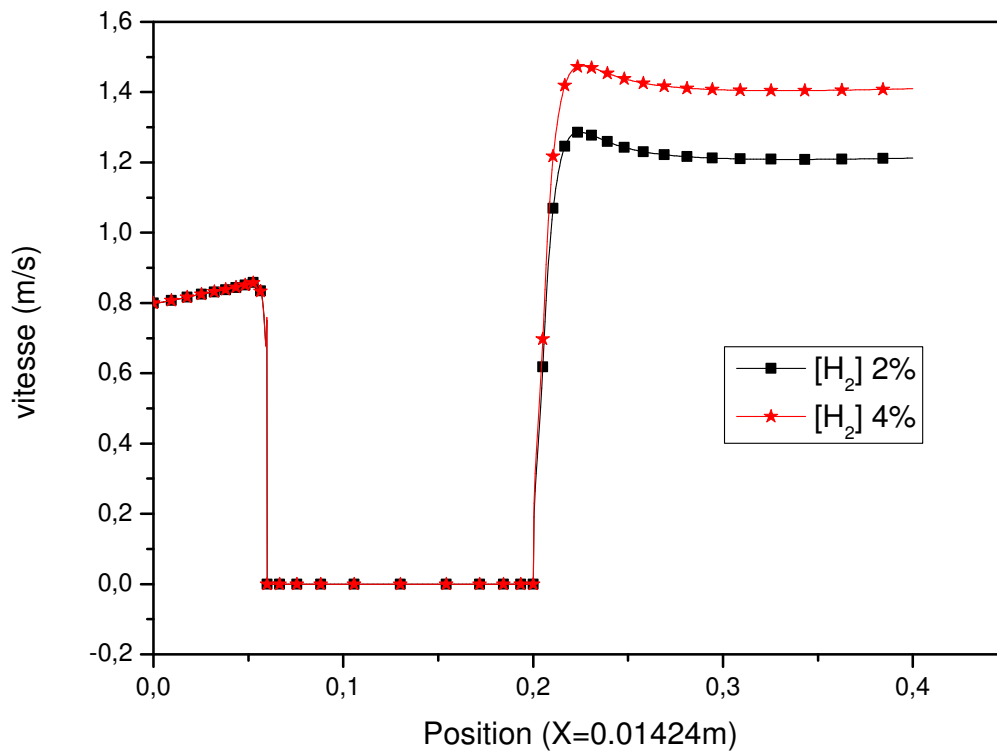


Figure 3.14: profile de vitesse d'écoulement à la section verticale X1 sur la surface de la plaque catalytique pour une fraction molaire d'hydrogène à l'entrée 2% et 4% et $T = 298$ K.

La figure (3.15) qui présente le taux de réaction sur la section vertical (X1) situé à la même position que la deuxième plaque catalytique pour les deux concentrations d'hydrogène (2% et 4%). On observe que le taux de réaction est plus élevé au bord avant la plaque catalytique se traduit par forte consommation d'hydrogène. A la phase [0.06 à 0.2m] longueur de la plaque catalytique, on remarque une diminution linéaire de taux de réaction progressivement jusqu'à devient nul à la fin de la plaque catalytique.

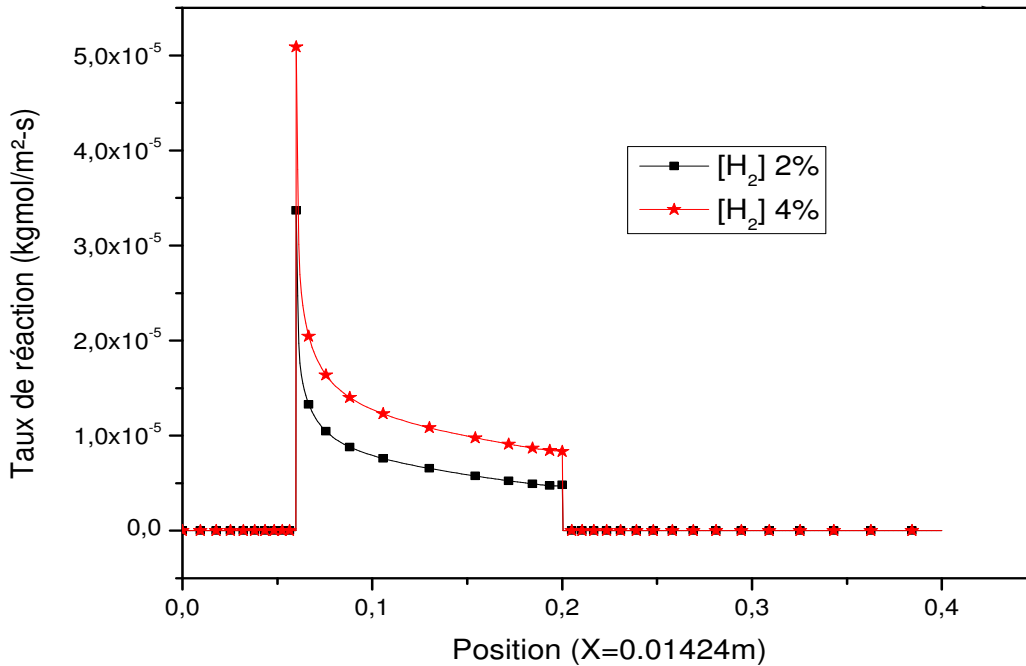


Figure 3.15 : profile de taux de réaction à la section verticale X1 sur la surface la plaque catalytique pour une fraction molaire d'hydrogène à l'entrée 2% et 4% et $T = 298$ k.

La figure (3.16) qui présente le profil de fraction molaire à la section verticale X1 pour les deux concentrations d'hydrogène 2% et 4% peut diviser en 3 zones, à la zone $[0 \text{ à } 0.6 \text{ m}]$ avant la plaque catalytique, on remarque une diminution justement de la fraction molaire jusqu'à la moitié pour les deux concentrations initiales, $[H_2] = 2 \cdot 10^{-2}$ lorsque la concentration d'entrée est 2%, et à $[H_2] = 1$ lorsque la concentration d'entrée est 4%. A la zone $[0.06 \text{ à } 0.2 \text{ m}]$ au niveau de la plaque catalytique on remarque une diminution linéaire de la concentration jusqu'à la fin de la plaque $[H_2]_{\min} = 5 \cdot 10^{-3}$ lorsque la concentration d'entrée est 2%, et $[H_2]_{\min} = 1,5 \cdot 10^{-2}$ lorsque la concentration d'entrée est 4%. Après on remarque une augmentation de la fraction molaire à la zone $[0.0 \text{ à } 0.4 \text{ m}]$ pour les deux concentrations d'entré 2% et 4% (le mélange devient homogène).

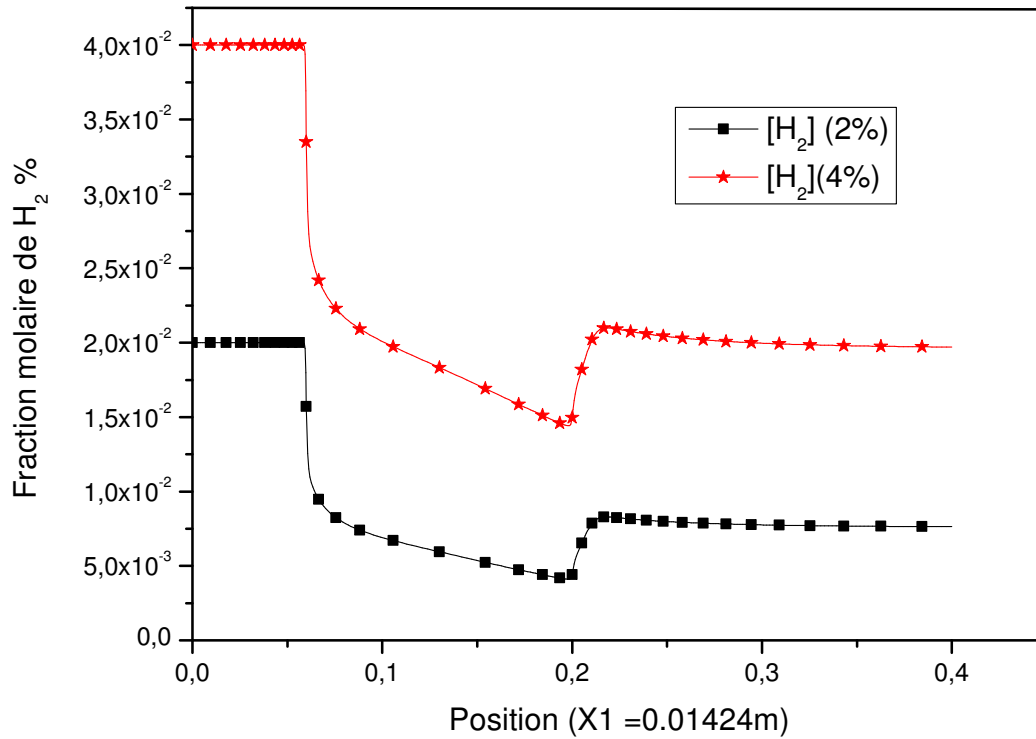


Figure 3.16 : profile de fraction molaire à la section verticale X1 sur la surface de la plaque catalytique pour une fraction molaire d'hydrogène à l'entrée 2% et 4% et $T = 298$ k.

La figure (3.17) présente profile de température au niveau horizontale Y1 au borde des plaques catalytiques pour deux concentrations 2% et 4%. On remarque une profile de température a 4 piques, chaque pique présente une plaque catalytique, on observe que la température est maximale au bord de chaque plaque catalytique. $T_{\max} = 530$ k lorsque la concentration d'hydrogène d'entrée 2% V et $T_{\max} = 425$ k lorsque la concentration d'hydrogène d'entrée à 4%V.

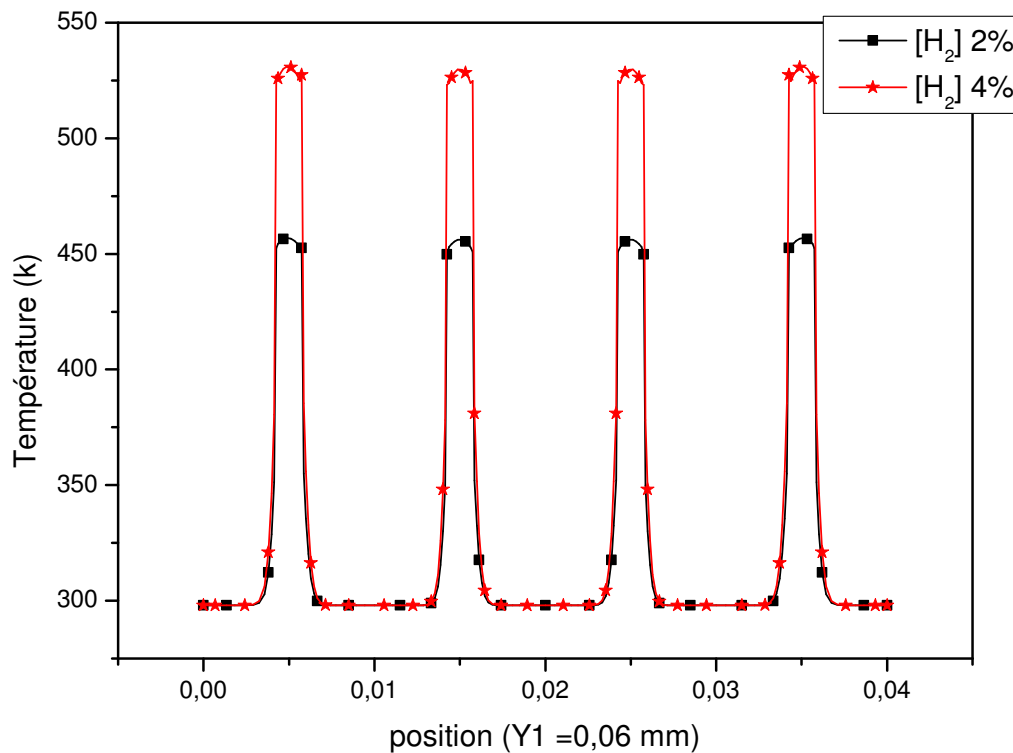


Figure 3.17: profile de température au niveau horizontale Y1 pour une fraction molaire d'hydrogène à l'entrée 2% et 4% et $T = 298$ K, $V = 0.8$ m/s.

La figure (3.18) présente profile de température au niveau horizontale Y2 juste à la fin des plaques catalytiques pour deux concentrations 2% et 4%, on remarque que la température est maximale à la sortie de chaque plaque catalytique et on observe que la température à la sortie des plaques (zone de réaction) est plus élevée que l'entrée des plaques. Lorsque la concentration d'hydrogène d'entrée 2% Vol la température maximale de la plaque atteint 570K et la température atteint 750K lorsque la concentration d'hydrogène d'entrée à 4%Vol, et on remarque que la température minimale est supérieure de 300K (le gaz est complètement chauffé).

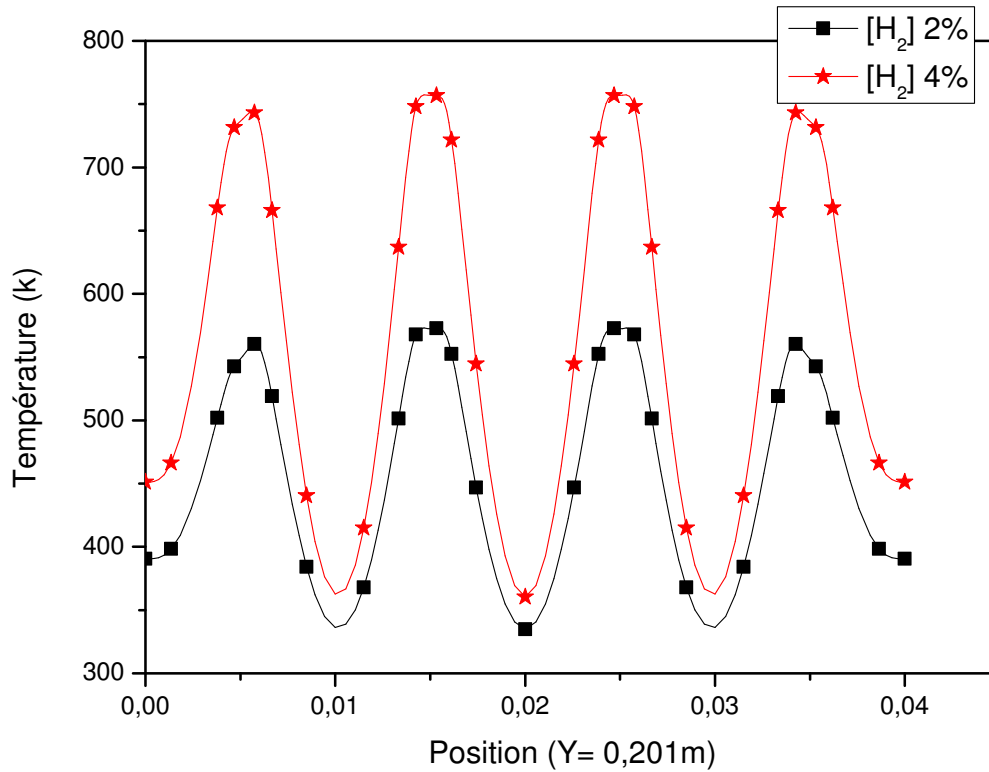


Figure 3.18 : profile de température au niveau horizontale Y2 pour une fraction molaire d'hydrogène à l'entrée égale 2% et 4%, $T = 298$ K et $V = 0.8$ m/s.

La figure (3.19) présente profile de température au niveau horizontale Y3 à la sortie de recombineur pour deux concentrations à l'entrée 2% et 4%, on remarque que la température à la sortie à Y3 de recombineur devient diminuée (mélange homogène) vers $V = 400$ m/s à 2% et $V = 665$ m/s à 4%.

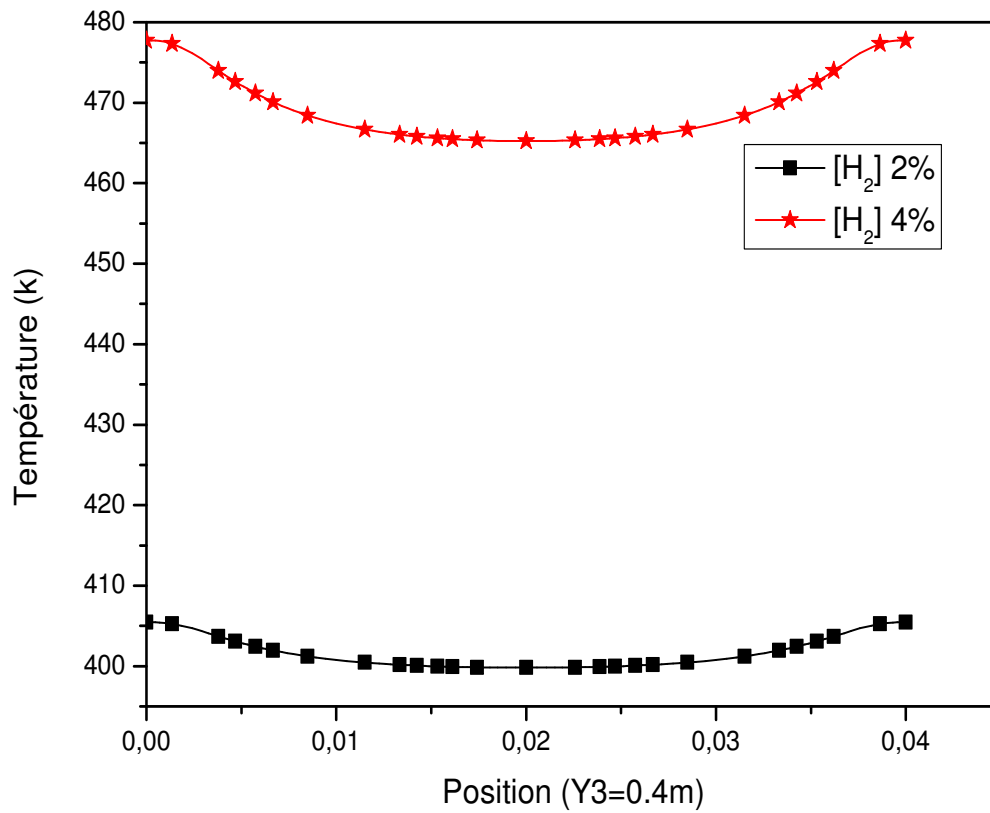


Figure 3.19 : profile de température au niveau horizontale Y3 pour une fraction molaire d'hydrogène à l'entrée égale 2% et 4%, $T = 298$ k et $V = 0.8$ m/s

La figure (3.20) présente la vitesse d'écoulement au niveau horizontale Y1 au bord de la plaque catalytique pour deux concentrations à l'entrée 2% et 4%, on remarque à l'entrée les vitesses de l'écoulement sont identiques pour les deux concertations 2% et 4%.

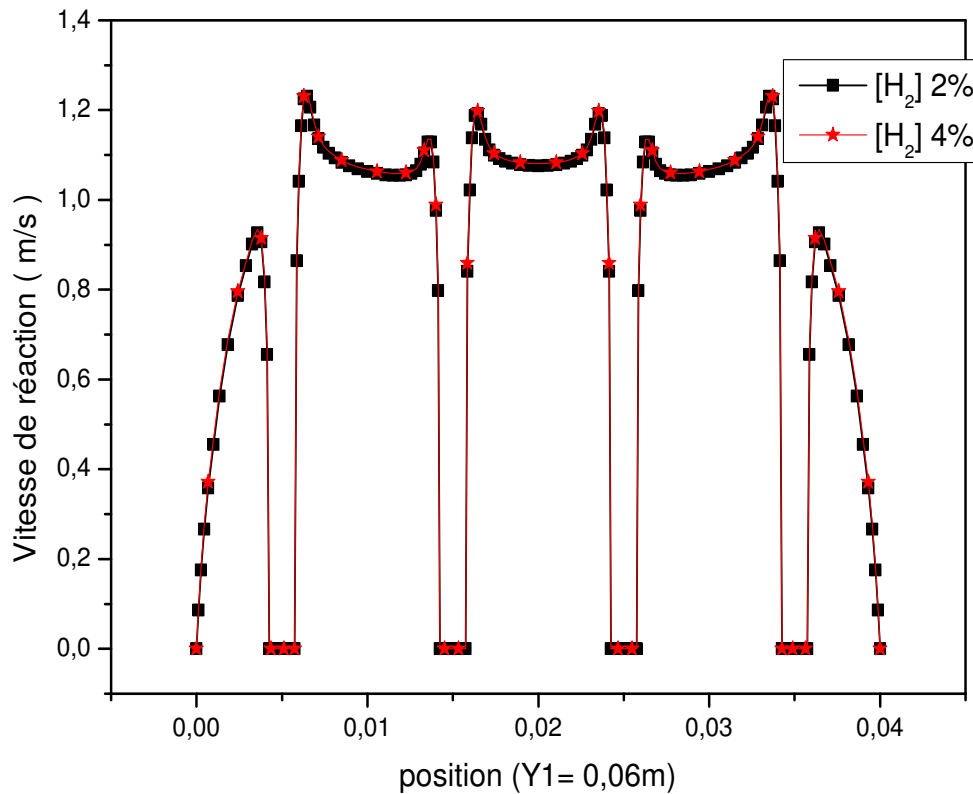


Figure 3.20 : profile de vitesse d'écoulement au niveau horizontale Y1 pour une fraction molaire d'hydrogène à l'entrée égale 2% et 4% et $T = 298 \text{ K}$ et $V = 0.8 \text{ m/s}$.

La figure (3.21) présente la vitesse d'écoulement au niveau horizontale Y2 juste à la fin des plaques catalytiques pour deux concentrations 2% et 4%, on observe que le profil de vitesse d'écoulement est l'inverse que les profils de température (le minimale vitesse sur les plaques catalytique), le développement d'écoulement donne une vitesse maximale entre les plaques catalytique de forme parabolique ($V_{\max} = 1.75 \text{ m/s}$ à 2% et $V_{\max} = 2 \text{ m/s}$ à 4%) cette augmentation jusqu'à le max, due à la transformation d'énergie exothermique à énergie dynamique (cinétique), et une vitesse nul sur les plaques catalytiques par l'effet d'adhérence .

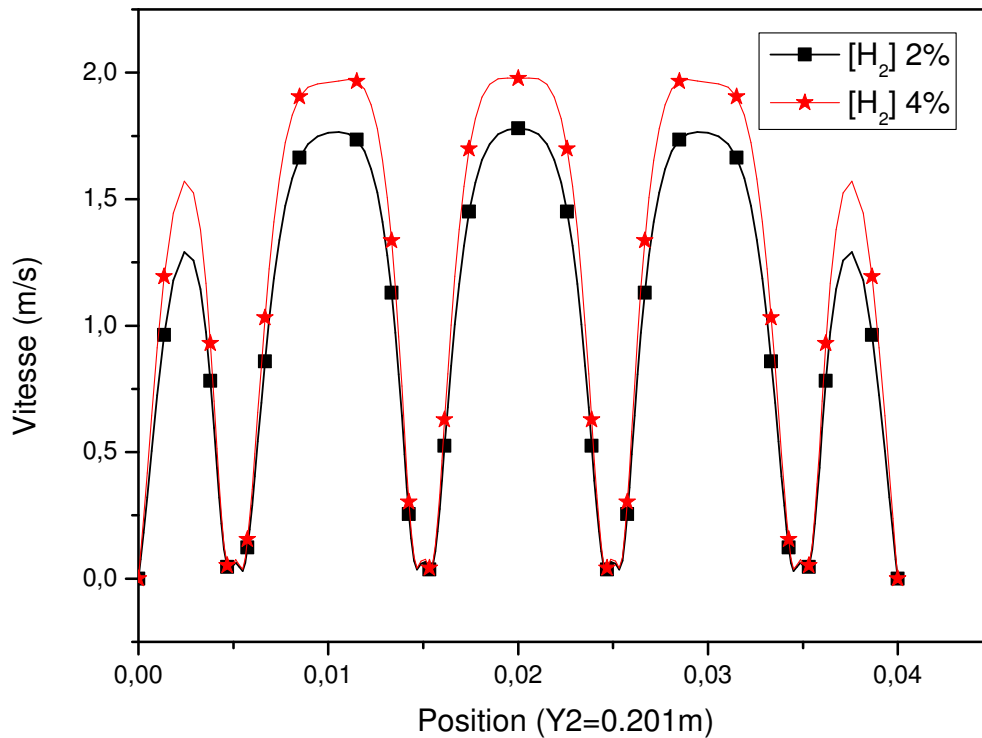


Figure 3.21 : profile de vitesse d'écoulement au niveau horizontale Y2 pour une fraction molaire d'hydrogène à l'entrée égale 2% et 4% et $T = 298$ K.

La figure (3.22) présente la vitesse d'écoulement au niveau horizontale Y3 just a la fin des plaques catalytiques pour deux concentrations 2% et 4% on remarque à la sortie de recombineur au niveau Y3 le profile parabolique de vitesse devient complet et la vitesse est lent inferieur par rapport à Y2 ($V=102$ m/s à 2% $V=1.5$ m/s à 4%), c'est due à l'expansion de la section du passage.

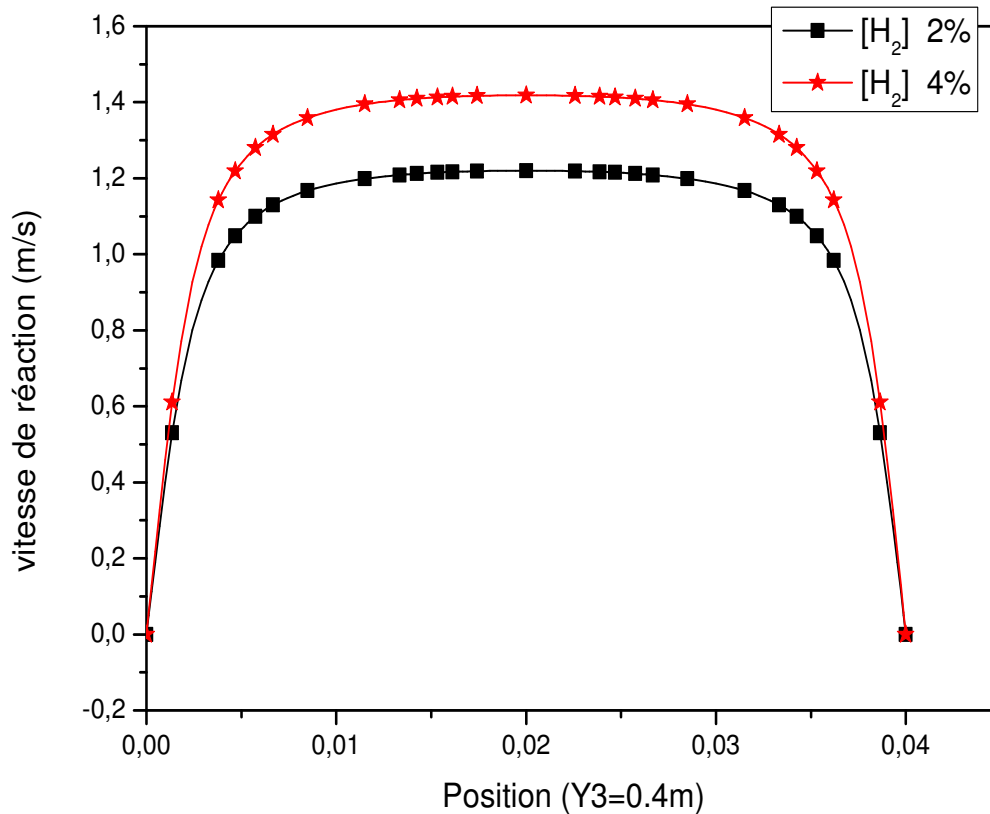


Figure 3.22 : profile de vitesse d'écoulement au niveau horizontale des plaques catalytiques (Y3) pour une fraction molaire d'hydrogène à l'entrée égale 2% et 4% et $T = 298 \text{ K}$, $V = 0.8 \text{ m/s}$.

La figure (3.23) présente le profil de fraction molaire au niveau horizontale Y1 au bord des plaques catalytiques pour les deux concentrations 2% et 4%. On remarque un profil de fraction molaire à 4 piques, chaque pique présente une plaque catalytique, on observe une consommation d'hydrogène au bord des quatre plaques catalytiques pour les deux concentrations d'entrée

$[H_2]_{\max} = 1,50 \cdot 10^{-2}$ lorsque la concentration d'entrée 2% et $[H_2]_{\max} = 3,5 \cdot 10^{-2}$ lorsque la concentration d'entrée 4%.

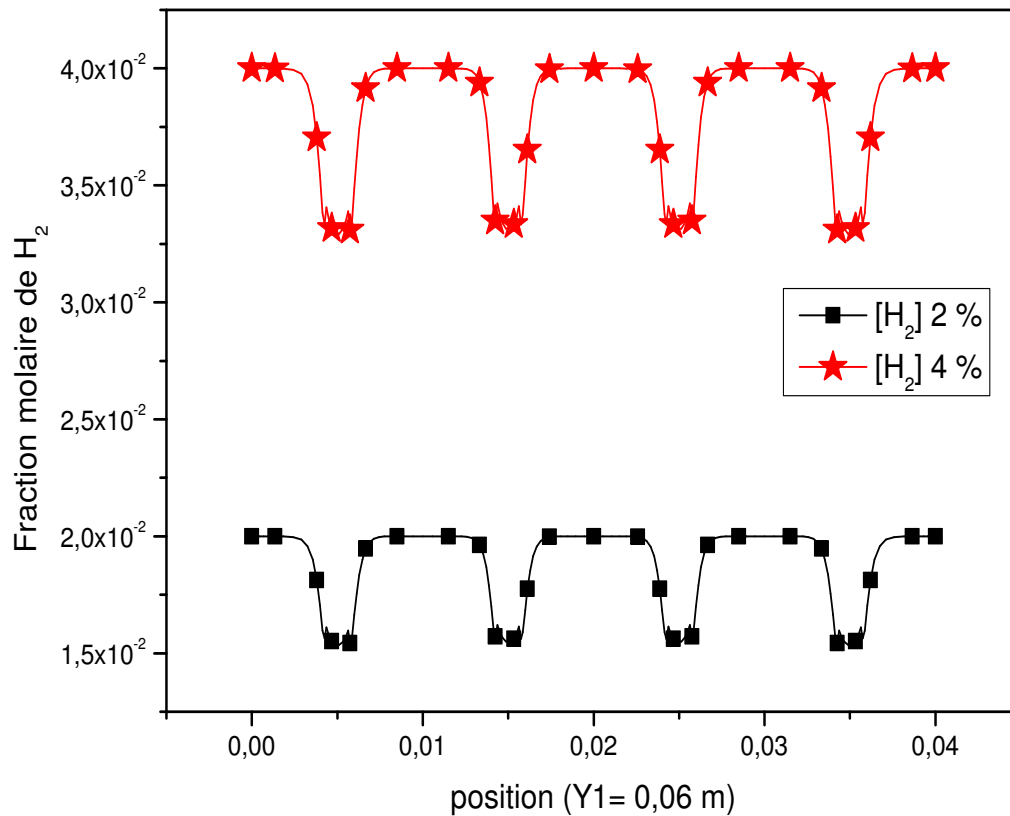


Figure 3.23: profil de fraction molaire au niveau horizontale Y1 pour une fraction molaire d'hydrogène à l'entrée 2% et 4%, $T = 298$ k et $V = 0.8$ m/s.

La figure (3.24) présente le profil de fraction molaire au niveau horizontal Y2 pour les deux concentrations 2% et 4%. On observe une consommation plus élevée d'hydrogène par rapport à Y1, $[H_2]_{\max} = 4,8 \cdot 10^{-2}$ lorsque la concentration d'entrée 2% et $[H_2]_{\max} = 1,8 \cdot 10^{-2}$ lorsque la concentration d'entrée 4% (pour la deuxième plaque catalytique).

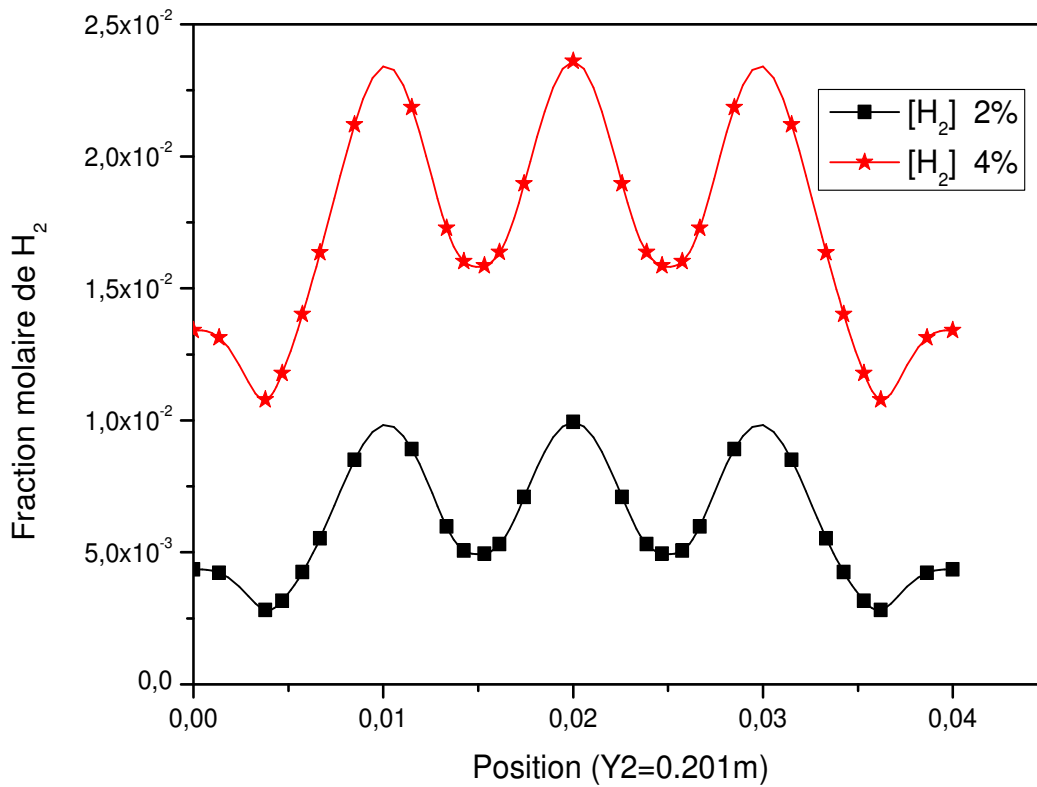


Figure 3.24: profile de fraction molaire au niveau horizontale Y2 pour une fraction molaire d'hydrogène à l'entrée égale 2% et 4%, $T = 298$ k et $V = 0.8$ m/s.

La figure (3.25) présente le profil de fraction molaire au niveau horizontal Y3 pour les deux concentrations 2% et 4%. On remarque que l'hydrogène n'ayant pas réagi totalement, toujours il y a le reste.

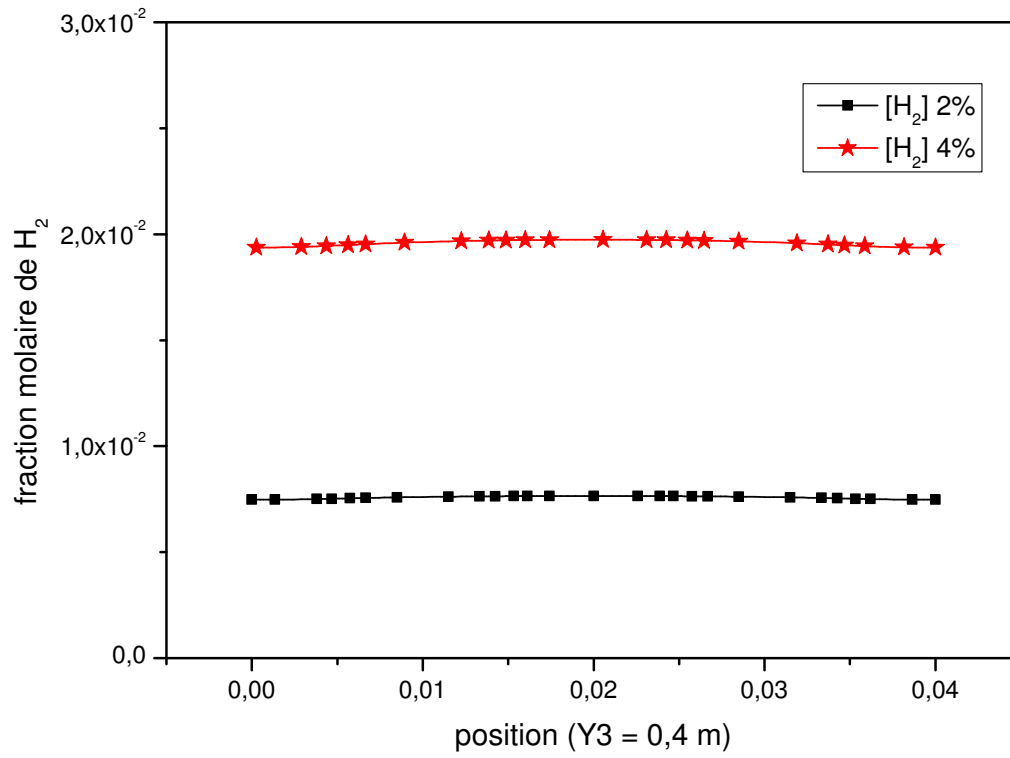


Figure 3.25: profile de fraction molaire de l'hydrogène au niveau horizontale Y_3 pour une fraction molaire d'hydrogène à l'entrée égale 2% et 4%, $T = 298 \text{ k}$ et $V=0.8\text{m/s}$.

3.4. Présentation des contours

Les figures 3.26 et 3.27, représentent les contours dans le domaine de calcul (PAR) de la fraction massique, la température et la vitesse d'écoulement pour les deux concentrations d'entrée respectivement 2% et 4%, on remarque que :

La température maximale pour une concentration d'entrée égale à 4 %Vol sur la figure (3.27) est supérieure qu'une concentration d'entrée égale à 2 %Vol sur la figure (3.26) ($T_{\max} = 623\text{K}$) pour une concentration d'entrée égale à 2 %Vol et ($T_{\max} = 846\text{K}$) pour une concentration d'entrée égale à 4 %Vol qui confirme les résultats présentés sur la figure (3.13).

Après les plaques catalytiques on remarque une homogénéisation du mélange pour 2% à toutes les variables, et pour 4% il y a un degré moins d'homogénéisation.

La consommation d'hydrogène pour une concentration d'entrée égale à 4 %Vol sur la figure (3.27) est plus élevée qu'une concentration d'entrée égale à 2 %Vol sur la figure (3.26) pour une concentration d'entrée égale à 2 %Vol, et on remarque que la concentration maximale d'hydrogène présente au partie inférieure sur les plaques catalytiques pour les deux cas de concentration d'entrée 2 % et 4%.

La vitesse d'écoulement est plus élevée entre les plaques catalytiques à la partie supérieure des plaques pour les deux cas de concentration d'entrée 2 % et 4%. Et on observe que la vitesse maximale d'écoulement pour une concentration d'entrée égale à 4 %Vol sur la figure (3.27) est plus élevée qu'une concentration d'entrée égale à 2 %Vol sur la figure (3.26).

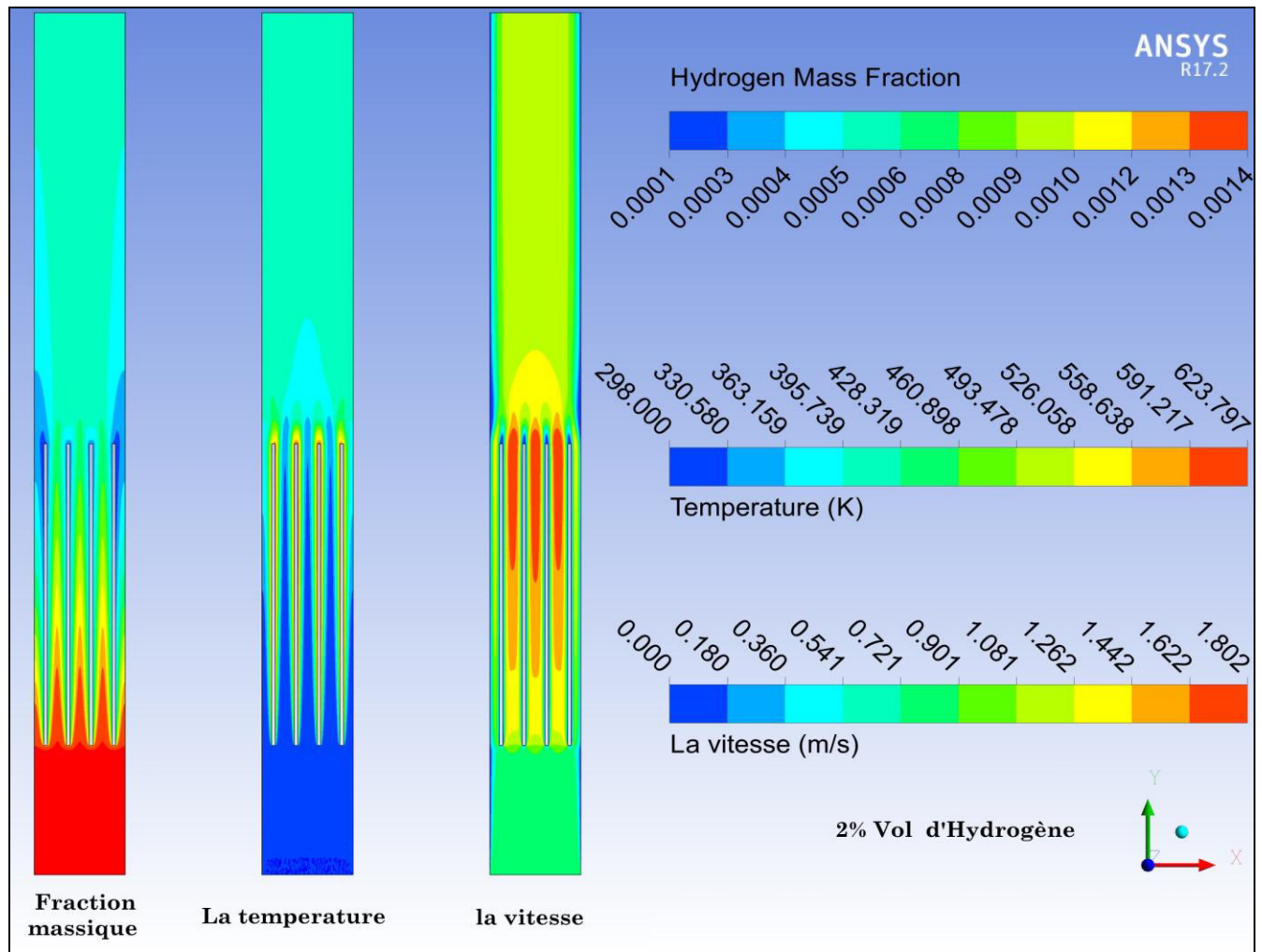


Figure 3.26 : Contour de la fraction molaire, la température et la vitesse d'écoulement dans le PAR pour une concentration d'hydrogène d'entrée égale à 2 % (Vent = 0.8 m/s et T = 298 K).

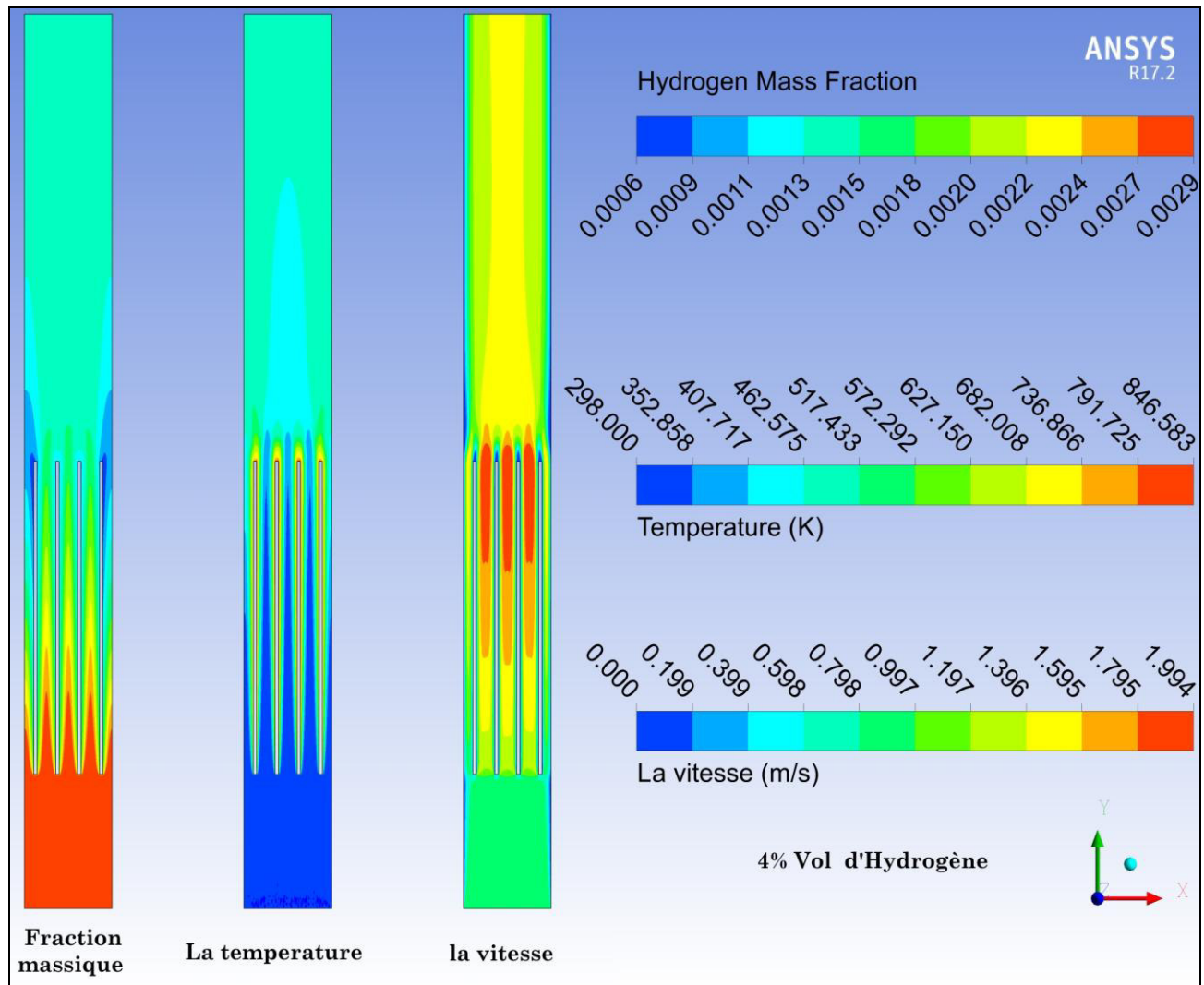


Figure 3.27: Contour de la fraction molaire, la température et la vitesse d'écoulement dans le PAR pour une concentration d'hydrogène d'entrée égale à 4 % (Vent = 0.8 m/s et T = 298 K).

3.5. Conclusion

Dans ce chapitre on a fait une étude numérique sur le comportement recombiner auto catalytique (PAR). Premièrement on a fait une étude de l'Indépendance de maillage et on a pris le meilleur maillage pour faire notre étude, la simulation que nous avons faite pour deux concentrations d'hydrogène d'entrée 2% et 4% à différentes variables et positions.

A partir de la validation des résultats présentés dans ce chapitre, la concentration d'hydrogène de 2% est mieux à 4%, et on a trouvé que les résultats de température ont besoin d'une amélioration, car dans nos simulations on n'a pas pris tous les types de transfert en considération, comme le modèle de transfert de chaleur par rayonnement qui joue un rôle important dans la prédiction de température maximale de la plaque de catalyseur, on n'a pas travaillé avec le mécanisme réactionnel (chemkin), on n'a pas manipulé les différents modèles de turbulence, on a utilisé un seul modèle basique (ke), on a déclaré des conditions idéales (système adiabatique) et il y a aussi des pertes qu'on n'a pas prises en considération.

Conclusion Générale

Dans ce mémoire nous avons présenté une étude numérique bidimensionnelle (2D) sur la modélisation numérique de recombineur d'hydrogène auto-catalytique à partir du logiciel computationnel dynamique des fluides (CFD) ANSYS-FLUENT, ce dernier se base sur la méthode de volumes finis.

Cette étude a été réalisée de but validé des travaux expérimentaux de l'expérience Reko-3 [21].

De nos résultats obtenus, on a remarqué que :

- Pour avoir un bon résultat il faut choisir le maillage qui convient à la configuration étudiée.
- L'analyse des résultats obtenus a permis d'associer élévation de température et de vitesse par l'effet des plaques catalytiques.
- La vitesse dépend à la température du catalyseur et la concentration en espèces
- Les résultats plus précis ont été obtenus pour des concentrations d'hydrogène plus faible à l'entrée de recombineur.
- L'hydrogène ne réagit pas totalement à la fin de la réaction, toujours il y a de reste.
- Un modèle de scheffer en une étape décrit bien l'oxydation catalytique de l'hydrogène dans le recombineur.

Les résultats obtenus ouvrent plusieurs perspectives qui nécessitent la poursuite de cette étude à fin d'améliorer la simulation du recombineur, nous recommandons, les points suivants :

- Applique des conditions aux limites proches de la réalité, les pertes de chaleur vers le milieu extérieur seront prises en considération et une géométrie en 3D.
- Modélisé le rayonnement thermique et la condensation de la vapeur d'eau.
- Utilise d'autre model de la turbulence tel que k-w SST ou bien LES (Large Eddy Simulation).

- On propose de l'utilisation le mécanisme de processus de recombinaison (La modélisation de réaction détaillée).
- Utilisé le mécanisme réactionnel chemkin pour configurer les réactions et les matériaux.

BIBLIOGRAPHIE :

- [1] ROBERT. BOYLE, Tracts, contenant de nouvelles expériences, touchant la relation entre la flamme et l'air, Richard Davis. Londres 1673.
- [2] CAVENDISH, Henry. XIX. Three papers, containing experiments on factitious air. Philosophical Transactions of the Royal Society of London, 1766, no 56, p. 141-184.
- [3] DEBONGNIE, Jean-François. LECONS D'ANALYSE NUMERIQUE-PREMIERE PARTIE. 2009.
- [4] HEISERMAN, D. L. Exploring Chemical Elements and their Compounds 1991.
- [5] Tendances mondiales et perspectives de M-RdValladares pour l'hydrogène, Hydrogen IEA (2017).
- [6] VEZIROGLU, T. Nejat. Et SAHIN, Sumer. L'énergie du 21e siècle : le système énergétique à l'hydrogène. Énergie Convers Manag, 2007, n ° 49-7, p. 1820-1831.
- [7] AMIRANTE, Riccardo, CASSONE, Egidio, DISTASO, Elia et al. Tour d'horizon des développements récents en matière de stockage d'énergie : technologies mécaniques, électrochimiques et hydrogène. Conversion et gestion de l'énergie, 2017, vol. 132, p. 372-387.
- [8] SHUKLA, Vikram, GANJU, Sunil, VARMA, Salil, et al. Affect of recombiner location on its performance in closed containment under dry and steam conditions. International Journal of Hydrogen Energy, 2019, vol. 44, no 47, p. 25957-25973.
- [9] HALOUANE, Y. et DEHBI, A. CFD prediction of hydrogen passive autocatalytic recombiner performance under counter-current flow conditions. International Journal of Hydrogen Energy, 2020, vol. 45, no 16, p. 10247-10256.
- [10] DEHJOURIAN, Mehdi, SAYAREH, Reza, RAHGOSHAY, Mohammad, et al. Investigation of a hydrogen mitigation system during large break loss-of-coolant accident for a two-loop pressurized water reactor. Nuclear Engineering and Technology, 2016, vol. 48, no 5, p. 1174-1183.

- [11] GHARARI, R., KAZEMINEJAD, H., KOJOURI, N. Mataji et coll. Un examen sur la production d'hydrogène, l'explosion et l'atténuation lors d'accidents graves dans les réacteurs nucléaires à eau légère. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2018, vol. 43, n ° 4, p. 1939-1965.
- [12] ROŽEŇ, Antoni. Modelling of a passive autocatalytic hydrogen recombiner—a parametric study. *Nukleonika*, 2015, vol. 60, no 1, p. 161-169.
- [13] LYU, Xuefeng, WANG, Boxue, LIU, Shuai et al. Effet sur le risque d'hydrogène de la quantité totale de gaz inerte pendant la post-inertage dans la centrale nucléaire AP1000. *Annales de l'énergie nucléaire*, 2020, vol. 140, p. 107125.
- [14] Rapport 2011. Le risque associé à l'hydrogène dans les enceintes de confinement des réacteurs du parc nucléaire français.
- [15] RAMAN, Rupak Kumar, IYER, Kannan N., et RAVVA, S. R. CFD studies of hydrogen mitigation by recombiner using correlations of reaction rates obtained from detailed mechanism. *Nuclear Engineering and Design*, 2020, vol. 360, p. 110528.
- [16] ARNOULD, F., BACHELLERIE, E., AUGLAIRE, M., et al. State of the art on hydrogen passive autocatalytic recombiner. *Proceedings of the Fission Safety (FISA'2001)*. EU research in reactor safety. Luxembourg, 2001.
- [17] [http://de.areva.com/customer/liblocal/docs/KUNDENPORTAL/PRODUKTBROSCHUERE N/Brosch%C3%BCrenach%20Nummer/008-PAR-brochure_en_Web13.pdf](http://de.areva.com/customer/liblocal/docs/KUNDENPORTAL/PRODUKTBROSCHUERE%20nach%20Nummer/008-PAR-brochure_en_Web13.pdf)
- [18] ROŽEŇ, Antoni. Simulation of start-up behaviour of a passive autocatalytic hydrogen recombiner. *Nukleonika*, 2018, vol. 63, no 2, p. 27-41
- [19] MORFIN, Franck. Combustion catalytique de l'hydrogène comme parade au risque de déflagration dans l'enceinte de confinement d'un réacteur nucléaire en situation d'accident grave: étude de l'empoisonnement des catalyseurs en atmosphère représentative. 2000. Thèse de doctorat. Lyon 1.

- [20] ORSZULIK, Magdalena, FIC, Adam, et BURY, Tomasz. CFD modeling of passive autocatalytic recombiners. *Nukleonika*, 2015, vol. 60, no 2, p. 347-353.
- [21] REINECKE, Ernst-Arndt, KELM, Stephan, STEFFEN, Paul-Martin, et al. Validation and application of the REKO-DIREKT code for the simulation of passive autocatalytic recombiner operational behavior. *Nuclear Technology*, 2016, vol. 196, no 2, p. 355-366.
- [22] SCHEFER, R. W. catalyzed combustion of H₂/air mixtures on a heated platinum plate. 1978.
- [23] SERRANO, César, JIMENEZ, Gonzalo, DEL CARMEN MOLINA, Ma, et al. Proposed methodology for Passive Autocatalytic Recombiner sizing and location for a BWR Mark-III reactor containment building. *Annals of Nuclear Energy*, 2016, vol. 94, p. 589-602.
- [24] HALOUANE, Y. et DEHBI, A. CFD simulation of hydrogen mitigation by a passive autocatalytic recombiner. *Nuclear Engineering and Design*, 2018, vol. 330, p. 488-496.
- [25] Louis nard, O, Cours de mécanique des fluides. Creative Commons, San Francisco, CA, USA, 2012. 3 : p. 1.1.
- [26] A.BELAID, H. BOUDJELAL, Etude numérique de propagation d'une flamme turbulente pré mélangée dans une enceinte fermée, Mémoire de Magistère, (2017).
- [27] KÉVIN, Galliez. Étude et compréhension du piégeage irréversible de l'hydrogène à l'aide d'un mélange MnO₂/Ag₂O. 2012. Thèse de doctorat.
- [28] WARNATZ, Jürgen, ALLENDORF, Mark D., KEE, Robert J., et al. A model of elementary chemistry and fluid mechanics in the combustion of hydrogen on platinum surfaces. *Combustion and Flame*, 1994, vol. 96, no 4, p. 393-406.

- [29] ROŽEŇ, Antoni. Simulation of start-up behaviour of a passive autocatalytic hydrogen recombiner. *Nukleonika*, 2018, vol. 63, no 2, p. 27-41.
- [30] ULLEBERG, Øystein. Modeling of advanced alkaline electrolyzers: a system simulation approach. *International journal of hydrogen energy*, 2003, vol. 28, no 1, p. 21-33.
- [31] STAMPS, Douglas W. Detonation cell widths in hydrogen-air-diluent mixtures. Sandia National Labs., 1990.
- [32] PIPERNO, Serge. systèmes hyperboliques instationnaires et methodes de type DG, (Cermics-ENPC) ,2007.
- [33] J. ZANGA, modélisation et simulation des écoulements dans la centrale hydroélectrique, mémoire présenté comme de la maîtrise en ingénierie, (2018).
- [34] A. Habbar, Polycopié non publié du cours : Les méthodes Numériques en Mécanique de Fluides. Ecole Doctorale en Mécanique, Spécialité : Simulation et Energétique. Université HASSIBA BEN BOUALI CHLEF. Année universitaire 2008/2009.
- [35] Ioan, C. (2002). Modélisation numérique du transfert thermique.
- [36] ANSYS Fluent Theory Guide.
- [37] GERA, B., SHARMA, Pavan K., et SINGH, R. K. Numerical Study of Passive Catalytic Recombiner for Hydrogen Mitigation. *CFD Letters*, 2010, vol. 2, no 3.
- [38] REINECKE, E. A., BOEHM, J., DRINOVAC, P., et al. Modelling of catalytic recombiners: Comparison of REKO-DIREKT calculations with REKO-3 experiments. In: *Proc. of Int. Conf. on Nuclear Energy for New Europe*. 2005.