



# **THESE**

Présentée à

**L'UNIVERSITE D'ORLEANS**

**Pour obtenir le grade de**

**DOCTEUR DE L'UNIVERSITE D'ORLEANS**

**Discipline : Cinétique chimique appliquée**

par

**Fabrice Malet**

**Etude expérimentale et numérique de la propagation de flammes  
prémélangées turbulentes dans une atmosphère pauvre en  
hydrogène et humide**

Thèse soutenue le 20 décembre 2005

<b>MEMBRES DU JURY :</b>		
A. BOUKHALFA	Rapporteur	Professeur à l'INSA de Rouen
H. MELLOOTTEE	Rapporteur	Directeur de Recherche à l'Université de Paris VI
P. GILLARD	Représentant de l'école doctorale	Professeur à l'Université d'Orléans
C. -E. PAILLARD	Directeur de thèse	Professeur à l'Université d'Orléans
N. CHAUMEIX	Codirecteur de thèse	Chargée de Recherche au CNRS-LCSR Orléans
A. BENTAIB	Examineur	Chercheur de l'IRSN

"Voyez-vous, dans la vie, il n'y a pas de solutions.

Il y a des forces en marche : il faut les créer.

Et les solutions suivent."

St-Exupéry

# Remerciements

Ce travail a été effectué au Laboratoire de Combustion et Systèmes Réactifs du CNRS Orléans, et financé par l'Institut de Radioprotection et de Sécurité Nucléaire, Direction de Sécurité des Réacteurs, Service des Accidents Graves, Bureau de Physique des Accidents Graves. Ce travail a été dirigé par Monsieur le Professeur Paillard à l'Université d'Orléans et Madame Chaumeix, et suivi au sein de l'IRSN par Monsieur Bentaib.

Je tiens à exprimer ma profonde gratitude à Monsieur le Professeur C.-E. Paillard, pour m'avoir accueilli dans son laboratoire, m'avoir soutenu en toutes occasions et conseillé tout au long de ces travaux de thèse.

Je tiens à remercier Monsieur le Professeur A. Boukhalfa, pour son implication dans ces travaux en acceptant la délicate mission de rapporteur de thèse.

J'exprime ma profonde gratitude à Monsieur H. Mellottée, Directeur de Recherche au CNRS, pour avoir accepté d'être lui aussi rapporteur de ma thèse. J'ai hautement apprécié son rapport riche en enseignements et en commentaires constructifs.

Je prie Monsieur le Professeur P. Gillard d'agréer ici l'expression de ma sincère reconnaissance pour l'intérêt qu'il a bien voulu marquer aux résultats de mes recherches en acceptant de faire partie de mon jury.

Je demande à Madame N. Chaumeix, Co-Directrice de thèse, de trouver dans ces quelques lignes l'expression de mes remerciements chaleureux pour l'appui qu'elle m'a prodigué, sa disponibilité et l'intérêt qu'elle n'a cessé de manifester à l'égard de ce travail.

Je tiens à remercier Monsieur A. Bentaib, Responsable du suivi de ma thèse à l'IRSN, pour ses conseils ainsi que ses explications des aspects modélisations de propagation de flamme avec TONUS.

Je remercie Messieurs Chaumont, Chef de Service, et C. Caroli, Chef de Laboratoire à l'IRSN, pour m'avoir accueilli au sein de leur unité, l'intérêt qu'ils ont apporté à ces travaux et la confiance qu'ils m'ont apporté en finançant la thèse.

Je voudrais exprimer ma gratitude à Mme N. Lamoureux pour son aide précieuse, son enseignement et ses connaissances apportés au cours des travaux expérimentaux.

J'adresse mes remerciements sincères à Messieurs P. Pailhories (CEA) et M. A. Bleyer (IRSN) pour leur dialogue constructif et l'aide technique apportée sur des points spécifiques du code TONUS.

# SOMMAIRE

INTRODUCTION.....	1
<b>1 MOTIVATIONS .....</b>	<b>2</b>
<b>2 OBJECTIFS.....</b>	<b>2</b>
<b>3 METHODOLOGIE .....</b>	<b>3</b>
<b>CHAPITRE 1 ETAT DE L'ART SUR LES FLAMMES DE PREMELANGE HYDROGENE / AIR / DILUANTS.....</b>	<b>5</b>
<b>1 INTRODUCTION.....</b>	<b>6</b>
<b>2 REGIMES DE PROPAGATION ET MODELES ASSOCIES.....</b>	<b>6</b>
2.1 DEFLAGRATION LAMINAIRE D'UN PREMELANGE.....	7
2.1.1 <i>Théorie thermique de Mallard et Le Chatelier .....</i>	7
2.1.2 <i>La théorie thermique et diffusion de Zeldovich, Frank-Kamenetsky et Semenov.....</i>	8
2.1.3 <i>Théories radicalaires, complètes. ....</i>	9
2.1.4 <i>Epaisseur de flamme .....</i>	9
2.1.5 <i>Vitesse fondamentale .....</i>	10
2.1.6 <i>Vitesse fondamentale à étirement nul .....</i>	11
2.2 DEFLAGRATION ACCELEREE PAR LA TURBULENCE.....	14
2.2.1 <i>Modèle de surface.....</i>	15
2.2.2 <i>Modèle des flammellettes .....</i>	15
2.2.3 <i>Modèle de volume .....</i>	16
2.3 VITESSE DE PROPAGATION TURBULENTE.....	16
2.4 CRITERES D'ACCELERATION DE FLAMME.....	18
2.5 TRANSITION DEFLAGRATION VERS DETONATION (TDD).....	19
<b>3 PROPRIETES DES MELANGES COMBUSTIBLES HYDROGENE-AIR.....</b>	<b>20</b>
3.1 LIMITES D'INFLAMMABILITE.....	20
3.2 LIMITES DE DETONABILITE .....	20
3.3 MODE D'INFLAMMATION .....	21
<b>4 MODELISATION NUMERIQUE.....</b>	<b>23</b>
4.1 ETABLISSEMENT DE COMPROMIS.....	23
4.2 PROBLEMATIQUE DU COUPLAGE TURBULENCE-COMBUSTION .....	25
4.2.1 <i>Problèmes intrinsèques.....</i>	25
4.2.2 <i>Interactions combustion / turbulence.....</i>	26
4.2.3 <i>Limitations .....</i>	27
4.3 DIFFERENTES APPROCHES .....	28
4.4 MODELES DE MECANIQUE DES FLUIDES TURBULENTS .....	28
4.4.1 <i>RANS + modèle "0 équation".....</i>	29
4.4.2 <i>RANS + modèle "2 équations" : <math>k-\epsilon</math>.....</i>	29
4.4.3 <i>Large Eddy Simulation (LES) .....</i>	30
4.4.4 <i>DNS.....</i>	30
4.4.5 <i>Modèles plus exotiques .....</i>	31
<b>SYSTEME DE PARTICULES .....</b>	<b>31</b>
<b>FONCTION DENSITE FILTREE .....</b>	<b>31</b>
4.5 MODELES DE COMBUSTION .....	32
4.5.1 <i>Arrhenius .....</i>	32
4.5.2 <i>PDF.....</i>	33
4.5.3 <i>G équation, systèmes de particules .....</i>	33
4.6 COUPLAGE FLAMME-TURBULENCE.....	33
4.6.1 <i>Couplages directs.....</i>	33

4.6.2	Couplages modélisés.....	34
<b>5</b>	<b>CONCLUSION.....</b>	<b>35</b>
	<b>CHAPITRE II DISPOSITIFS EXPERIMENTAUX.....</b>	<b>37</b>
<b>1</b>	<b>BOMBE SPHERIQUE .....</b>	<b>38</b>
1.1	DESCRIPTION DE L'APPAREILLAGE.....	38
1.2	PREPARATION DES MELANGES COMBUSTIBLES.....	39
1.3	MONTAGE OPTIQUE.....	39
1.4	ACQUISITION VIDEO.....	40
1.5	VITESSES SPATIALES DE PROPAGATION DE FLAMME.....	41
1.6	VITESSES NORMALES DE COMBUSTION.....	44
1.7	OUTILS DE SIMULATION.....	44
<b>2</b>	<b>ENACCEF .....</b>	<b>45</b>
2.1	DESCRIPTION DU TUBE.....	46
2.2	DESCRIPTION DU DOME.....	47
2.3	PROTOCOLE EXPERIMENTAL.....	48
2.4	DIAGNOSTICS ASSOCIES.....	49
2.5	TRAITEMENT DES DONNEES.....	49
<b>3</b>	<b>MELANGE MIMIQUE DE LA VAPEUR D'EAU.....</b>	<b>51</b>
3.1	OBJECTIF.....	51
3.2	CONTRAINTES.....	51
3.3	RESPECT DES PARAMETRES THERMODYNAMIQUES INDEPENDAMMENT DES EFFETS DE LA TEMPERATURE INITIALE.....	52
3.4	TEMPERATURE AMBIANTE RESPECTANT LE RAPPORT D'EXPANSION.....	53
3.5	RECHERCHE D'UN DILUANT SUBSTITUTIF DE H <sub>2</sub> O RESPECTANT LA VITESSE FONDAMENTALE ..	56
3.5.1	<i>Variation du rapport N<sub>2</sub>/O<sub>2</sub> dans la composition de l'air.....</i>	<i>56</i>
3.5.2	<i>Maintien de la diffusivité thermique.....</i>	<i>57</i>
3.5.3	<i>Substitution de l'azote de l'air.....</i>	<i>57</i>
3.6	CONCLUSION.....	57
	<b>CHAPITRE III VITESSES NORMALES DE COMBUSTION.....</b>	<b>58</b>
<b>1</b>	<b>OBJECTIF DES MESURES.....</b>	<b>59</b>
<b>2</b>	<b>DETERMINATION EXPERIMENTALE DES VITESSES FONDAMENTALES DE FLAMME .....</b>	<b>59</b>
2.1	VITESSE FONDAMENTALE A ETIREMENT NUL.....	59
2.2	EFFET DE L'AJOUT D'UN DILUANT SUR LES VITESSES FONDAMENTALES DE FLAMME.....	63
<b>3</b>	<b>CHOIX D'UN MODELE CINETIQUE .....</b>	<b>64</b>
<b>4</b>	<b>CALCUL DES PARAMETRES EXTRAITS DE LA MESURE DES VITESSE FONDAMENTALES.....</b>	<b>70</b>
4.1	ENERGIE GLOBALE D'ACTIVATION.....	70
4.2	NOMBRE DE ZELDOVICH $\beta$ .....	71
4.3	LONGUEUR DE MARKSTEIN.....	72
4.3.1	<i>Epaisseur de flamme.....</i>	<i>72</i>
4.3.2	<i>Mélange hydrogène-air.....</i>	<i>73</i>
4.3.3	<i>Mélange hydrogène-air-diluant.....</i>	<i>75</i>
<b>5</b>	<b>FORMULATION DE LA VITESSE FONDAMENTALE A ETIREMENT NUL EN FONCTION DES PRESSION, TEMPERATURE, COMPOSITION INITIALES.....</b>	<b>76</b>
	<b>CHAPITRE IV DEFLAGRATIONS ACCELEREES DANS UNE ENCEINTE ENCOMBREE D'OBSTACLES.....</b>	<b>78</b>
<b>1</b>	<b>ENACCEF .....</b>	<b>79</b>
<b>2</b>	<b>INFLUENCE DU TAUX DE BLOCAGE DES OBSTACLES .....</b>	<b>79</b>
<b>3</b>	<b>INFLUENCE DE LA FORME DES OBSTACLES.....</b>	<b>83</b>

<b>4</b>	<b>INFLUENCE DE LA COMPOSITION .....</b>	<b>85</b>
<b>5</b>	<b>GRADIENTS DE CONCENTRATION.....</b>	<b>89</b>
5.1	GRADIENTS DISCONTINUS .....	90
5.2	GRADIENTS CONTINUS .....	91
5.3	GRADIENT FORT, EVOLUTION TEMPORELLE .....	93
<b>6</b>	<b>CRITERE D'ACCELERATION DE FLAMME.....</b>	<b>96</b>
6.1	CLASSIFICATION DES FLAMMES.....	96
6.2	CRITERE BASE SUR LE COEFFICIENT D'EXPANSION DES GAZ BRULES.....	97
6.2.1	<i>Effet de la composition initiale</i> .....	98
6.2.2	<i>Effet de l'encombrement de l'enceinte</i> .....	99
<b>7</b>	<b>CONCLUSION.....</b>	<b>101</b>
<b>CHAPITRE V SIMULATION NUMERIQUE DE LA PROPAGATION DE LA FLAMME....</b>		<b>102</b>
<b>1</b>	<b>DESCRIPTION DU CODE TONUS .....</b>	<b>103</b>
1.1	MECANIQUE DES FLUIDES .....	103
1.2	MODELE DE COMBUSTION : CREBCOM.....	104
1.3	ÉTAT D'AVANCEMENT DE LA COMBUSTION .....	105
1.4	SEUIL D'INFLAMMATION $\varepsilon$ .....	105
1.5	TAUX NUMERIQUE DE COMBUSTION $K_0$ .....	105
1.6	ISOTROPIE DE MAILLAGE.....	106
<b>2</b>	<b>MODELISATION DE LA BOMBE SPHERIQUE - COMPARAISON</b>	
<b>EXPERIENCE/CALCUL.....</b>		<b>107</b>
2.1	MAILLAGE, SUIVI DE LA POSITION DE FLAMME .....	107
2.2	MODIFICATION DU MODE D'ALLUMAGE.....	109
2.3	DETERMINATION DE LA VITESSE NUMERIQUE DE COMBUSTION.....	112
2.4	CONCLUSION DE LA SIMULATION DE LA BOMBE SPHERIQUE.....	115
<b>3</b>	<b>MODELISATION ENACCEF (TUBE VERTICAL) - COMPARAISON</b>	
<b>EXPERIENCE/CODE.....</b>		<b>115</b>
3.1	MAILLAGE.....	116
3.2	ESTIMATION DE LA TURBULENCE ET SIMULATION DE PROPAGATION.....	117
3.3	INFLUENCE DU TAUX DE BLOCAGE : 0,65, 0,43 ET 0.....	120
3.4	INFLUENCES DES PERTES THERMIQUES.....	121
3.5	INFLUENCE DE LA FINESSE DE MAILLAGE SUR L'ACCELERATION DE LA FLAMME .....	123
<b>4</b>	<b>CONCLUSION.....</b>	<b>124</b>
<b>CONCLUSION .....</b>		<b>126</b>
<b>REFERENCES.....</b>		<b>130</b>

# Liste des figures

Figure 1 : Théorie de Mallard et Le Chatelier, profil de température d'une flamme laminaire.....	8
Figure 2 : Diagramme de Borghi.....	14
Figure 3 : Diagramme de Shapiro [52] pour les mélanges hydrogène-air -vapeur d'eau.....	21
Figure 4 : Allumage par étincelle, énergie nécessaire en fonction de l'écartement des électrodes.....	22
Figure 5 : Energie minimale d'inflammation des mélanges hydrogène-air pour différentes pressions initiales, d'après Belles [55] et Berman [56].....	23
Figure 6 : Energie minimale d'inflammation et distance de coincement pour différents mélanges $H_2-O_2$ -diluants à pression atmosphérique d'après Lewis et von Elbe [].....	23
Figure 7 : Système d'inflammation couplé à la bombe sphérique. ....	39
Figure 8 : Schéma du dispositif de visualisation de la flamme par la méthode Schlieren. ....	40
Figure 9 : Images enregistrées par la caméra numérique rapide à différentes cadences d'acquisition. ....	41
Figure 10 : Propagation asymétrique d'une flamme dans le cas d'un mélange constitué de 8 % $H_2$ + 92 % Air initialement à température ambiante et pour une pression initiale de 200 kPa.....	41
Figure 11 : Illustration du choix du rayon de la flamme pour différents formats d'images. ....	42
Figure 12 : Evolution du rayon de la flamme en fonction du temps pour un mélange constitué initialement de 40 % d'hydrogène dans l'air (richesse $\Phi = 1,667$ ). La pression initiale est de 200 kPa et la température initiale est de 298 K.....	42
Figure 13 : Evolution de la vitesse spatiale de propagation de flamme en fonction du rayon de la flamme pour un mélange constitué initialement de 40 % d'hydrogène dans l'air ( $\Phi = 1,667$ ). La pression initiale est de 200 kPa et la température initiale est de 298 K.....	43
Figure 14 : Evolution de la vitesse spatiale de propagation de flamme en fonction de l'étirement pour un mélange constitué initialement de 40 % d'hydrogène dans l'air ( $\Phi = 1,667$ ). La pression initiale est de 200 kPa et la température initiale est de 298 K.....	44
Figure 15 : Vue d'ensemble de l'enceinte ENACCEF.....	46
Figure 16 : Vue d'ensemble d'un assemblage d'obstacles annulaires.....	47
Figure 17 : Grilles de taux de blocage 0,6.....	47
Figure 18 : Section du tube accueillant les fenêtres en quartz. ....	47
Figure 19 : Schéma de l'obstacle central (simili GV). ....	47
Figure 20 : Schéma de l'enceinte supérieure ou dôme.....	48
Figure 21 : Exemple de détection de position de flamme par émission lumineuse recueillie par les photomultiplicateurs dans la zone des obstacles. Le mélange initial contient 13 % d'hydrogène dans l'air, à température ambiante et pression de 100 kPa. Le tube est équipé de 9 anneaux caractérisés par un taux de blocage de 0,63. ....	50
Figure 22 : Exemple de détection de position de flamme par onde de pression recueillie par les capteurs de chocs dans la zone des obstacles. Le mélange initial contient 13 % d'hydrogène dans l'air, à température ambiante et pression de 100 kPa. Le tube est dépourvu d'obstacle et l'inflammation a lieu dans le dôme. ....	50
Figure 23 : superposition des profils de position du front de flamme en fonction du temps, obtenus à partir des signaux de pression et signaux lumineux. ....	50
Figure 24 : Evolution des différents paramètres thermodynamiques et de transport en fonction de la température initiale (a) : la capacité calorifique du mélange de gaz frais ; (b) : diffusivité thermique ; (c) diffusion de l'hydrogène dans le mélange ; (d) viscosité.....	53

Figure 25 : Effet du rapport d'équivalence, $\phi$ , sur la capacité calorifique, la diffusivité thermique, le nombre de Lewis et la température de flamme dans le cas d'un mélange de référence $H_2$ – air dilué à 30 % par la vapeur d'eau et chauffé à 353 K. ....	55
Figure 26 : Vitesse fondamentale de flamme en fonction de la richesse, comparaison des courbes de résultats simulés, de l'expérience et des valeurs de la littérature à pression initiale de 100 kPa et température initiale de 298 K. ....	60
Figure 27 : Vitesse fondamentale de flamme en fonction de la richesse, comparaison des courbes de l'expérience et des valeurs de la littérature à pression initiale de 200 kPa et température initiale de 298 K. ....	61
Figure 28 : Vitesse fondamentale de flamme en fonction de la richesse, expériences à pression initiale de 500 kPa. ....	61
Figure 29 : Séquence de propagation de flamme dans la bombe sphérique : plissement de la flamme pauvre à 200 et 500 kPa. Température initiale de 298 K. Mélange réactif : 30 % $H_2$ , 56 % $N_2$ , 14 % $O_2$ . ....	62
Figure 30 : Evolution de la vitesse normale de combustion à étirement nul en fonction de la richesse pour des mélanges $H_2/O_2/He$ à température ambiante. (a) Effet de la substitution de l'hélium par l'azote, (b) Effet de la pression initiale. ....	63
Figure 31 : Evolution de la vitesse normale de combustion en fonction de la richesse des mélanges $H_2/O_2/N_2$ dilués par le mélange mimique constitué de 60 % $CO_2$ et 40 % $He$ à température ambiante et 200 kPa. ....	63
Figure 32 : Evolution de la vitesse normale de combustion à étirement nul en fonction de la richesse des mélanges $H_2/O_2/N_2$ dilués par (a) 10 % et (b) 20 % de mélange mimique constitué de 60 % $CO_2$ + 40 % $He$ . Effet de la pression initiale à température ambiante. ....	64
Figure 33 : Vitesse fondamentale de flamme en fonction de la teneur en hydrogène dans l'air à différentes pressions initiales. L'air est, ici, constitué de 20 % $O_2$ + 80 % $N_2$ . ....	65
Figure 34 : Vitesses normales de combustion en fonction de la teneur en hydrogène dans le mélange à différentes pressions initiales. Résultats de simulation obtenus en utilisant le modèle cinétique détaillé du GRI3.0 [6]. ....	66
Figure 35 : Vitesses normales de combustion en fonction de la teneur en hydrogène dans le mélange à différentes pressions initiales et à température ambiante. Résultats de simulation obtenus en utilisant le modèle cinétique détaillé de Marinov et coll. [5]. ....	67
Figure 36 : Vitesses normales de combustion en fonction de la teneur en hydrogène dans le mélange dilué par l'azote à différentes pressions initiales et à température ambiante. (a) Simulation avec le modèle du GRI3.0 [6]. (b) Simulation avec le modèle de Marinov et coll. [5]. ....	68
Figure 37 : Etude de sensibilité sur la vitesse normale de combustion avec un mélange contenant 16 % $H_2$ + 16,8 % $O_2$ + 67,2 % $N_2$ à température ambiante et différentes pressions initiales, mécanisme GRI3.0 modifié. ....	69
Figure 38 : Etude de sensibilité sur la vitesse normale de combustion avec un mélange contenant 33,33 % $H_2$ + 13,33 % $O_2$ + 53,34 % $N_2$ à température ambiante et différentes pressions initiales, mécanisme GRI3.0 modifié. ....	69
Figure 39 : Energie d'activation de mélanges $H_2$ -air à température ambiante en fonction de la richesse. Comparaison avec la littérature. ....	70
Figure 40 : Energie d'activation de mélanges $H_2$ -air à température ambiante en fonction de la richesse. Influence de la pression initiale selon l'équation 7. ....	71
Figure 41 : Nombre de Zeldovich en fonction de la richesse, pour des mélanges $H_2$ -air à température initiale ambiante et pression initiale de 101 kPa. ....	72
Figure 42 : Nombre de Zeldovich en fonction de la richesse, pour des mélanges $H_2$ -air à température initiale ambiante et pression initiale de 200 et 500 kPa. ....	72
Figure 43 : Epaisseur de flamme en fonction de la richesse pour des mélanges $H_2$ -air initialement à température ambiante et pression 100 kPa. $\alpha$ est la diffusivité thermique et $D_{(H_2/mixt)}$ est le coefficient de diffusion massique dans le mélange. ....	73
Figure 44 : Paramètres b et k en fonction de la richesse. Comparaison avec la littérature. À température ambiante et pression 100 kPa. ....	74

<i>Figure 45 : Longueur de Markstein en fonction de la richesse, pour des mélanges H<sub>2</sub>-air, initialement à température ambiante et pression de 100 kPa.</i>	74
<i>Figure 46 : Longueur de Markstein en fonction de la richesse, pour des mélanges H<sub>2</sub>-air, initialement à température ambiante et pression de 200 et 500 kPa.</i>	75
<i>Figure 47 : Longueur de Markstein en fonction de la richesse, à 100 kPa, à température ambiante, pour un mélange H<sub>2</sub>-air dilué par un mélange (60 % CO<sub>2</sub> + 40 % He).</i>	75
<i>Figure 48 : Longueur de Markstein en fonction de la richesse, à 100 kPa, à température de 353 K, pour un mélange H<sub>2</sub>-air dilué par de la vapeur d'eau.</i>	76
<i>Figure 49 : Influence du taux de blocage sur le profil de vitesse de flamme le long de l'installation ENACCEF. Obstacles annulaires, 13 % H<sub>2</sub> / air sec, 100 kPa, 293 K.</i>	80
<i>Figure 50 : Influence du taux de blocage sur le profil de vitesse de flamme le long de l'installation ENACCEF. Obstacles annulaires, 10,5 % H<sub>2</sub> / air sec, 100 kPa, 293 K.</i>	80
<i>Figure 51 : Influence de la composition sur le profil de vitesse de flamme le long de l'installation ENACCEF, pour un taux de blocage de 0,63. Pression et température initiales de 100 kPa et 293 K.</i>	81
<i>Figure 52 : Influence de la composition sur le profil de vitesse de flamme le long de l'installation ENACCEF, pour un taux de blocage de 0,50. Pression et température initiales de 100 kPa et 293 K.</i>	82
<i>Figure 53 : Influence de la composition sur le profil de vitesse de flamme le long de l'installation ENACCEF, pour un taux de blocage de 0,40. Pression et température initiales de 100 kPa et 293 K.</i>	82
<i>Figure 54 : Influence de la composition sur le profil de vitesse de flamme le long de l'installation ENACCEF, pour un taux de blocage de 0,33. Pression et température initiales de 100 kPa et 293 K.</i>	83
<i>Figure 55 : Influence de la forme des obstacles sur le profil de vitesse de flamme le long de l'installation ENACCEF, pour un mélange contenant 10,5 % H<sub>2</sub>. Taux de blocage : 0,6 pour la grille et de 0,63 pour les anneaux. Pression et température initiales de 100 kPa et 293 K.</i>	84
<i>Figure 56 : Influence de la forme des obstacles sur le profil de vitesse de flamme le long de l'installation ENACCEF, pour un mélange contenant 11,5 % H<sub>2</sub>. Taux de blocage : 0,6 pour la grille et de 0,63 pour les anneaux. Pression et température initiales de 100 kPa et 293 K.</i>	84
<i>Figure 57 : Influence de la forme des obstacles sur le profil de vitesse de flamme le long de l'installation ENACCEF, pour un mélange contenant 13 % H<sub>2</sub>. Taux de blocage : 0,6 pour la grille et de 0,63 pour les anneaux. Pression et température initiales de 100 kPa et 293 K.</i>	85
<i>Figure 58 : Influence de la composition sur le profil de vitesse de flamme le long de l'installation ENACCEF. Obstacles annulaires, taux de blocage de 0,63. Pression et température initiales de 100 kPa et 298 K.</i>	86
<i>Figure 59 : Influence de la dilution sur le profil de vitesse de flamme le long de l'installation ENACCEF. Obstacles annulaires, taux de blocage de 0,63. Pression et température initiales de 100 kPa et 298 K.</i>	88
<i>Figure 60 : Influence de la composition sur le profil de vitesse de flamme le long de l'installation ENACCEF, à richesse constante à 0,294 et divers taux de diluant et oxygène. Obstacles annulaires BR = 0,63, 13 % H<sub>2</sub> – air sec, 100 kPa, 293 K.</i>	89
<i>Figure 61 : Influence de la présence d'une membrane sur le profil de vitesse de flamme dans ENACCEF. Mélange de 13 % hydrogène/air dans le dôme et le tube.</i>	90
<i>Figure 62 : Propagation de flamme en présence d'une membrane. Mélange 13 % H<sub>2</sub> dans le tube et le dôme, 9 obstacles annulaires, membrane terphane 8 μm. PCB1 : capteur de pression en haut du dôme, PCB2 en haut du tube d'accélération et en dessous de la membrane, photomultiplicateur 6 en face du PCB2.</i>	91
<i>Figure 63 : Profils de concentration en hydrogène le long du tube muni de 9 obstacles annulaires (BR = 0,63), avant combustion.</i>	92
<i>Figure 64 : Profils de concentration en hydrogène le long du tube muni ou non de 9 obstacles annulaires (BR = 0,63), avant combustion, pour un gradient 13 % H<sub>2</sub> tube – 10,5 % H<sub>2</sub> dôme.</i>	92
<i>Figure 65 : Comparaison de profils de vitesse de flamme dans ENACCEF pour divers gradients continus, dont la composition de fond de tube est contante à 13 % hydrogène /air. 9 obstacles annulaires de taux de blocage 0,63.</i>	93

Figure 66 : Profils de concentration en hydrogène le long du tube lisse, avant combustion, pour un gradient 18 % H <sub>2</sub> tube – 8 % H <sub>2</sub> dôme. ....	94
Figure 67 : Profil de propagation d'une flamme dans ENACCEF en présence d'un fort gradient de concentration (18 % H <sub>2</sub> tube – 8 % H <sub>2</sub> dôme). Tube lisse.....	95
Figure 68 : Evolution temporelle du gradient de concentration en hydrogène, à 1,527 m du point d'allumage, après rupture de la membrane et pour un fort gradient de concentration (18 % H <sub>2</sub> tube – 8 % H <sub>2</sub> dôme). ....	95
Figure 69 : Critère d'accélération de flamme : rapport de vitesse maximale de flamme sur la vitesse du son dans les gaz frais en fonction du taux d'expansion thermique. ENACCEF est muni de 9 obstacles annulaires de taux de blocage de 0,63. Les compositions rapportées mentionnent la teneur en hydrogène, en diluant "pseudo-vapeur d'eau", et le rapport N <sub>2</sub> /O <sub>2</sub> . ....	97
Figure 70 : Critère d'accélération de flamme : taux d'expansion thermique en fonction du paramètre de stabilité de flamme $\beta$ .(Le-1). ENACCEF est muni de 9 obstacles annulaires de taux de blocage de 0,63. Les compositions rapportées mentionnent la teneur en hydrogène, en diluant "pseudo-vapeur d'eau", et le rapport N <sub>2</sub> /O <sub>2</sub> . ....	98
Figure 71 : Vitesse maximale de propagation des flammes (en sortie du champ d'obstacles équidistants) normalisée par la vitesse du son dans les gaz brûlés en fonction du rapport de blocage des obstacles. Les symboles pleins représentent les cas de flammes coincées. ....	100
Figure 72 : Caractérisation des flammes H <sub>2</sub> -air se propageant dans l'enceinte ENACCEF encombrée de 9 obstacles équidistants de 154 mm, selon $\sigma$ et $l/\delta$ .....	101
Figure 73 : Exemple d'une fonction de couplage entre la vitesse numérique de combustion et la turbulence représentée par le rotationnel de la vitesse des gaz frais : $K_0 = f(\text{rot}(u)) * K_{0\text{lamininaire}}$ .....	106
Figure 74 : Modélisation TONUS bombe sphérique - Evolution de la position du front de flamme et de la pression dans l'enceinte au cours du temps, pendant les premiers instants de propagation. ....	108
Figure 75 : Estimation du front de flamme basé sur $\xi$ .....	109
Figure 76 : Modélisation TONUS bombe sphérique - Capteurs de pression lors d'un allumage classique.....	111
Figure 77 : Modélisation TONUS bombe sphérique - Capteurs de pression lors d'une propagation sans surpression initiale.....	111
Figure 78 : Modélisation TONUS bombe sphérique - Capteurs de pression lors d'une propagation avec dépression dans la maille d'allumage. ....	111
Figure 79 : Modélisation TONUS bombe sphérique - Capteurs de pression, homogénéité spatiale pendant toute la simulation.....	112
Figure 80 : Modélisation TONUS bombe sphérique – Corrélation entre les $K_0$ obtenus par dichotomie et la richesse. ....	114
Figure 81 : Modélisation TONUS bombe sphérique – Vitesse spatiale en fonction de la richesse, validation code/expérience de la corrélation établie en 2.3 p. 112.....	115
Figure 82 : Modélisation TONUS d'ENACCEF – Vitesse spatiale en fonction de la position, influence de la valeur de $K_0$ , comparaison du code et de l'expérience. ....	118
Figure 83 : Modélisation TONUS d'ENACCEF – Vitesse spatiale en fonction de la position, influence de la valeur de $K_0$ , comparaison point à point du code et de l'expérience. ....	120
Figure 84 : Modélisation TONUS d'ENACCEF – Vitesse spatiale en fonction de la position, influence du taux de blocage.....	121
Figure 85 : Modélisation TONUS d'ENACCEF - Vitesse spatiale en fonction de la position, influence des pertes thermiques (puits énergétique).....	122
Figure 86 : modélisation TONUS d'ENACCEF – Coupe du champ d'avancement de réaction, zone d'accélération par obstruction, pour un maillage très fin (DM = 0,005 m). ....	123
Figure 87 : Modélisation TONUS d'ENACCEF – Vitesse spatiale en fonction de la position, influence de la taille des mailles.....	124

# Liste des Tableaux

Tableau 1 : Corrélations expérimentales publiées donnant la vitesse fondamentale turbulente en fonction de la vitesse fondamentale à éirement nul et de la turbulence.....	17
Tableau 2 : Composition des mélanges mimiques permettant de maintenir les mêmes valeurs du rapport d'expansion que celles des mélanges de référence. Le mélange est constitué de $(1-x) [H_2 + air] + x$ Diluant. ...	54
Tableau 3 : Energie d'activation globale pour divers mélanges à base d'hydrogène.....	70
Tableau 4 : Coefficients polynomiaux intervenant dans la formulation de l'énergie globale d'activation $E_a$ ( $P, T, \Phi$ ).....	71
Tableau 5 : Conditions expérimentales des études. ....	76
Tableau 6 : Surpression maximale enregistrée par le capteur PCB2 en fonction du taux de blocage. Capteur positionné en haut du dôme, à 4,88 m de l'étincelle. Le mélange (13 % $H_2$ / air sec) est initialement à 100 kPa et 293 K.....	81
Tableau 7 : Surpression maximale enregistrée par le capteur PCB2 en fonction de la forme des obstacles. Capteur positionné en haut du dôme, à 4,88 m de l'étincelle. Le mélange (13 % $H_2$ / air sec) est initialement à 100 kPa et 293 K.....	85
Tableau 8 : Coefficient d'expansion thermique pour divers mélanges utilisés dans ENACCEF. Le diluant est constitué de (60 % $CO_2$ + 40 % He).....	87
Tableau 9 : Composition des mélanges injectés dans le tube et le dôme pour former des gradients de concentration dans ENACCEF. ....	91
Tableau 10 : Paramètres des mélanges étudiés ( $\phi$ : rapport d'équivalence, $\sigma$ : rapport d'expansion, $C_{st}$ et $C_{sp}$ : vitesse ( $m.s^{-1}$ ) du son respectivement dans les gaz frais et gaz brûlés, $\beta$ : nombre de Zeldovich, $T_f$ : température (K) adiabatique de flamme, $S_f^\circ$ : vitesse fondamentale de flamme ( $m.s^{-1}$ ), $Ma_b$ : nombre de Markstein des gaz brûlés. Les mélanges sont composés de $x H_2 + y$ (0,6 $CO_2$ + 0,4 He) + $(1-x-y)(1/(1+z) O_2 + z/(1+z) N_2)$ .....	97
Tableau 11 : Valeurs du $\sigma^*$ pour différentes compositions des mélanges $H_2$ -air à température ambiante. $\phi$ est le rapport d'équivalence, $\sigma$ , le rapport d'expansion, $T_f$ , la température adiabatique de flamme, $Ma_b$ , le nombre de Markstein dans les gaz brûlés, $\beta$ , le nombre de Zeldovich, $Le$ , le nombre de Lewis, $\sigma^*(\beta(Le-1))$ et $\sigma^*(x)$ les valeurs de $\sigma^*$ calculées à partir des équations [14] et [15], respectivement. ....	99
Tableau 12 : Dimension caractéristique, $l$ , des obstacles en fonction de leur forme et de leur rapport de blocage. ....	99
Tableau 13 : Valeurs de $K_0$ reproduisant les profils de vitesse en bombe sphérique, valeurs obtenues par dichotomie (en gras) et vérification d'une corrélation issue de cette étude.....	113
Tableau 14 : Grille de paramètres de maillage lors des études de finesse de maillage et taux de blocage.....	116
Tableau 15 : Iso-contours de profils longitudinaux de température pendant la propagation. Mélange combustible de 13 % d'hydrogène dans l'air. Température et pression initiales égales à 298 K et 100 kPa respectivement.....	119

# **INTRODUCTION**

# 1 Motivations

Les travaux s'inscrivent dans le cadre des études concernant l'évaluation du risque associé à la libération d'hydrogène pendant la phase de dégradation du cœur du réacteur dans les Réacteurs à Eau Pressurisée (REP) en situation d'accident grave. Ces dernières années, un regain d'intérêt concernant l'étude des différents modes de combustion de l'hydrogène s'est manifesté particulièrement pour la sûreté des installations nucléaires.

En effet, les accidents graves de Three Miles Island aux Etats-Unis et de Tchernobyl dans l'ex-URSS ont mis en évidence l'aggravation potentielle de l'accident suite à la formation d'un prémélange hydrogène-air. Le risque hydrogène peut être défini comme le risque de perte d'intégrité de l'enceinte de confinement ou de détérioration des systèmes de sécurité, suite à une combustion d'hydrogène émis au cours de l'accident.

Lorsqu'une flamme de prémélange se propage au sein du milieu gazeux, elle peut suivre deux modes de propagation : un mode lent, appelé déflagration, où la vitesse des gaz frais par rapport au front de flamme est subsonique et un mode rapide, appelé détonation, où cette vitesse devient supersonique. Les scénarios impliquant des détonations ont été l'objet de recherches antérieures. Si les détonations impliquent des montées en charge des plus destructrices pour les bâtiments, les conditions d'énergie et de concentration nécessaires sont restrictives. Les détonations ne couvrent alors qu'une faible probabilité parmi les scénarios potentiels. Dans certains cas une propagation en régime de déflagration peut se retrouver presque aussi destructrice qu'une détonation tout en requérant des conditions moins restrictives et beaucoup plus représentatives des accidents graves en centrale nucléaire. C'est le cas lorsqu'une déflagration est susceptible d'être fortement accélérée par la présence d'obstacles répétés et que la vitesse de propagation de la flamme approche la vitesse du son dans les gaz frais.

Une meilleure compréhension des phénomènes impliqués dans les mécanismes de combustion et de leurs interactions avec l'écoulement des gaz au sein de l'enceinte de confinement est nécessaire afin de mieux appréhender ce risque hydrogène.

# 2 Objectifs

La capacité destructive d'un prémélange à base d'hydrogène dépend de plusieurs facteurs, qui vont conditionner différents comportements. Dans certaines conditions la vitesse spatiale de propagation d'une déflagration peut s'accroître considérablement, sans toutefois atteindre le couplage entre la zone réactionnelle et l'onde de choc, c'est-à-dire sans qu'il y ait transition vers la détonation. Ces déflagrations fortement accélérées peuvent exercer des effets très destructeurs sur les parois de l'enceinte de confinement.

Ce phénomène d'accélération de flamme peut être lié à la géométrie du confinement, à la présence d'obstacles, ou à l'existence d'un gradient de concentration d'un réactif dans le mélange initial. Les conditions d'obtention d'une détonation auto-entretenue, dans le cas des mélanges à base d'hydrogène sont relativement bien connues (en terme de composition, d'énergie d'initiation...), ainsi que les conditions de transition de la déflagration vers la détonation.

Selon les conditions initiales et la géométrie du système, des corrélations entre cinétique chimique et paramètres dynamiques permettent de prédire si une détonation est susceptible de se produire. Par contre les conditions d'obtention des flammes fortement accélérées sans pour autant aboutir à une détonation sont plus difficiles à définir. En effet, des critères globaux basés soit sur les propriétés du mélange réactif (nombre de Zeldovich, facteur d'expansion des gaz brûlés, vitesse fondamentale de flamme...), soit sur la turbulence générée par les obstacles (forme, rapport de blocage...) ne semblent pas suffisants à eux seuls à la prédiction de ce type de régime. De plus, l'impact de la présence d'un gradient de concentration sur la propagation de la flamme et sur le régime atteint par cette dernière est mal connu. Il en est de même pour l'importance de la localisation du point d'inflammation, pouvant engendrer un effet de piston des gaz brûlés contribuant à accélérer la propagation de la flamme dans l'enceinte.

L'objectif de la thèse est triple. Il s'agit :

- (1) d'obtenir des données sur les paramètres fondamentaux de flamme d'hydrogène en tenant compte des dernières avancées sur la théorie de propagation de flammes.
- (2) de réaliser des expériences sur la propagation de flammes accélérées, dans des conditions représentatives de cas d'accidents graves en centrale nucléaire à eau pressurisée et d'en déduire des critères d'accélération forte pour les systèmes à base d'hydrogène.
- (3) d'améliorer un code numérique de combustion développé pour l'IRSN en validant ces améliorations sur la base de données obtenues avec deux installations mises en place au LCSR au CNRS Orléans : la bombe sphérique et "ENACCEF" (ENceinte d'ACCElération de Flamme").

### 3 Méthodologie

L'ordre de présentation de ce présent mémoire correspond à celui du plan de travail de cette étude.

L'état de l'art sur la combustion de l'hydrogène est présenté dans le premier chapitre. Dans un premier temps, les notions essentielles sur les propagations des flammes seront rappelées : modèles relatifs aux flammes laminaires, théories et corrélations expérimentales des flammes turbulentes. Dans un deuxième temps seront rassemblées les données relatives aux propriétés explosives des mélanges hydrogène-air-diluant (sécurité, vitesses de propagation laminaire et turbulente). La troisième partie est consacrée à la modélisation numérique de la propagation des flammes, dans l'optique de déterminer avantages et inconvénients de certaines approches et de pouvoir éventuellement en faire bénéficier le code TONUS.

Le deuxième chapitre du mémoire abordera la description des dispositifs expérimentaux utilisés : la bombe sphérique pour l'obtention des données fondamentales sur les flammes laminaires et l'ENceinte d'ACCElération de Flamme (ENACCEF) pour l'analyse de la propagation des flammes dans un milieu encombré d'obstacles.

Les résultats des études expérimentales sur les flammes laminaires et leur interprétation seront exposés dans le troisième chapitre du mémoire. Dans cette partie sera présenté l'effet d'étirement de la flamme sur l'évaluation de la vitesse normale de combustion. Un modèle cinétique détaillé sera validé à partir de la détermination des vitesses

de flammes laminaires. Les mesures expérimentales couplées aux calculs numériques auront pour but l'évaluation de paramètres cinétiques globaux et la détermination de corrélations entre vitesse normale de combustion, pression, température et composition initiales. Ces corrélations pourront être utilisées dans le code TONUS.

Le quatrième chapitre portera sur l'étude des propagations accélérées de flamme dans une structure encombrée d'obstacles : ENACCEF. Les aspects évalués au cours de ces travaux de thèse porteront sur l'influence du taux de blocage, de la forme des obstacles, de la composition et de l'homogénéité du mélange sur l'évolution des vitesses spatiales. Des critères d'accélération de flamme seront recherchés.

Le travail sur la modélisation des propagations de flammes avec TONUS fera l'objet du cinquième chapitre. Le code TONUS y sera présenté, notamment les équations impliquées dans la mécanique des fluides ainsi que celles du modèle de combustion CREBCOM. Les résultats et améliorations du code seront ensuite abordés pour la modélisation et la validation, successivement de propagations laminaires en bombe sphérique et de flammes accélérées dans l'enceinte ENACCEF.

# **CHAPITRE 1**

## **ETAT DE L'ART SUR**

### **LES FLAMMES DE PREMELANGE**

#### **HYDROGENE / AIR / DILUANTS**

# 1 INTRODUCTION

Les détonations des mélanges à base d'hydrogène (dites à faible probabilité mais hauts risques) ont fait l'objet de nombreuses études. Elles ne seront pas détaillées dans ce chapitre. Les déflagrations fortement accélérées constituent un cas particulier où les données sont beaucoup plus rares. Les flammes pauvres hydrogène-air sont propices à ces accélérations fortes même si celles-ci ne peuvent transiter vers la détonation auto-entretenu. Elles sont au centre de cette étude.

Plusieurs paramètres peuvent avoir une influence non négligeable sur la propagation d'une flamme et son accélération. Cela rend difficile la prédiction de l'impact de l'explosion d'un mélange à base d'hydrogène sur des structures.

Ainsi sur l'évolution de la propagation interviennent :

- les conditions initiales du mélange (compositions, pression, température, existence de gradients de concentration)
- la géométrie de l'enceinte, son encombrement, son degré de confinement
- les conditions d'allumage (l'énergie d'amorçage, son mode de libération et l'emplacement du point d'inflammation dans l'enceinte)

Nous commencerons par rappeler quelques notions élémentaires sur la propagation des flammes dans les mélanges gazeux combustibles avant de passer aux propriétés explosives propres aux mélanges à base d'hydrogène.

## 2 Régimes de propagation et modèles associés

Deux modes de propagation d'une flamme peuvent être distingués, par ordre croissant de vitesse spatiale : la déflagration, de vitesse subsonique par rapport aux gaz frais, et la détonation de célérité supersonique. Dans une déflagration, l'écoulement des gaz à travers le front de flamme peut être laminaire ou turbulent. En régime laminaire, la vitesse des gaz frais par rapport au front de flamme dans une direction normale à celui-ci est une grandeur caractéristique de ces gaz frais et donc une propriété intrinsèque du mélange. En régime turbulent la vitesse de propagation de la flamme dépendra de l'intensité de cette turbulence qui peut être produite par la flamme elle-même ou avoir d'autres causes.

Les flammes les plus lentes sont les flammes laminaires. Elles prennent naissance lorsqu'elles sont initiées par des sources faibles. Si l'allumage est ponctuel en milieu libre, la propagation de la flamme est alors sphérique. L'étude de telles flammes permet la détermination d'une valeur caractéristique du mélange combustible : la vitesse normale de combustion. Cette détermination est utile aussi pour valider les modèles cinétiques détaillés inclus dans les codes de calcul de vitesse de flamme laminaire et de leur structure.

Les déflagrations dites fortement accélérées correspondent à une vitesse de flamme supérieure à la moitié de la vitesse du son dans les gaz brûlés. Elles sont reliées à l'intensité de la turbulence qui dépend elle-même fortement de la géométrie du confinement et de la présence d'obstacles. Le problème est de savoir jusqu'à quel niveau d'accélération peut être portée une flamme de mélange de composition donnée.

Plusieurs phases transitoires sont différenciées dans la littérature entre flamme laminaire et détonation. Les flammes laminaires voient ainsi leur limite avec l'apparition d'instabilités du front de flamme qui se plisse puis s'épaississent. Ces aspects sont décrits dans la suite de l'étude bibliographique.

A la limite de la déflagration et la détonation nous distinguons deux régimes de propagation : le régime choqué et la quasi-détonation. Le régime choqué est la limite supérieure de vitesse atteinte par une déflagration accélérée [1 §2.2.3] mais n'ayant pas encore transité vers une détonation. La vitesse de propagation de la flamme est supérieure à celle du son dans les gaz frais mais inférieure à celle du son dans les gaz brûlés. Ce régime de propagation est instable et souvent précurseur d'une transition déflagration-détonation.

La quasi-détonation est en fait une détonation se déplaçant, en présence d'obstacles, à une vitesse nettement inférieure à la théorie Chapman-Jouguet [1 §2.2.4]. La différence de vitesse est due principalement à un frein de l'écoulement auquel il faut ajouter une correction par pertes thermiques aux parois pour les régimes à faibles vitesses [2].

Nous traiterons successivement dans ce paragraphe des déflagrations laminaires, des déflagrations turbulentes et de la transition de la déflagration vers la détonation.

## **2.1 Déflagration laminaire d'un prémélange**

Les études portant sur la combustion laminaire de l'hydrogène dans divers mélanges gazeux sont nombreuses. Elles ont notamment permis de mettre en évidence les trois aspects fondamentaux de la déflagration (laminaire ou turbulente) : diffusion thermique, diffusion de matière et réaction chimique.

La zone délimitant le mélange combustible des gaz brûlés est appelée front de flamme. Selon les trois théories les plus répandues, le front de flamme inclut tout ou partie des phénomènes fondamentaux.

### **2.1.1 Théorie thermique de Mallard et Le Chatelier**

La théorie de Mallard et Le Chatelier (1882) implique un contrôle de la propagation de la flamme par les transferts thermiques. Deux zones sont différenciées : une zone de préchauffage des gaz combustibles, puis lorsque la température d'inflammation est atteinte, une zone de réaction et donc de dégagement de chaleur (Figure 1). La température d'inflammation est toutefois subjective car non clairement identifiable. Ce modèle présente l'avantage de sa simplicité et est représentatif de certains mélanges.

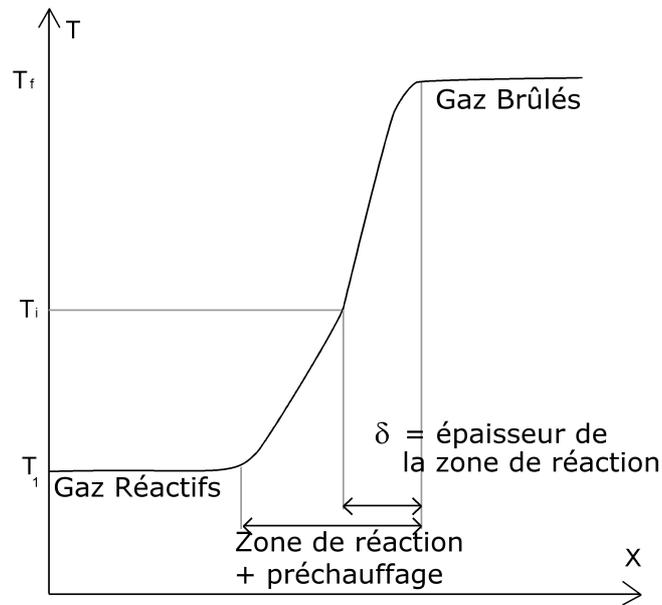


Figure 1 : Théorie de Mallard et Le Chatelier, profil de température d'une flamme laminaire.

Le principal résultat déductible de la théorie de Mallard et Le Chatelier est la relation entre la vitesse fondamentale et la vitesse globale de la réaction chimique :

$$S_l^o \approx \sqrt{\alpha \cdot \dot{\omega}}$$

où  $\dot{\omega}$  est la vitesse de réaction chimique exprimée en taux de conversion par unité de temps,  $\alpha = \frac{\lambda}{\rho \cdot C_p}$  est la diffusivité thermique qui est le rapport entre la conductivité thermique  $\lambda$  et la densité  $\rho$  multipliée par la capacité calorifique  $C_p$ .

Si la vitesse de la réaction chimique suit une loi d'Arrhenius la constante de vitesse s'écrit  $k = A \exp\left(-\frac{E_a}{R \cdot T}\right)$

où  $T$  est la température considérée comme étant proche de la température adiabatique de flamme,  $E_a$  est l'énergie d'activation globale de la réaction et  $A$  une constante.

### 2.1.2 La théorie thermique et diffusion de Zeldovich, Frank-Kamenetsky et Semenov

La théorie de Zeldovich, Frank-Kamenetsky et Semenov se base sur celle de Mallard et le Chatelier mais inclut en outre la diffusion des espèces. La vitesse de réaction est établie selon une loi exponentielle ce qui amène la température d'inflammation très proche de la température de flamme et permet donc de la négliger. Ainsi la température d'inflammation n'intervient plus dans les calculs finals.

Dans le cas où les nombres de Schmidt ( $Sc = \frac{\mu}{\rho \cdot D}$ ) et Prandtl ( $Pr = \frac{\mu \cdot C_p}{\lambda}$ ) sont égaux à 1, une solution analytique est possible donnant la vitesse fondamentale à étirement nul :

$$S_l^\circ = \sqrt{\frac{2\lambda \cdot C_{p,f}^n \cdot Z' \cdot n_r^{n-1}}{\rho_0 \cdot \bar{C}_p^{n+1}} \cdot \left(\frac{n_r}{n_p}\right)^n \cdot \left(\frac{A}{B}\right)^n \cdot \left(\frac{R \cdot T^2}{E_a}\right)^{n+1} \cdot \left(\frac{e^{-\frac{E_a}{R \cdot T_f}}}{(T_f - T_0)^{n+1}}\right)}$$

Le nombre de Lewis ( $Le = \frac{\alpha}{D}$ ) est supposé égal au rapport A/B.

$n_r$  et  $n_p$  sont respectivement les nombres de moles des réactifs et des produits,  $\bar{C}_p$  est la capacité calorifique moyenne entre  $T_0$  et  $T_f$ ,  $n$  est l'ordre de la réaction,  $Z'$  est le facteur pré-exponentiel de la loi d'Arrhenius,  $E_a$  est l'énergie d'activation,  $\mu$  est la viscosité dynamique et  $D$  le coefficient de diffusion massique.

D'autre part, De Charentenay et Ern [3] ont récemment effectué des simulations afin de valider des travaux antérieurs sur les limites des théories thermiques. Ils ont également précisé les corrections apportées par la prise en compte des aspects diffusifs.

### 2.1.3 Théories radicalaires, complètes.

La théorie de diffusion radicalaire ne fait intervenir que la cinétique chimique et la diffusion des espèces radicalaires. L'utilisation de mécanismes détaillés s'est imposée à la suite du constat qu'un modèle mono équation pouvait éventuellement convenir à des mélanges riches mais pas à des mélanges pauvres [4]. À cause de la complexité de la chimie détaillée, même pour la combustion de l'hydrogène (Marinov et coll. [5], Gaz Research Institute : GRI3.0 [6]), les calculs nécessitent une approche informatisée. Ainsi Iki et coll. [7] ont-ils proposé en 1997 des travaux numériques sur la cinétique de combustion de mélanges hydrogène-air-vapeur d'eau, en examinant notamment l'influence de la pression sur la vitesse de flamme.

Les théories complètes font intervenir les trois aspects, ce qui induit une résolution beaucoup plus complexe. Les temps de calculs nécessaires sont importants. Elles permettent toutefois de mieux cerner la compétition entre la cinétique chimique et les aspects thermiques. Zsely et Turanyi [8] ont ainsi effectué des travaux comparatifs en faisant varier la richesse du mélange hydrogène-air, pour divers types de propagation, en tenant compte ou non des aspects thermiques.

### 2.1.4 Epaisseur de flamme

L'épaisseur de flamme étant une tentative de discrétisation d'un phénomène continu, de nombreuses définitions sont actuellement utilisées dans la littérature. Deux approches se dégagent néanmoins :

Approche diffusionnelle (par exemple Aung et coll. [9])

$$\delta = \frac{D_{H_2/N_2}}{S_l}, \text{ avec } S_l \text{ vitesse fondamentale}$$

Approche thermique (Zeldovich et Frank-Kamenetsky)

$\delta_p = \frac{\alpha}{S_l^0}$  correspond à l'épaisseur de la zone de préchauffage. Elle est reliée à

l'épaisseur de la zone réactionnelle  $\delta_r$  par le nombre de Zeldovich  $\beta$  :

$$\delta_r = \delta_p / \beta \quad \text{et} \quad \beta = \frac{E_a}{R.T_b^2} \cdot (T_b - T_u) \quad , \quad \beta \text{ étant très grand devant } 1, \delta_r \text{ est}$$

très petit devant  $\delta_p$ .

D'autres approches, aux différences moins marquées, sont présentées dans divers articles de la littérature ([9], [10], [11], [12], [13]). Ceci met en évidence la difficulté aussi bien théorique qu'expérimentale que représente la caractérisation d'une épaisseur de flamme.

Une autre grandeur, dérivée de l'épaisseur de flamme, est le temps de résidence (de la flamme en un point donné). Quelle que soit la notion d'épaisseur de flamme retenue, le temps de résidence est le rapport entre cette épaisseur et la vitesse fondamentale à étirement nul.

$$\tau_c = \frac{\delta}{S_l^0}$$

### 2.1.5 Vitesse fondamentale

Un des principaux intérêts de l'étude des propriétés d'une flamme dans certaines conditions est l'obtention d'une vitesse de propagation en l'absence de toute perturbation. Dans le cas d'un prémélange, un front de flamme se propage d'une zone de gaz brûlés vers les gaz frais qui sont combustibles. Dans le cas idéal de flamme laminaire plate, la vitesse de progression de la flamme, vers les gaz frais, est appelée vitesse fondamentale.

Il y a deux grands groupes de mesure de vitesse fondamentale selon que la flamme est stationnaire ou qu'elle est en déplacement par rapport au référentiel du laboratoire. Plusieurs dispositifs expérimentaux ont donc été élaborés afin de permettre l'étude des flammes laminaires :

- le brûleur classique (flamme quasi conique), à flamme plate, à jets opposés, doubles flammes opposées pour les flammes stationnaires,
- la bombe sphérique et la bulle de savon pour les flammes en déplacement.
- d'autres systèmes expérimentaux plus originaux consistent souvent en variantes de ces techniques.

L'étirement de la flamme est plus ou moins présent dans chacun de ces systèmes, mais de manière différente. Lorsque la propagation est sphérique, la zone réactionnelle est modifiée au cours du temps. En présence de brûleur, le flux de réactif en amont de la flamme peut être perturbé.

Nous développerons plus en détail les systèmes à propagation sphérique, méthode qui a été choisie lors de ces travaux.

La vitesse fondamentale de propagation d'un front de flamme est définie comme la vitesse de ce front se déplaçant vers le prémélange combustible. Dans le cas de détermination de vitesse fondamentale sur brûleur à flamme plate, l'expansion thermique provoquée par le dégagement de chaleur n'a pas de conséquence sur la vitesse mesurée. Dans un cas idéal et en régime permanent la flamme est immobile : la vitesse fondamentale de combustion est égale à la vitesse moyenne du mélange combustible arrivant sur la flamme.

Dans les cas de flamme en propagation sphérique, la vitesse fondamentale est différente de la vitesse spatiale en raison du changement des conditions thermodynamiques de part et d'autres du front de flamme. Le dégagement de chaleur dû à la réaction chimique implique une augmentation de température et donc de volume molaire. Il en résulte que la vitesse de propagation observée, qui est la dérivée temporelle de la position de la flamme, est la somme de la vitesse fondamentale et de la vitesse d'entraînement engendrée par l'expansion thermique.

$$V_s = u_g + u_n$$

où  $u_n$  représente la vitesse des gaz frais induite par l'expansion de la flamme.

Ceci est appelé l'effet piston et est caractérisé, pour un mélange et des conditions données, par le taux d'expansion, déterminable thermodynamiquement :

$$\sigma = \frac{\rho_b}{\rho_u} \text{ avec } \rho_b \text{ densité dans les gaz brûlés, } \rho_u \text{ densité dans les gaz réactifs.}$$

Dans le cas d'une flamme laminaire infiniment mince en propagation sphérique ou équivalent, Bradley et coll. [14] ont établi une formule générale :  $S_L = \frac{\rho_b}{\rho_u} \left( V_s + \frac{r_b}{3P_b} \frac{dP_b}{dt} \right)$

Dans le cas de propagation en enceinte fermée comme une bombe sphérique, l'augmentation de pression due à l'expansion thermique des gaz derrière la flamme intervient dans l'estimation de la vitesse fondamentale. Toutefois dans les études publiées utilisant une bombe sphérique (Bradley [13], Lamoureux [10], Koroll [15]), l'évolution du front de flamme observé correspond à un volume brûlé très faible face au volume total de l'enceinte. La vitesse de propagation de la flamme étant déduite des tout premiers instants de propagation, cela permet de négliger le terme de correction de pression.

La mesure de vitesse fondamentale reposant sur les hypothèses d'une flamme laminaire sphérique infiniment mince a donné lieu, pour les flammes d'hydrogène, à de nombreuses études. Les influences de la composition, de la pression et de la température sont connues depuis relativement longtemps. Toutefois, la plupart de ces études expérimentales considéraient les flammes comme parfaites car infiniment minces. L'introduction de la notion d'étirement a bouleversé ces connaissances.

### 2.1.6 Vitesse fondamentale à étirement nul

Si les études sur la vitesse fondamentale en fonction des conditions chimiques et physiques sont assez anciennes, elles ont toutefois été remises en cause par les travaux portant sur l'étirement de la flamme. L'analyse de Landau [16] a notamment montré que les flammes sont toujours plus ou moins étirées à l'échelle de l'épaisseur du front de flamme. En effet une flamme plate est intrinsèquement instable et tend à se déformer. Markstein [17] a ensuite introduit au sein de la notion d'étirement les effets de rayon de courbure sur la structure du front de flamme. Il a mis en évidence que la vitesse fondamentale de combustion varie linéairement avec l'inverse du rayon de courbure de la zone réactionnelle :

$$u_n - S_l^0 = S_l^0 \cdot \frac{L'}{R}$$

$L'$  étant une grandeur caractéristique, de l'ordre de l'épaisseur du front de flamme,  $R$  étant le rayon de courbure de la zone réactionnelle.

Karlovitz et coll. [18] ont généralisé le concept d'étirement en terme de variation relative de la surface de flamme  $A$  :

$$K = \frac{1}{A} * \frac{dA}{dt}$$

De nombreuses études théoriques ont vu le jour ensuite. Williams [19], Sivashinsky [20], Buckmaster [21], Clavin et Williams [22], Matalon et Matkowsky [23] ont mis en évidence la relation entre la vitesse fondamentale et le taux de combustion.

L'introduction de l'étirement a eu pour conséquence la nécessité de reprendre les expériences avec une approche différente. Les influences des paramètres tels que la pression, la température et l'humidité ont dû ainsi être réévaluées.

L'étirement  $K$  (stretch) caractérise le taux d'accroissement de la surface de la flamme selon la formule  $K = \frac{1}{A} * \frac{dA}{dt}$  ( $s^{-1}$ ). Suite aux travaux de Clavin et Joulin [24], Bradley et coll. ont proposé [14] [25] une décomposition en fonction du rayon de courbure et en fonction du cisaillement.

$$K = K_s + K_c = 2 \frac{u_g}{r_u} + 2 \frac{S_L}{r_u}$$

L'étirement peut être étudié pour des géométries de flamme définies. Des brûleurs à flamme plate ont ainsi été conçus afin d'obtenir une flamme stabilisée avec le minimum d'étirement. Ils présentent toutefois l'inconvénient d'être peu adiabatiques, les gaz réactifs étant chauffés par le brûleur avant d'arriver dans la flamme. Kwon et coll. [11] ont montré que l'étude des flammes pauvres sur brûleur est également plus difficile qu'avec des méthodes de propagation (bombe sphérique, bulle de savon, double noyau), réduisant la plage de richesse expérimentalement accessible.

Lorsque la flamme présente une géométrie sphérique, par exemple dans une bombe expérimentale, l'étirement induit par l'augmentation de rayon est alors mathématiquement

calculable à tout instant / position :  $K = \frac{2}{r_f} * \left( \frac{dr_f}{dt} \right)$

Markstein [26] puis Clavin [27] ont établi, sous réserve d'un étirement ne compromettant pas la stabilité de la flamme, une relation linéaire entre la vitesse fondamentale observée à l'instant  $t$  (notée  $S_L$ ) et celle à étirement nul ( $S_L^0$ ) :

$$S_L^0 - S_L = \frac{L}{\sigma} * K$$

Il est ainsi possible d'obtenir une vitesse fondamentale à étirement nul (notée  $S_L^0$ ), devenue la valeur de référence. L'influence de l'étirement sur la vitesse de propagation d'un front de flamme dans un prémélange traduit l'effet de deux flux opposés : celui de la diffusion de masse et celui de la diffusion thermique.

Ainsi le nombre de Markstein ( $Ma$ ) définit l'accélération d'une flamme soumise à un étirement caractérisé par  $Ka$ , le nombre de Karlovitz. Ce dernier met en compétition le temps caractéristique de résidence et le temps caractéristique d'étirement. Il est également

interprétable comme l'influence des structures tourbillonnaires de plus petite échelle sur la vitesse de réaction chimique observée :

$$S_L / S_L^0 = 1 - Ma * Ka$$

avec  $Ka = K * \frac{\delta^\circ}{S_L}$

et  $Ma_x = \frac{L}{\delta_x}$

Les travaux portant sur la détermination des vitesses fondamentales à étirement nul et des autres valeurs fondamentales (Ka, Ma) de flamme hydrogène / air / gaz neutres sont relativement peu nombreux.

Lannoy [28] a proposé une corrélation tenant compte de l'influence de la température et de la pression initiales, pour des mélanges à base d'hydrogène selon l'équation :

$$S_l = S_{l,ref} \cdot \left( \frac{P}{P_{ref}} \right)^n \cdot \left( \frac{T}{T_{ref}} \right)^m \quad \text{avec } n \sim 1 \text{ et } m \sim 2,1$$

Toutefois l'étirement n'est pas pris en compte.

De même, utilisant un brûleur et une LDV (Laser Doppler Velocimetry), Koroll et Mulpuru [29] ont pu établir une corrélation permettant d'intégrer la dilution par de la vapeur d'eau, mais ne tenant pas compte des effets d'étirement.

$$S_l = S_{l,sans\_vapeur} \cdot \left( 1 - \frac{x_{vap}}{x_{vap,max}} \right) \cdot \sqrt{\alpha / \alpha_{san\_vap}} \quad \text{avec } x_{vap} \text{ la fraction molaire de vapeur d'eau.}$$

Bechtold et Matalon [30] ont présenté assez récemment une publication détaillant théorie et résultats expérimentaux de divers mélanges réactifs, incluant quelques apports sur la combustion de l'hydrogène.

Faeth et coll. [9], et Kwon et coll. [11] ont pu récemment faire, entre autres, des études hydrogène/air et H<sub>2</sub>/O<sub>2</sub>/N<sub>2</sub> à diverses compositions et pressions. Leur traitement des données diffère toutefois des travaux publiés par d'autres équipes.

Bradley et coll. [13] ont, à leur tour, présenté une étude de l'influence de l'étirement sur d'importants volumes explosifs (3 mètres de rayon), mais il s'agissait de mélanges méthane et propane. Ces derniers montrent que l'étirement joue un rôle important dans le cas de flammes plissées turbulentes<sup>1</sup>. Dans cette situation, non seulement la surface croît avec la turbulence mais le plissement de la surface augmente l'étirement qui provoque une accélération supplémentaire de la flamme.

○ <sup>1</sup> Une attention particulière doit être portée sur les notations utilisées, parfois particulières à un auteur et qui sont explicitées dans les articles cités en référence.

Tse-Se et coll. [31] ont également procédé à des essais avec des pressions allant jusqu'à 20 bars. Ils ont dû toutefois faire varier les compositions en diluant le mélange hydrogène/air avec de l'hélium, afin d'augmenter le nombre de Lewis et ainsi stabiliser le front de flamme. Celui-ci a, en effet, d'autant plus tendance à plisser (et donc s'auto-accélérer par augmentation de surface) que la pression augmente. Le front de flamme devenant plus mince, l'influence de la diffusion de matière (déstabilisante) devient prépondérante sur la diffusion thermique (stabilisante). Il est alors nécessaire d'extrapoler les résultats obtenus par modélisation de la cinétique chimique en fonction des diffusions et de la thermodynamique.

## 2.2 Déflagration accélérée par la turbulence

Le principal vecteur d'accélération de la flamme est son interaction avec l'écoulement et la turbulence associée. Basé sur des études expérimentales, le diagramme de Borghi [32] permet de classer les types de flammes potentielles en fonction de trois nombres, ceux de Damköhler, Karlovitz et Reynolds :

$$Da = \left(\frac{u'}{S_L^0}\right)^{-1} \cdot \left(\frac{l_t}{\delta_L^0}\right) \quad Ka = \left(\frac{u'}{S_L^0}\right)^{3/2} \cdot \left(\frac{l_t}{\delta_L^0}\right)^{-1/2} \quad Re_t = \left(\frac{u'}{S_L^0}\right) \cdot \left(\frac{l_t}{\delta_L^0}\right)$$

Sur la Figure 2 nous pouvons distinguer les courbes iso-Da, iso-Ka et iso-Re, d'importance. On distingue plusieurs zones selon que la flamme est plus ou moins turbulente et donc plus ou moins accélérée :

- 1 : flamme plissée
- 2 : flamme ondulée
- 3 : zones réactionnelles distribuées
- 4 : réacteur parfaitement agité

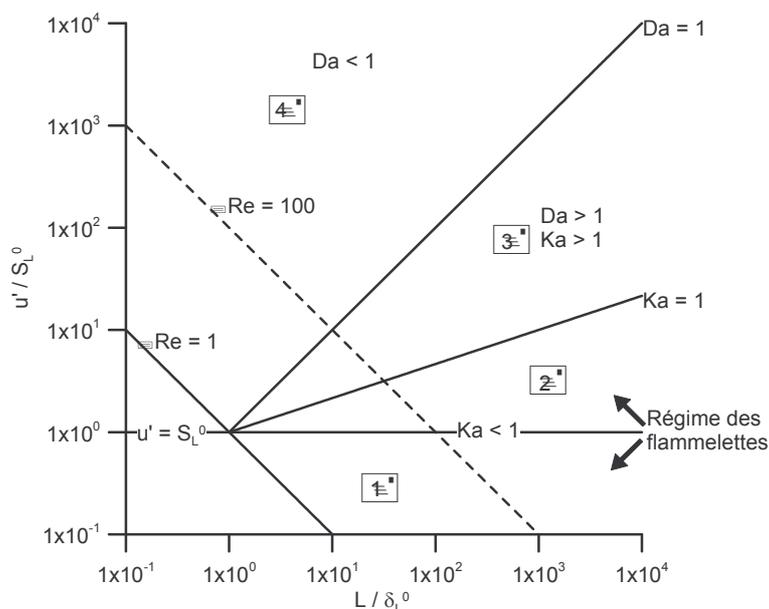


Figure 2 : Diagramme de Borghi

Trois approches sont généralement distinguées pour une approche théorique de la flamme turbulente :

- Le *modèle de surface* s'applique lorsque l'intensité de l'écoulement est faible et l'échelle associée grande. Il correspond à une flamme laminaire qui se plisse et une zone réactionnelle d'expansion homogène.
- Le *modèle des flammelettes* caractérise une intensité de turbulence plus élevée et un front de flamme discontinu : des flammelettes laminaires existent dans les tourbillons turbulents.
- Le *modèle de volume* est relatif à une très forte turbulence où toute structure laminaire disparaît et où on peut considérer que la zone réactionnelle est distribuée.

### 2.2.1 Modèle de surface

Le modèle de surface décrit le comportement d'un front laminaire stationnaire dans le cas où il est soumis à des pulsations de vitesse, se transformant alors en front laminaire pulsé. La caractéristique essentielle de ce modèle est la présence de surfaces instables de faible épaisseur qui séparent la zone de réaction des produits de combustion et du mélange frais. La réaction est supposée se produire entièrement entre ces surfaces. Damköhler [33] postule que la surface reste intacte et que chaque élément se propage par rapport aux gaz imbrûlés à la vitesse de combustion laminaire. On parle de flamme laminaire plissée. Il suppose que l'augmentation de surface est proportionnelle à l'intensité de turbulence,

$$u_{r.m.s.}' : S_t/S_l \propto \text{Surface} \propto \text{Fluctuations} \propto \varepsilon \propto Re$$

Si le nombre de Reynolds,  $Re$ , est compris entre 2 300 et 6 000, l'échelle de turbulence est petite. La taille des tourbillons et la distance de mélange sont alors très inférieurs à l'épaisseur du front de flamme. Ceci a pour effet d'augmenter les phénomènes de transport dans l'onde de combustion. On a alors :  $S_t/S_l \approx 0,1 * Re^{1/2}$

Pour Schelkin [34], le rapport des vitesses de combustion est proportionnel à celui des surfaces :

$$\frac{A_t}{A_l} = \frac{S_t}{S_l} = \sqrt{1 + 2 * (u'_{r.m.s.}/S_l)^2}$$

Chomiak ([35], [36]), qui a proposé le modèle de tube vortex (lié au modèle de structure de turbulence en milieu réactif), postule essentiellement que la dissipation de l'énergie de turbulence en énergie moléculaire s'étend uniformément sur tout le spectre de turbulence. Mais cette dissipation est concentrée à petite échelle dans les tourbillons dont le volume total est faible devant le volume total de l'écoulement

### 2.2.2 Modèle des flammelettes

Ce modèle tente de combiner les modèles de surface et de volume. Dans les flammes turbulentes, on doit prendre en compte non seulement la combustion dans les fronts laminaires mais aussi le volume de combustion du mélange qui est combiné avec les produits de la réaction par leurs propres tourbillons. Si la fluctuation de vitesse ( $u'$ ) est largement supérieure à la vitesse laminaire ( $S_l$ ), les molécules de réactif n'ont pas le temps de participer à une combustion complète et sont donc isolées par des pulsations turbulentes. En conséquence,

le processus de diffusion commence à l'intérieur des tourbillons ; la température et la concentration s'égalisent sur tout le volume. Sous de telles conditions, la surface sur laquelle se tient la combustion augmente graduellement à cause de la formation de nouveaux tourbillons à partir des premiers tourbillons dans le processus de combustion. À l'intérieur de la flamme, la température moyenne des nouveaux tourbillons augmente, et la vitesse de réaction volumique s'accroît également jusqu'à ce que la vitesse de combustion de surface devienne faible.

### 2.2.3 Modèle de volume

Ce modèle décrit l'élargissement du front de flamme. Le mélange ne brûle pas complètement dans le front de flamme ; la combustion incomplète dépend essentiellement de la vitesse d'écoulement et de la composition du mélange. Le front de combustion a une structure consistant en des volumes de gaz frais séparés par des zones de produits de combustion de la réaction chimique. Le champ d'écoulement turbulent entraîne le mélange des différents éléments du fluide, et le temps caractéristique sera le temps associé aux fluctuations de la turbulence  $\tau_m$ . Avec l'augmentation de la turbulence, ce temps tend vers  $t_c$  (temps caractéristique de la réaction chimique), et l'échelle de grandeur associée tend vers l'épaisseur de la flamme ou de la zone réactionnelle. Les processus de transport de masse et de chaleur sont considérablement augmentés par les processus de transport turbulent. Ceci conduit à une zone de réaction plus large avec une accélération de la vitesse de propagation.

Summerfield [37] [38] considère que la réaction chimique est distribuée à travers la zone de combustion et qu'elle conduit à une structure de la flamme analogue à celle de la flamme laminaire. Il inclut l'effet de la turbulence sur le transport et la chimie, et propose :

$$\frac{S_t}{S_l} = \frac{\sqrt{\varepsilon/\tau_t}}{\sqrt{\nu/\tau_l}}, \text{ où } \tau_t \text{ et } \tau_l \text{ représentent respectivement les temps caractéristiques de la}$$

combustion turbulente et laminaire. En posant  $\tau = \delta/S$ , on obtient la relation suivante :

$$\frac{S_t \cdot \delta_t}{\varepsilon} = \frac{S_l \cdot \delta_l}{\nu}$$

Expérimentalement, la quantité  $(S_l \cdot \delta_l/\nu)$  est déterminée et vaut environ 10. On en déduit la valeur de l'épaisseur de la flamme turbulente  $\delta_t$ .

## 2.3 Vitesse de propagation turbulente

Le couplage entre la combustion et la turbulence fait l'objet de travaux actuels aussi bien théoriques qu'expérimentaux afin d'établir des modèles. Un consensus s'est développé autour de la considération que l'accélération était principalement due à l'augmentation de la surface de la flamme :

$$\frac{S_T}{S_L^0} = \frac{A_T}{A_L} \quad \text{avec } A_T \text{ et } A_L \text{ les surfaces de flammes turbulente et laminaire.}$$

Cette linéarité a mené à la relation théorique, dans le cas de faible étirement de la flamme [4, p. 70] :  $\frac{S_T}{S_L} = 1 - \frac{K \cdot \delta}{S_L^0} \cdot Ma$  avec  $Ma$  le nombre de Markstein. Dans le cadre

de ces hypothèses théoriques, le nombre de Markstein est déduit si l'on connaît le profil exact du champ de température, le nombre de Lewis et l'énergie réduite d'activation de Zeldovich  $\beta$  [4].

Expérimentalement il est encore impossible d'évaluer l'étirement pour une flamme plissée ainsi que le profil exact de température pour des régimes transitoires. Toutefois les études présentent souvent des équations de forme très proche :  $\frac{S_T}{S_L^0} = 1 + \left(\frac{u'}{S_L^0}\right)^n$  avec  $u'$  l'amplitude des fluctuations de vitesse et  $n$  un réel compris entre 0,5 et 1.

Diverses publications ([15], [39], [40], [41], [42]) ont ainsi pu effectuer des comparaisons des comportements de flamme pauvre hydrogène-air laminaire ou perturbée par une turbulence artificielle et constante. Cette turbulence est induite par des ventilateurs opposés. Dans certaines de ces publications une échelle intégrale est avancée mais dans d'autres situations les auteurs [15] n'ont pu effectuer d'analyse rigoureuse à partir de moyens comme une PIV (Particle Induced Velocimetry) et une LDV.

Des corrélations correspondant aux mélanges pauvres d'hydrogène ont ainsi été établies :

Référence	Corrélation
[40]	$\frac{S_T}{S_L^0} = 3,788.(Re_t)^{0,238}$ ; pour $Re_t > 100$ et $\frac{S_L^0}{u'} \rightarrow 0$
[43]	$\frac{S_T}{S_L^0} = 0,157 \left(\frac{u'}{S_L^0}\right)^2 . Re_t^{-0,5}$
[44]	$\frac{S_T}{S_L^0} = 1 + 0,62 * \left(\frac{u'}{S_L^0}\right)^2 Re_t^{1/4}$
[45]	$\frac{S_T}{S_L^0} = 0,88. \frac{u'}{S_L^0} (Ka.Le)^{-0,3}$
[15]	$\frac{S_T}{S_L^0} = \left[1 + 16. \left(\frac{u'}{S_L^0}\right)^2\right]^{0,5} + \frac{\sigma - 1}{\sqrt{3}} \left[1 - \exp\left(-\frac{u'}{S_L^0}\right)\right]$
[42]	$\frac{S_T}{S_L^0} = 1,9 \left(\frac{u'}{S_L^0}\right) + \left(\frac{\sigma - 1}{\sqrt{3}} + 1\right)$ si $\left(\frac{u'}{S_L^0}\right) \geq 2$
	$\frac{S_T}{S_L^0} = 1,9 \left(\frac{u'}{S_L^0}\right) + \left(\frac{\sigma - 1}{\sqrt{3}}\right) \left[1 - \left(\frac{1}{1 + \frac{u'}{S_L^0}}\right)^2\right]^{0,5} + 1$ Si $\left(\frac{u'}{S_L^0}\right) \leq 2$

**Tableau 1 : Corrélations expérimentales publiées donnant la vitesse fondamentale turbulente en fonction de la vitesse fondamentale à étirement nul et de la turbulence**

Toutefois ces travaux sont assez peu comparables aux cas d'auto-couplage entre la combustion et la turbulence engendrée par interaction de la structure des enceintes avec les gaz combustibles en mouvement. En effet le spectre d'échelle de turbulence se trouve dans ce cas beaucoup plus étendu mais également transitoire. La réponse de la flamme à une

perturbation d'écoulement est plus délicate à caractériser, comme le montrent diverses publications sur la propagation turbulente et l'interaction avec des obstacles.

Une nouvelle théorie a été récemment introduite par Madja et Souganidis [46]. Elle démontre que, dans le cas de réaction type KPP (réaction à turbulence gelée), les arguments géométriques ne suffisent pas à expliquer à eux seuls l'influence de la turbulence sur la combustion prémélangée. Il est alors nécessaire de tenir compte de facteurs comme la dilution thermique dans la zone de préchauffage des gaz réactifs.

## 2.4 Critères d'accélération de flamme

L'accélération de la flamme, quand la turbulence devient de forte intensité, se traduit par l'augmentation importante de la vitesse, et des ondes de compression/détente. Dans ce cas la flamme accélérée est beaucoup plus destructrice qu'une déflagration lente.

La limite entre flammes considérées comme lentes (vitesse spatiale inférieure à celle du son dans les gaz frais) et les flammes rapides (déflagrations accélérées) est communément posée à la moitié du nombre de Mach dans les gaz frais. Au-delà de cette vitesse spatiale de propagation de front de flamme, il est en effet considéré que les ondes de pression engendrées peuvent avoir un impact sur les structures de confinement. Ces critères sur la capacité d'une flamme à atteindre un régime de propagation accéléré permettent ainsi de prédire a priori si un scénario va nécessiter une modélisation fine afin de mieux déterminer la montée en charge des structures au cours de la combustion.

Les résultats expérimentaux obtenus sur diverses installations (notamment RUT, au Kurchatov Institute, Russie) ont mené les auteurs de l'état de l'art de l'OCDE [1] à adopter les valeurs exposées par Dorofeev et Kutznetsov dans des rapports internes au Kurchatov Institute, puis publiées en 2001 [47].

Des propagations accélérées sont obtenues si l'on satisfait :

- $\sigma > (3,5 \sim 4)$  pour des mélanges présentant  $\beta.(Le - 1) > -2$
- $\sigma > \sigma^*(\beta)$  pour des mélanges présentant  $\beta.(Le - 1) < -2$

$\sigma^*(\beta)$  est estimé indirectement via une corrélation et une approximation :

- $\sigma^* = 0,9 * 10^{-5} * (E_a / RT_u)^3 - 0,0019 * (E_a / RT_u)^2 + 0,1807 * (E_a / RT_u) + 0,2314$  et
- $\beta \cong \frac{\sigma - 1}{\sigma} \frac{E_a}{RT_u}$

Lorsque le mélange hydrogène-air est enflammé, généralement par une source d'énergie faible (souvent une étincelle), la combustion est assimilable à une déflagration laminaire qui évolue rapidement en flamme plissée ou cellulaire. Cette flamme dans le régime de "flammelettes" tend alors à s'auto-accélérer, le front de flamme devenant épais et irrégulier : la chimie de combustion se trouve dans des conditions optimales de cinétique. Cette accélération est spécifique à un mélange et à des conditions initiales. Elle est surtout présente dans les mélanges évoluant spontanément vers une détonation, comme par exemple hydrogène-air, acétylène-air, et est due à une compétition entre la diffusion thermique et des radicaux [1 §2.4.1]. Cette accélération initiale est ensuite relayée par une accélération par turbulence et par expansion volumique due aux gaz brûlés chauds (critère sur  $\sigma$ ).

L'accélération peut également être due à un confinement [1 §2.4.3]. Alors que les limites de composition pour chaque régime sont relativement bien connues dans le cas de l'hydrogène, la présence d'obstacles perturbe le comportement de la flamme, notamment en augmentant la turbulence et en modifiant les trajets des ondes de compression. Dorofeev a ainsi publié récemment une étude sur l'influence du confinement sur les régimes d'accélération [47]. Il a observé l'augmentation de la surface de flamme par interaction avec des tourbillons en amont de celle-ci. L'interaction flamme - vortex a fait l'objet de travaux, notamment de Fiechtner et coll. [48]. Ils ont pu caractériser expérimentalement le taux d'accroissement de la surface réactive avec des analyses d'image par LIF afin de suivre précisément les radicaux OH au cours de l'interaction.

Le régime d'inhibition est surtout relaté dans le cas d'une configuration fortement encombrée (haut coefficient de blocage) et se caractérise par une forte accélération suivie d'un soufflage de la flamme alors qu'elle se situe dans la zone des obstacles [1 §2.2.1].

## **2.5 Transition Déflagration vers Détonation (TDD)**

Les combustions de mélanges d'hydrogène dans l'air, initiées par des sources faibles, s'accélèrent graduellement. Elles peuvent parfois évoluer brutalement en détonation selon un mécanisme encore discuté [1 §2.5.1]. Le scénario le plus dramatique en terme de sûreté d'une installation est le cas où la flamme s'accélère juste avant de transiter vers la détonation auto-entretenue près de la paroi.

Plusieurs opinions s'affrontent afin d'expliquer cette transition. En réalité, comme l'indique l'état de l'art, il pourrait y avoir plusieurs mécanismes. Le plus grand consensus est réuni autour de "SWACER" (Shock Wave Amplification by Coherent Energy Release) [1 §2.5.2]. Cette théorie, développée initialement afin d'expliquer un phénomène bien particulier (allumage par photo-excitation), s'est étendue à la Transition Déflagration-Détonation, bien qu'elle soit souvent réajustée en fonction des dernières découvertes et des corrections de mécanismes. Montgomery et coll. [49] ont, par exemple, apporté en 1998 un rectificatif afin d'inclure une inhomogénéité locale de concentration des réactifs qui augmenterait la taille des gros tourbillons mélangeant les réactifs et les gaz brûlés, ce qui constituerait un frein à la théorie.

D'autre part, des études (notamment de Vaezi et Aldredge [50]) ont été entreprises afin d'observer l'influence, sur la vitesse de combustion, des ondes de compression réfléchies par l'enceinte et les obstacles. Utilisant une configuration particulière (brûleur Taylor-Couette), la flamme est alors stationnaire et sans onde de pression l'accompagnant (ce qui est une différence importante). Les instabilités acoustiques auraient une influence aussi longtemps que la turbulence dans les gaz frais ne dépasserait pas un certain seuil, au delà duquel cette dernière devient le vecteur principal d'instabilité.

Thomas et Jones [51] ont, de plus, récemment montré que le mécanisme pouvait, à grande échelle, être indépendant d'un mélange des gaz frais et brûlés. Ils ont pu confirmer également l'apparition de TDD dans une situation où une détonation s'essoufflerait pour donner une déflagration : il existe un effet de mémoire assez complexe du fait de l' "histoire" des gaz frais poussés par la flamme.

### **3 Propriétés des mélanges combustibles hydrogène-air**

Les scénarios d'accidents en centrales nucléaires impliquent dans certains cas une déflagration d'un prémélange hydrogène/air/vapeur d'eau. La fourniture d'un apport d'énergie idéalement ponctuel à ce prémélange crée une série de réactions chimiques se propageant à l'ensemble de la masse gazeuse réactive. Un front de flamme est alors initié en un point (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.

#### **3.1 Limites d'inflammabilité**

La capacité d'un mélange à permettre une combustion auto-entretenu dépend des conditions physiques et chimiques du mélange combustible. Les concentrations minimale et maximale en combustible déterminent la plage d'inflammabilité.

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 interviennent 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 (LII) 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 n'est plus possible. L'eau et le dioxyde de carbone sont des molécules triatomiques de capacités calorifiques voisines et leurs influences sur les limites inférieures d'inflammabilité des mélanges pauvres en hydrogène sont très proches.

#### **3.2 Limites de Détonabilité**

Les limites de détonabilité pour des mélanges hydrogène-air ont été établies pour des concentrations de 18 à 58 % d'hydrogène selon Shapiro [52] (Figure 3). Ces limites ont été remises en cause par Tieszen et coll. [53] qui ont montré une détonabilité possible entre 13,5 et 70 % d'hydrogène. Stamps [54] 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 100kPa et température ambiante) à des limites de 11,6 % à 75,9 %. La teneur en eau influence nettement la limite inférieure de détonabilité.

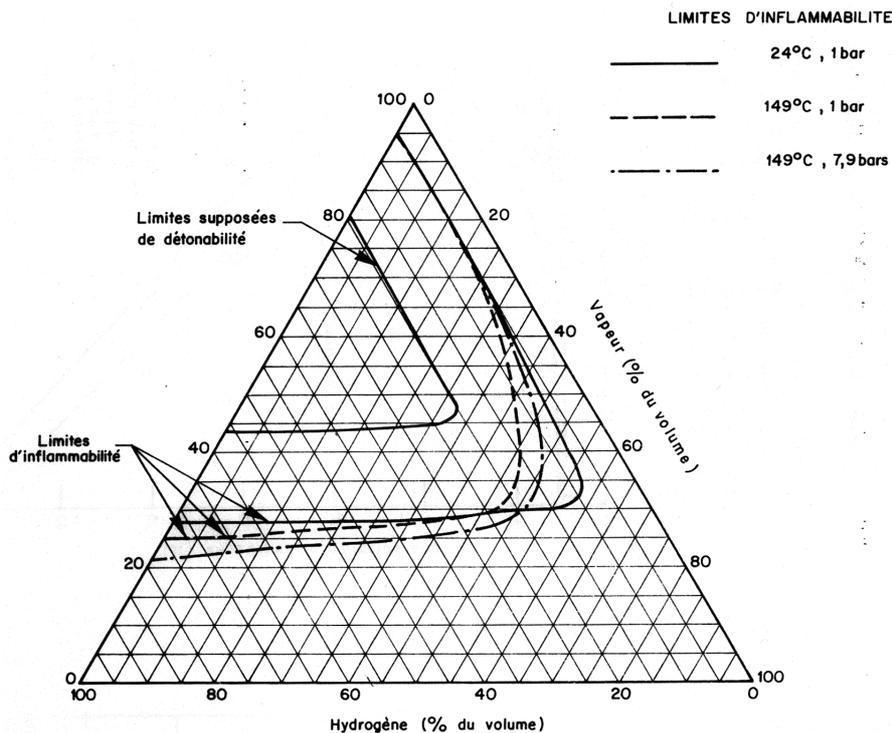


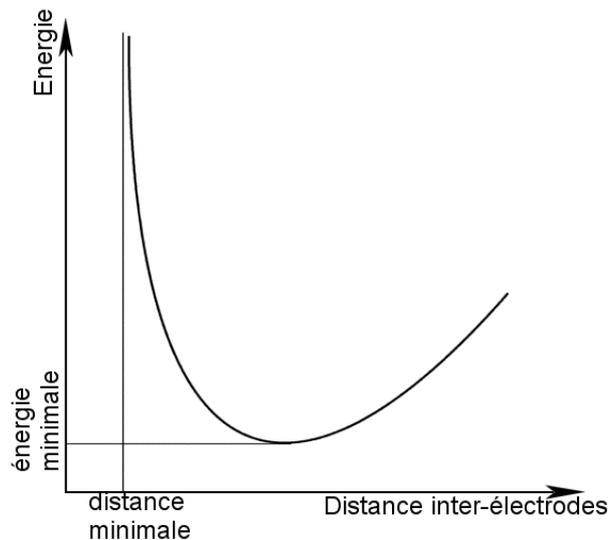
Figure 3 : Diagramme de Shapiro [52] pour les mélanges hydrogène-air -vapeur d'eau

### 3.3 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 trop 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 dans des conditions données, il existe une distance minimum entre les électrodes appelée distance de coincement en dessous de laquelle la combustion ne sera pas initiée (Figure 4). Au voisinage de cette distance de coincement, l'énergie nécessaire à l'allumage augmente fortement car les phénomènes de dissipation d'énergie deviennent importants. Ceux-ci sont fortement dépendants du rapport surface/volume de la zone de mélange combustible chauffée par l'étincelle et de la proximité des électrodes.



**Figure 4 : 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 à la propagation de la combustion (Figure 4).

L'énergie minimum et la distance de coincement dépendent très fortement des propriétés physico-chimiques du milieu concerné (composition, pression, température...) et dans une moindre mesure des caractéristiques 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 stoechiométrique d'après Belles [55] et Berman [56] (Figure 5). La Figure 6 représente la variation de l'énergie minimum d'inflammation et la distance de coincement 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 stoechiométrie, l'énergie d'inflammation passe de moins de 0,02 mJ à plus de 0,04 mJ en substituant le dioxyde de carbone à l'azote.

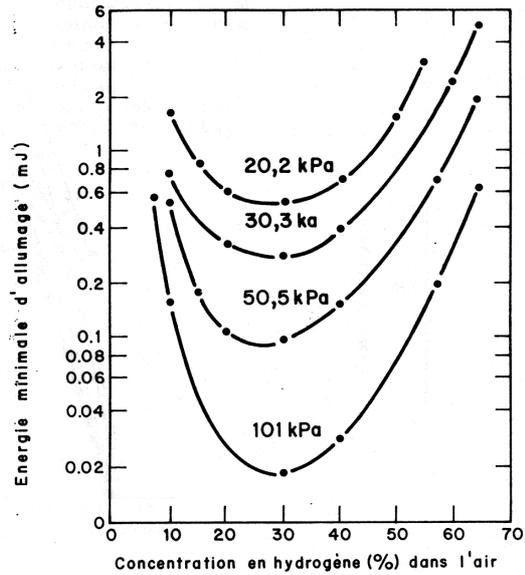


Figure 5 : Energie minimale d'inflammation des mélanges hydrogène-air pour différentes pressions initiales, d'après Belles [55] et Berman [56].

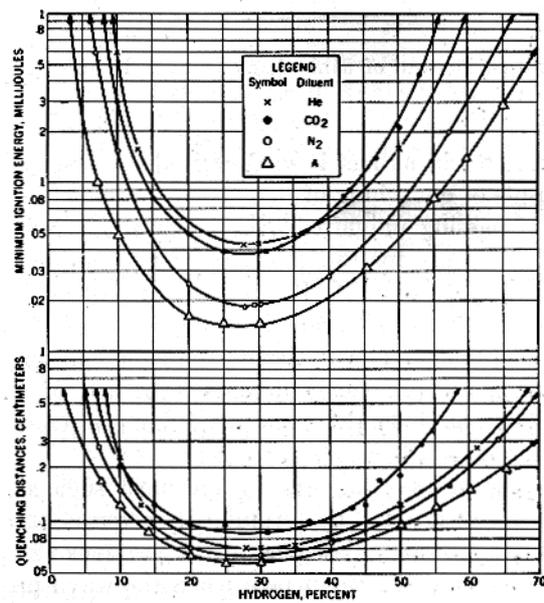


Figure 6 : Energie minimale d'inflammation et distance de coincement pour différents mélanges H<sub>2</sub>-O<sub>2</sub>-diluants à pression atmosphérique d'après Lewis et von Elbe [57].

## 4 Modélisation numérique

### 4.1 Etablissement de compromis

L'objectif de toute approche informatisée d'un scénario est de rendre compte le plus fidèlement possible des lois physiques impliquées ainsi que de déduire l'état et l'évolution des champs physiques concernés. Il y a donc un compromis à trouver entre les souhaits du scientifique et les moyens techniques permettant les calculs scientifiques. Plusieurs facteurs interviennent dans la mise au point de ce compromis : nombre de lois physiques, dimension

spatiale des systèmes, dimension temporelle des phénomènes, raffinement spatial et temporel, phénomène transitoire ou stationnaire... La modélisation de la combustion turbulente est en effet une des plus exigeantes en ressources informatiques. Atteindre des résultats prédictifs pour l'analyse de sûreté implique de tenir compte des facteurs suivants :

a/ nombre et complexité des lois physiques.

La prise en compte d'un maximum de lois physiques est lourde mathématiquement et nécessite une quantité importante de moyens de calcul. La difficulté à faire des choix de simplification est d'autant plus ardu que les lois intervenant en mécanique des fluides, mais aussi en combustion, impliquent des non-linéarités et sont fonction de nombreux paramètres. Dans le cas idéal, il faudrait par exemple tenir compte des nombreuses espèces chimiques présentes au sein de la flamme, qui induisent des modifications locales des propriétés physiques de fluides et donc modifient l'historique. A ceci, il faut ajouter les interactions entre la flamme et la turbulence, les pertes thermiques augmentant le nombre et la complexité des équations et encore plus la difficulté de résolution du phénomène. Liu et Rogg [58] ont travaillé numériquement sur le rayonnement thermique créé par des flammes hydrogène-air et d'autres flammes produisant des particules. Mais l'étude de ce genre de paramètre est très ponctuelle et non prise en compte dans les codes de sûreté.

b/ dimension spatiale des systèmes et dimension temporelle des phénomènes.

Les échelles spatiales et temporelles auxquelles doit faire face la modélisation dédiée à la sûreté d'installation sont très étendues. L'épaisseur d'un front de flamme laminaire est de l'ordre de  $10^{-4}$  m. A contrario, les dimensions des structures dans lesquelles ont lieu de telles explosions sont très grandes, notamment les installations nucléaires.

La combustion est un phénomène qui peut, selon les conditions, être relativement lent (flamme laminaire, quelques mètres par seconde) ou extrêmement rapide (détonation, plus de 1 000 m/s). En outre, la turbulence implique de larges plages spatiales et temporelles. Les échelles impliquées ont des impacts sur les phénomènes de diffusion et de transport et donc par conséquent sur la combustion.

c/ phénomène transitoire.

La propagation de flamme dans un prémélange combustible est un phénomène transitoire. Ceci complique énormément la résolution dans la mesure où les approches implicites sont difficilement applicables. La plupart des travaux portant sur la turbulence ne prennent pas en considération cet aspect transitoire qui augmente énormément la complexité. Une telle étude est délicate car chaque calcul, à un temps donné engendre des répercussions sur les calculs suivants. Ce phénomène est d'autant plus important que les données expérimentales indiquent à quel point la variété des régimes de propagation de flamme peut modifier sensiblement l'historique de cette propagation.

Les points a/, b/ et c/ cumulés engendrent des problèmes de raideur mathématique.

L'étendue spatiale des structures implique l'utilisation d'un maillage spatial fin. L'aspect transitoire impose un découpage temporel très petit. Le nombre de lois physiques impliquées augmente le nombre de calculs supplémentaires, amplifiant les problèmes de résolution précédents.

En pratique, actuellement, les ressources informatiques nécessaires ne sont jamais satisfaisantes pour une simulation complète, sauf pour des dimensions inférieures à celle d'une chambre de combustion de moteur à explosion. Cela induit une raideur mathématique certaine des systèmes d'équations impliquées :

- raideur spatiale car le front de flamme est mince (forts gradients),
- raideur temporelle car la variété des régimes de propagation de flamme peut modifier sensiblement l'historique de propagation de la flamme. La résolution doit alors faire appel à des théories mathématiques spécifiques.

## 4.2 Problématique du couplage turbulence-combustion

### 4.2.1 Problèmes intrinsèques

La difficulté de la simulation informatique des propagations turbulentes de flammes est en grande partie due à la complexité de la nature des phénomènes entrant en jeu. La combustion turbulente fait en effet intervenir deux grands domaines : la propagation d'un fluide visqueux compressible turbulent et l'évolution d'un front de flamme.

Les équations de mécanique des fluides de type Navier-Stokes n'ont pas de solution mathématique, ce qui oblige à effectuer des boucles de calcul de convergence et sollicite fortement les processeurs. Les diverses approches de modélisation tentent de résoudre le problème en fermant le système d'équation :

- soit en modélisant le tenseur de cisaillement turbulent  $\tau = \overline{\rho \cdot v \otimes v}$  présent dans l'équation bilan de quantité de mouvement. Les approches LES (Large Eddy Simulation) [1 §4.12] et longueur de mélange [1 §4.4] adoptent cette approche de manières différentes.
- soit en remplaçant le terme indéterminé de dissipation visqueuse d'énergie turbulente, au sein de l'équation bilan d'énergie [1 §4.7], par les modélisations dites k- $\epsilon$ , k- $\omega$  ...

La combustion est un phénomène très rapide et absolument non linéaire. Toutefois, la prise en compte de la turbulence transitoire est l'aspect le plus lourd du traitement informatique, à cause de la complexité et le nombre d'équations entrant en jeu [59]. La montée en puissance des ordinateurs a permis des approches de type LES, ne nécessitant une simplification que lorsque les capacités de calcul deviennent insuffisantes. Elles restent toutefois confinées à des calculs sur des enceintes de dimensions modérées.

La résolution de l'évolution d'un front de flamme nécessite des solveurs mathématiques complexes adaptés aux forts gradients (température, diffusivités thermique et massique, viscosité, densité, composition...) sur une zone physique très mince ainsi que des calculs des effets de la progression de la flamme sur des distances bien plus grandes. Les calculs axés sur la sûreté d'installations doivent permettre de prédire les conséquences des changements sur des distances bien plus grandes que l'épaisseur d'un front de flamme. Afin de faciliter la simulation, plusieurs voies ont été explorées (G-équation, flamme épaissie, sous-maillage...), introduisant un écart avec les observations expérimentales mais facilitant le processus numérique.

La difficulté réside également dans le nombre de lois physiques dont il faut tenir compte dans un scénario d'accident industriel. L'enchaînement des régimes de propagation différents (propagation laminaire/plissée/turbulente voire transition vers une détonation) interdit en effet de négliger certains aspects qui peuvent perturber l'historique du calcul et donc donner des valeurs erronées.

Chaque ajout d'une loi implique le plus souvent des interactions avec d'autres lois, par conséquent des termes mathématiques supplémentaires à traiter et donc de nouvelles équations de fermeture à trouver. Gamal et coll. [60] ont ainsi proposé l'utilisation d'équations d'état différentes de celles des gaz parfaits dans le cas de mélanges initialement sous pression. Cela alourdit bien évidemment la résolution et ne peut faire l'objet que de calculs spécifiques.

A l'opposé, certaines approches comme celle employée pour le code TONUS ou par Birkby et coll. [61] privilégient la diversité de modes de propagation de flamme en modélisant les aspects qui peuvent intervenir. Le but est de simplifier le système d'équation afin d'accentuer d'autres paramètres, notamment les résolutions spatiale et temporelle. Cette régulation sur la vitesse de combustion peut être effectuée de manière continue sur la totalité des régimes de propagation ou discontinue, par exemple en fonction de critères sur la vitesse de flamme ou un nombre de Reynolds.

#### **4.2.2 Interactions combustion / turbulence**

Le couplage entre la turbulence et la combustion est un domaine d'intérêt dont la complexité fait l'objet de plusieurs approches et théories. Les interactions entre la flamme et la turbulence sont encore à l'origine de travaux théoriques afin de parfaire notre compréhension des phénomènes. Ceci est particulièrement vrai pour les flammes de diffusion ou de prémélange en présence de gradients de concentrations des réactifs.

Un grand nombre d'approches existent afin d'obtenir le code de calcul le plus prédictif possible. Il est intéressant de noter que la plupart des solutions tiennent compte de l'impact de la turbulence sur la combustion mais pas de l'inverse. Ainsi les codes de calculs cherchent le plus souvent à adapter les modèles de combustion à une propagation turbulente sans que la réciproque ne soit étudiée. Cette approche dite à turbulence gelée [4, p. 232] a été baptisée de KPP (du nom des auteurs Kolmogorov-Petrovsky-Piskunov). Elle est reprise parfois implicitement de nombreux travaux. Une seule publication de Bray et coll. [62] détaille les effets de la combustion sur la turbulence.

Schématiquement trois effets sont identifiés entre la combustion et la turbulence.

1. Augmentation de la turbulence principalement par interaction des gaz frais en mouvement avec l'environnement (jets, couches de mélange et interactions avec les parois).
2. Accélération de la combustion par la turbulence : augmentation de la surface et de l'épaisseur de la flamme.
3. Décélérations voire extinctions locales de la flamme dues à un mélange trop turbulent entre les gaz frais et les gaz brûlés (refroidissement de la zone réactionnelle, dilution des radicaux).

Dans la théorie, les interactions entre la combustion et la turbulence ne sont pas toutes identifiées en raison de la complexité des phénomènes et de la difficulté à pouvoir en isoler les aspects, aussi bien théoriquement qu'expérimentalement. En outre, la prise en compte des phénomènes entraîne d'énormes coûts de calculs. Par conséquent, pour les modélisations informatiques actuelles, l'ensemble des interactions combustion / turbulence est résumé en un seul couplage modulant la vitesse de combustion en fonction des données fournies par les modèles de turbulence. Ces équations sont souvent validées sur des zones restreintes en

fonction des paramètres physiques de la flamme et de la turbulence. Le diagramme de Borghi (Figure 2, page 14) est ainsi souvent utilisé comme base afin de définir les limites d'applicabilité des corrélations expérimentales [39] [63]. Dérivée directement des conclusions du modèle KPP, l'équation 1 permet ainsi d'évaluer pour CREBCOM un taux de combustion turbulent. Dans le cas de couplage avec la turbulence de type k-ε, Faix et coll. [64] ont rapporté une évaluation de ce taux de combustion tenant compte plus finement de la turbulence (Eq. 2).

$$K = \frac{\rho_u}{4 * D_t} * S_T^2 \quad \text{Eq. 1}$$

$$K = \frac{\rho_u * S_{c_t}}{4 * C_{\mu}^{0,25} * \sqrt{3/2} * u' * l_t} * \frac{S_T^2}{u' * l_t} \quad \text{Eq. 2}$$

avec  $C_{\mu} = 0,09$  et  $S_{c_t} = 0,75$

Actuellement les codes de calcul dédiés à la sûreté d'installation ne prennent pas en compte la décélération et l'extinction de la flamme ; les causes n'en sont pas toutes clairement identifiées. Certains codes essaient toutefois de déterminer une limite de propagation de flamme en fonction des temps caractéristiques de combustion et de turbulence comme le proposent Meneveau et Poinso [65].

### 4.2.3 Limitations

Une résolution totale de la turbulence est mathématiquement impossible à l'heure actuelle [59] et certains termes mathématiques d'ordres de grandeur plus ou moins faibles sont modélisés, même pour les études DNS (Direct Numeric Simulation). Pour tenir compte des termes minoritaires, il faudrait en fait affiner considérablement le maillage, ce qui a un coût important n'intégrant que la mécanique des fluides et la turbulence. Pour un calcul sur un maillage à deux dimensions, un affinement de maillage par 10 implique de disposer d'une capacité mémoire 178 fois plus importante et d'un temps de calcul 1 000 fois plus grand [59]. Les systèmes informatiques actuels permettent des calculs sur  $10^7$  éléments de maillage. Or, selon les besoins numériques de résolution des libertés de mouvements turbulents, un calcul total de la turbulence nécessite environ  $10 \times Re^{9/4}$  points. Ceci permet un calcul de turbulence pour un nombre de Reynolds autour de 1 000, ce qui est faible [1]. En outre, l'ajout de lois supplémentaires liées à la combustion complique fortement le problème des ressources informatiques nécessaires.

Certaines techniques ont été développées dans le but de repousser les limites de faisabilité. Elles apportent des améliorations mais restent actuellement très insuffisantes par rapport à l'augmentation exponentielle des besoins. Nous pouvons ainsi citer le calcul via des sous-maillages, ou encore la compression par ondelette. La technique de maillage/sous-maillage, utilisée par Arntzen et coll. dans le code FLACS [66], présente l'avantage d'accélérer les calculs via la prise en compte des phénomènes uniquement à l'échelle physique impliquée et non sur la totalité d'un maillage affiné. Elle permet également de tenir compte des termes non linéaires induits par la combustion mais aussi d'obtenir des valeurs plus justes des implications de la combustion sur les termes d'énergie dans les équations de transport d'énergie et de matière, sans forcément alourdir fortement le calcul. Il est ainsi possible d'intégrer des phénomènes de dissipation de diffusion visqueuse et des diffusions à contre

gradients observées pour des flammes partiellement pré-mélangées (présence de gradients de concentration).

L'objectif de la compression par ondelette est de permettre une forte compression des données tout en tenant compte de la totalité de l'échelle de turbulence. Théoriquement très prometteuse, elle en est actuellement au stade du codage informatique [67].

### **4.3 Différentes approches**

Les calculs effectués avec le plus petit nombre d'approximations possible sont appelés *simulations* ou encore DNS (Direct Numeric Simulation). Les autres méthodes informatiques employées sont qualifiées de *modélisation* car elles font intervenir des modèles mathématiques qui simplifient les lois physiques ou qui négligent certains termes trop faibles.

Les simulations numériques de scénario de propagation de flamme font intervenir des codes basés sur la mécanique des fluides turbulents, adaptés pour tenir compte des effets de la combustion. On distingue :

1. ceux qui se proclament de la "DNS", les arrondis numériques et les approximations mathématiques y sont réduits au minimum. La fermeture du système d'équation est effectuée sur des termes fortement non linéaires non résolubles actuellement.
2. la "LES" (Large Eddy Simulation), la modélisation la plus proche de la simulation.
3. le modèle très classique "k- $\epsilon$ ", basé sur une méthode RANS (Reynolds averaged Navier-Stokes)
4. "PDF" (probability density factor) / "FDF" (Filtered Density Function)

Les modèles dédiés à la combustion sont principalement de trois types :

1. ceux reposant sur la loi d'Arrhenius appliquée à une seule étape chimique
2. ceux dépendant d'une Fonction Densité de Probabilité
3. ceux s'appuyant sur une G-équation, ou utilisant un système de particules-traceurs.

Enfin, les couplages sont propres à chaque publication mais peuvent être classés en deux familles :

1. Direct : FSD (Flame Density Surface)
2. Indirect : EBU (Eddy-Break-Up), PDF, jeu de corrélations...

Étant donné leur coût de calcul, les simulations ne sont applicables qu'à des cas particuliers et sont restreintes en espace et en temps. Le code TONUS est bâti sur une base RANS + combustion via Fonction Densité de Probabilité. Il sera décrit en introduction des travaux portants sur la partie numérique.

### **4.4 Modèles de mécanique des fluides turbulents**

L'un des problèmes majeurs de l'approche informatique 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.

#### 4.4.1 RANS + modèle "0 équation"

Le modèle "zéro équation" est le modèle informatique dont le traitement est le plus léger. Il est plus communément appelé "longueur de mélange". Il consiste à fermer le problème (fournir autant d'équations que d'inconnues) selon l'hypothèse de Boussinesq en construisant une relation pertinente sur la viscosité :

$$\mu_t = \bar{\rho} \cdot l_{mix}^2 \cdot |\tilde{\omega}|$$

avec  $\tilde{\omega}$  qui est la vorticité (basée sur le rotationnel de la vitesse) : ([59 §5.6.3.1] et [1 §4.2.2]).

On trouve également dans la littérature [68] le terme « enstrophy », moitié de la vorticité. Il est alors nécessaire de différencier l'écoulement libre de celui proche d'une paroi dans la mesure où ce modèle est nettement plus représentatif d'une interaction flamme-paroi tangente. Cette hypothèse simple donne de bons résultats avec des configurations simples mais est rapidement mise en défaut dès que l'écoulement n'est plus homogène [59]. Elle présente toutefois l'avantage indéniable de permettre des calculs rapides afin d'obtenir des estimations d'un comportement.

#### 4.4.2 RANS + modèle "2 équations" : k-ε

Le modèle le plus connu et le plus classique ([69], [66], [70], [71], [72]) de modélisation de la turbulence est appelé k-ε. Reposant sur des équations théoriques, il traite principalement de la création d'énergie turbulente (k) par les grandes structures de turbulence (échelle intégrale) et de la dissipation (ε) de cette énergie par les plus petites échelles de turbulence (échelles de Kolmogorov). S'appuyant sur les équations de Reynolds (ou de Favre) moyennées, tout comme le modèle de longueur de mélange, l'utilisation de deux équations est plus adaptée à la représentation des principes théoriques, ce qui permet notamment de prendre en compte les phénomènes de transports turbulents [1]. Il existe, de plus, deux modèles de transmission d'énergie entre les différentes échelles impliquées dans la turbulence : la cascade Kolmogorov ou bien le modèle de Von Karman-Pao censé être plus précis, mentionné dans la référence 25 par Barrero et coll. [72]. Ce modèle est plus réaliste que celui de longueur de mélange dans la mesure où il prend notamment en compte les phénomènes de diffusion.

Développé initialement pour les codes de calcul de dynamique des fluides (CFD), le modèle k-ε a été élaboré pour des codes RANS (Reynolds Averaged Navier-Stokes) en régime de propagation stationnaire. Ceci explique son adaptation difficile aux études de sûreté impliquant des régimes transitoires courts. En effet, une valeur de l'énergie turbulente initiale ( $k_{ini}$ ) doit être arbitrairement fixée manuellement : elle intervient soit à partir d'un instant donné soit dès le début de la propagation, ce qui n'est pas réaliste puisque non prédictif dans le premier cas et en désaccord avec la réalité dans le second cas (la turbulence est initialement très faible) [66]. En outre, le modèle k-ε est trop peu réactif aux perturbations et donc inadapté aux régimes purement transitoires pour répondre à des études de sûreté d'installations face à une propagation de flamme prémélangée. Ensuite, modifier les termes de production/destruction de turbulence conduit à surestimer cette dernière [66]. Aussi la méthode la plus courante de correction est la définition d'une valeur initiale  $k_{ini}$  de l'énergie turbulente.

Les paramètres utilisateurs, tels que les échelles de tourbillons dits "intégral" et "de Kolmogorov", l'énergie turbulente initiale  $k_{ini}$ , influent fortement sur les résultats obtenus [66]. De plus, actuellement, la combinaison de k-ε et des codes de combustion est sensible à

la finesse du maillage [59] [66] et ne prend pas en compte les phénomènes de recirculation et de détachement de fluide [1].

Ainsi, si  $k-\varepsilon$  possède une implémentation relativement rapide comparée aux autres approches informatiques de la turbulence (et est nettement plus complet que l'approche longueur de mélange), l'ensemble des contraintes et paramètres utilisateurs font du modèle  $k-\varepsilon$  un choix problématique quand il est utilisé pour des études de sûreté d'installation face à une propagation de flamme prémélangée.

### 4.4.3 Large Eddy Simulation (LES)

La Simulation des Grands Tourbillons (LES) est une approche plus prédictive car elle utilise beaucoup moins de variables fixées arbitrairement par l'utilisateur et résolvant les équations de la mécanique des fluides dans la limite des possibilités du matériel informatique. En effet, la méthode consiste en quelque sorte en une approche DNS de la mécanique des fluides, pour des échelles spatiales au dessus d'une valeur filtre. En dessous de cette valeur de coupure, il est nécessaire d'utiliser un modèle simplificateur pour la turbulence. L'avantage principal est l'absence de contrainte du côté des échelles intégrales puisque le code s'adapte de lui-même au type de fluide et d'écoulement ainsi qu'à son interaction avec la structure de l'enceinte. Il n'y a pas de valeur maximale pour l'échelle intégrale : celle-ci dépendant entre autres de la géométrie, de l'écoulement et de la nature du fluide, il convient de la calculer à chaque instant. Un inconvénient de la LES est qu'elle demande effectivement plus de ressources informatiques qu'une approche RANS +  $k-\varepsilon$ . On peut cependant relativiser dans la mesure où ces besoins sont modulables en fonction de l'échelle de coupure en dessous de laquelle la turbulence est modélisée. Le principal problème provient des modélisations, notamment des fermetures de systèmes d'équations relatifs à l'interaction flamme/paroi [73], des inhomogénéités fortes (par exemple un front de flamme qui induit de forts gradients de température et de composition) et parfois des solutions mathématiques marginales. L' "effet de flou" produit par la modélisation en dessous de la valeur filtre induit le même phénomène de dépendance à la taille de grille (mais très largement diminué par rapport à RANS +  $k-\varepsilon$ , du fait du calcul complet pour les échelles de turbulence plus grandes) que l'on peut mettre en évidence en comparant des calculs DNS à des calculs LES pour des conditions initiales similaires. La modularité de la LES permet, en fonction des ressources informatiques à disposition, de choisir entre affiner la simulation de la turbulence ou introduire de nouvelles lois physiques dans le scénario concerné. La LES est actuellement l'approche la plus étudiée ([73], [68], [74], [75], [4]) au niveau académique car prometteuse à la vue de l'augmentation constante des ressources informatiques.

Cependant, si la simulation est exacte pour les grandes échelles de turbulence, les plus petits tourbillons nécessitent une modélisation. Poinso et Veynante [4] distinguent trois approches : "contraintes de Reynolds", "flux scalaires" et "flux d'enthalpie". Il est à noter que les modèles de type "contraintes de Reynolds" [1] sont rarement cités dans les publications liées à la combustion turbulente.

### 4.4.4 DNS

La DNS est une méthode très coûteuse en calcul puisqu'elle n'effectue (théoriquement) quasiment aucune approximation, que ce soit sur la mécanique des fluides ou les autres phénomènes (réaction chimique notamment, avec calcul de l'intégralité d'un mécanisme détaillé). Elle est donc employée pour obtenir des informations pouvant conforter des valeurs

expérimentales, ou encore obtenir des données très précises servant à coder des modèles pour d'autres approches informatiques (LES notamment).

Du fait de la lourdeur du système, elle n'est utilisée que pour des géométries de tailles restreintes [76] et relativement peu de publications utiles sont disponibles. Les DNS sont ainsi particulièrement peu adaptées à la sûreté de structures, dans la mesure où les échelles de travail sont très différentes et où aucune modélisation du couplage turbulence/combustion n'est nécessaire puisque implicite dans les lois gouvernant les phénomènes. Toutefois, la DNS est parfois utilisée [76] afin d'estimer la pertinence d'une amélioration de modèle.

#### **4.4.5 Modèles plus exotiques**

##### **Système de particules**

Des modèles assimilant les fluides à des particules idéales sans masse sont actuellement en cours de développement [67]. Très proches des systèmes dits à "G-équation", ils présentent une efficacité de calcul nettement au dessus des systèmes traditionnels mais ont quelques inconvénients : la non-continuité de l'information peut présenter des divergences avec la réalité ou avec les codes de calcul ci-avant mentionnés, notamment pour les phénomènes diffusifs ou les interactions flamme / parois qui nécessitent parfois des modifications manuelles.

Certains auteurs ont proposé une méthode classique appelée point-vortex, mais qui est effectivement gourmande en temps de calcul ou bien limitée à des simulations 2D [77]. Barrero et coll. [67] préfèrent adopter une approche prometteuse et novatrice suivant un concept brownien des fluides : perturbation aléatoire du champ des vitesses par des fonctions adéquates, comme proposé initialement par Stam et coll. (cf. références 1, 25 et 26 de [67]).

L'approche par système de particules présente l'avantage de suivre précisément les mouvements des fluides et donc de tenir compte des effets piston engendrés par les flammes pré-mélangées. Ce système est ainsi très proche d'un système à maillage adaptatif lequel serait beaucoup plus lourd à mettre en place. Les inconvénients sont l'abstraction de tous les paramètres physiques tels qu'observés expérimentalement et donc les difficultés à introduire des modifications. Les avantages principaux sont le faible coût de calcul par rapport à la précision de calcul obtenue, ainsi que la facilité de rendu informatique.

##### **Fonction densité filtrée**

Une approche encore plus abstraite est proposée par Heinz [78][79] avec une modélisation de l'écoulement turbulent par une technique dite de FDF (Filtered Density Function). Dérivée de la notion de PDF (Probability Density Function), cette technique permet de modéliser les phénomènes non homogènes, comme les propagations de flamme, en utilisant des fonctions pré-établies qui allègent la notion d'écoulement selon les équations de Navier-Stokes. Comme les systèmes de particules, elle présente une légèreté indéniable mais une évolutivité restreinte. La FDF marque ainsi une évolution de la PDF qui, comme RANS +  $k-\epsilon$ , a dû subir des modifications pour sortir du domaine de la physique pour laquelle elle a vu le jour, c'est-à-dire les systèmes extrêmement agités, où les inhomogénéités sont en grande partie gommées par un mélange très intense. La PDF est ainsi très adaptée à l'étude de systèmes dits "Réacteur Parfaitement Agité" (fermés ou non) qui sont loin d'une configuration de type installation nucléaire.

## 4.5 Modèles de Combustion

Dans le cadre des études de sûreté pour des géométries très grandes en regard d'un front de flamme (10 à 100 m comparés à  $10^{-4}$  m), une étude DNS prenant en compte la totalité des mécanismes chimiques intervenant dans la combustion d'un composé est impossible à l'heure actuelle. Certains codes de calculs utilisent pour l'instant l'implémentation d'une réaction en une seule étape, soit via une loi d'Arrhenius ([73], [68], [76]) soit via une loi de probabilité (PDF) ([76], [71], [78], [79]). Les modèles de combustion sont complétés par des fonctions liant la composition aux propriétés thermodynamiques des gaz. Ainsi, selon les paramètres et fonctions qu'on leur fournit, sont-ils capables de représenter des flammes se propageant dans différents régimes. Le problème réside dans les phénomènes d'accélération de flamme : les régimes de propagation sont très différents et il est possible d'observer ceux-ci selon les scénarios. La stratégie informatique adoptée aujourd'hui par la grande majorité des chercheurs est l'établissement d'un modèle continu comportant une partie dédiée à la propagation laminaire de la flamme et une partie modulant cette vitesse en fonction de la turbulence autour de la flamme.

### 4.5.1 Arrhenius

Les modèles combustion de type "une seule réaction" sont les plus répandus car les plus facilement implémentés et donnent des résultats très corrects, surtout facilement couplés avec un code de turbulence. Un des inconvénients des modèles type "loi d'Arrhenius" est la forte dépendance à la finesse du maillage. En effet, fixer une vitesse de combustion impose une répartition de la flamme sur un certain nombre de mailles : affiner le maillage revient à réduire l'épaisseur de la flamme. En réduisant le volume réactionnel à un instant donné, cela diminue l'effet piston provoqué par les gaz chauds et par conséquent tend à abaisser la vitesse spatiale de flamme (figure 5.2 de [66]).

Pour contrôler cette épaisseur, Arntzen et coll. [66] ont utilisé, au sein du code FLACS, un modèle dit  $\beta$ -flamme qui consiste à modifier les vitesses de combustion et diffusivités par l'introduction d'un paramètre utilisateur  $l_f$ . Le modèle permet ainsi théoriquement [80] de s'affranchir de la finesse du maillage et de fixer précisément, en accord avec les mesures expérimentales, l'épaisseur de la flamme. Arntzen et coll. ont arrêté cette dernière à trois mailles pour leurs études afin de contrôler la vitesse spatiale de flamme. Essayer de fixer une épaisseur de flamme trop faible induit une difficulté de résolution mathématique et une diffusion numérique dans le sens de l'écoulement, augmentant au final l'épaisseur de la flamme [66]. L'utilisation d'un modèle  $\beta$ -flamme pose toutefois quelques problèmes décrits notamment par Arntzen [66] : utilisation uniquement pour des flammes prémélangées sans gradients de concentrations (du fait de la modification des coefficients de diffusion), et nécessité d'un modèle spécifique à l'approche des parois. En outre, l'utilisation d'une épaisseur de flamme réduite mais fixe n'est pas réellement conforme aux variations observées lors des différents régimes de propagation. De plus, l'interaction de ce modèle avec le couplage combustion/turbulence peut poser des problèmes, le modèle  $\beta$ -flamme nécessitant une absence de turbulence près du front de flamme.

Toutefois, le modèle  $\beta$ -flamme présente une mise en œuvre facilitée, un faible coût de calcul, des résultats tout à fait acceptables. Il est, de plus, très proche du modèle actuellement utilisé dans le code TONUS, ce qui permet une adaptation peu contraignante de ce dernier.

## 4.5.2 PDF

Une approche probabiliste de la réaction en une (voire deux) étape(s), selon l'équation d'Arrhenius, consiste en la résolution de densité de probabilité. Beaucoup de publications [71] [78] [79] relatives à ce domaine d'étude sont très théoriques. Le modèle CREBCOM implémenté dans TONUS peut se rattacher à cette catégorie.

## 4.5.3 G équation, systèmes de particules

Le modèle de combustion proposé par Barrero [67] semble novateur mais il est malheureusement trop peu décrit pour savoir si l'option choisie sera porteuse de fiabilité et de rapidité de calcul : utilisant le fait que la flamme est une zone de séparation présentant de fortes similitudes avec une surface liquide/gaz, les auteurs proposent d'utiliser la méthode de Foster avec un minimum de modifications (cf. les références 14 et 15 citées dans la publication [67]). L'utilisation de particules sans masse donne la possibilité de bien saisir l'influence de la turbulence sur le déplacement fluide. Une variable binaire (0-1) permet de savoir si cette particule se trouve dans les gaz frais ou dans les gaz brûlés. La surface de flamme est ensuite déduite de la position et de la valeur de la variable binaire. Les auteurs n'explicitent pas la méthode de calcul permettant de définir la progression de la combustion. Cette approche, si elle présente l'avantage de ne pas épaissir le front de flamme, a l'inconvénient de ne pas tenir compte du tout de son épaisseur, ce qui peut induire des déviations lorsque la turbulence engendre un régime de flamme épaissie. Elle est fortement similaire à une approche de type G-équation [74] ou SIF (Simple Interface Flamme) [66].

Peu de modèles de combustion prennent en considération les phénomènes de pertes thermiques, du fait entre autres du manque de données expérimentales dans ce domaine. La seule publication récente trouvée, introduisant un code incluant ces effets, n'est pas adaptée pour des codes de sûreté, puisque modélisant une flamme stationnaire sur brûleur [70].

## 4.6 Couplage flamme-turbulence

La combustion est typiquement modélisée par deux types d'approche : directe et indirecte. Le couplage direct essaie de prévoir la densité de surface de flamme (FSD) par élément de volume et de modifier le taux de combustion de chaque cellule en fonction du plissement local de la flamme engendré par la turbulence. Les modèles indirects sont typiquement de type Eddy-Break-Up (EBU) qui module la vitesse de réaction en fonction de l'échelle de temps de turbulence.

### 4.6.1 Couplages directs

L'approche Densité de Surface de Flamme ([69], [73], [68], [81]) (Flame Surface Density, FSD), par la méthode BML (Bray Moss Libby model), implique une détermination d'un taux de surface de flamme par élément de volume. Le taux de réaction pour un élément de maillage est alors évalué par un taux de réaction par unité de surface/volume, multiplié par une estimation de la surface totale. L'évolution temporelle de la surface de flamme est contrôlée par des effets d'étirement. Ces derniers (principal, turbulent, de propagation et de courbure de flamme) induisent ainsi une augmentation ou une diminution du taux de

combustion. L'implémentation de l'approche FSD peut être effectuée de manière algébrique ou via des équations de transport.

Le code (TRF2D) utilisé par Patel et coll. [69] introduit des termes sources/puits déterminant la variation de taux de réaction chimique en fonction du taux de plissement (étirement) de la flamme. Les fonctions fixant ces variations sont implémentées sur la base de corrélations expérimentales (ici, dans le cas d'une flamme prémélangée d'hydrogène). Une validation a été effectuée et montre un bon accord code/expérience, notamment au niveau de la structure en jet de flamme induite par les rétrécissements de section ainsi que pour l'approche des deux flammes laminaires opposées derrière les obstacles centraux. Toutefois, l'effet d'enroulement de flamme, provoqué par la turbulence derrière les obstacles, n'est pas bien reproduit avec le code de calcul utilisé. Les auteurs pensent que cela peut expliquer les variations code/expérience observées sur la courbe de pression et que cela peut être corrigé par l'utilisation d'une viscosité dynamique non linéaire.

La contribution principale au plissement dans la zone de jet de flamme est induite par l'étirement principal, ce que les auteurs pensent être dû au couplage gradients/vitesse de flamme. Cela donne une interaction flamme/turbulence nettement plus marquée dans le domaine des flammes fortement plissées (dans un diagramme de Borghi :  $Re > 1$ ,  $Ka < 1$ ,  $v'/S_l > 1$ ) qu'à plus haut degré de turbulence, en accord avec la référence 25 [69]. Les auteurs pensent améliorer leur code de calcul en utilisant une approche LES.

#### 4.6.2 Couplages modélisés

Il existe plusieurs types de couplage combustion/turbulence entièrement simplifiés, étant donné que même la LES ne permet pas d'atteindre des résolutions suffisantes pour prendre en compte les rides et plissements de la flamme. Chakravarthy et Menon [74] ont pour cela spécifiquement adopté un modèle de flammelles dit LEM (Linear Eddy Mixing, originalement décrit dans les publications 20, 21, 35 référencées par [74]), qui offre une très bonne adéquation avec les résultats expérimentaux tout en présentant un coût de calcul limité. Le couplage LEM - LES est également nettement plus réaliste du point de vue de l'épaisseur de flamme qu'un couplage G-équation - LES.

Le modèle "de vitesse de flamme" est simple à mettre en place, établissant la vitesse de combustion turbulente en fonction des données fournies par la LES d'un côté (intensité de turbulence) et de la vitesse fondamentale de flamme de l'autre (références 1 et 34 de [74]).

Le modèle le plus répandu est le modèle dit "Eddy-Break-Up" [4]. Celui-ci a connu un franc succès car il peut être facilement couplé avec un code de fluide turbulent k-ε et donnant de meilleurs résultats qu'un simple modèle basé sur une loi d'Arrhenius. Le modèle EBU est à la base indépendant de la chimie dans la mesure où la vitesse de combustion est entièrement fixée par une constante et par des sorties du code de turbulence : temps de turbulence et fluctuation de température. Ce modèle a ainsi tendance à surestimer la vitesse de combustion en auto accélérant trop la propagation de la flamme [4], [1]. Cette indépendance vis-à-vis de la chimie a depuis été remise en question : remplacement de la constante par une fonction afin de tenir compte des vitesses fondamentales de flammes induites par les teneurs en réactifs, de la pression, de la température... Dans la littérature récente, peu de publications y font référence car le modèle est maintenant bien connu et disponible dans de nombreux codes de calculs commerciaux. Certains documents font état de calculs sur l'installation RUT (ref. 4.53

à 4.58 de [1]). Le modèle EBU est enfin assez bien adapté à une approche "sûreté d'installation" dans la mesure où son faible coût de calcul permet de travailler sur des structures complexes et où sa surestimation de l'accélération de flamme induit de facto une estimation des cas les plus destructeurs. Ses inconvénients, cités ci-dessus, rendent l'interprétation des résultats intermédiaires hasardeuse [4].

Une autre approche de modélisation du couplage combustion/turbulence est la PDF ([76], [71], [78], [79], [4]) ainsi que les modèles combinant PDF et physique tels que celui de Bray Moss Libby (BML) [74], [4]. Le modèle BML est toutefois très dépendant de ceux déterminant une échelle intégrale de plissement de flamme dont les formulations empiriques présentent des plages de validation souvent limitées aux régimes dits des "flammelettes" (référence 9 du document [69], [69] et [1 §4.22]).

Le Code FLACS [66], quant à lui, utilise directement deux corrélations obtenues par Bradley et Abdel-Gayed, établies selon deux régimes de turbulence ; la vitesse spatiale choisie à tout instant du calcul est la valeur minimale estimée par les deux formules [66 p. 152-153].

$$S_T = 0,875 * u' * K^{-0,392} \quad \text{et} \quad K = \frac{\alpha}{S_l^2} \frac{u'}{\lambda_{Taylor}}$$

où  $\lambda_{Taylor}$  est l'échelle microscopique de Taylor.

Les corrélations utilisées pour des hydrocarbures typiques des plateformes pétrolières (domaine d'application de FLACS) doivent toutefois être adaptées en fonction du carburant intervenant dans le scénario. L'hydrogène, impliqué dans la sûreté des réacteurs nucléaires, étant très différent des autres carburants de part sa diffusivité et son potentiel énergétique qui lui confèrent une accélération de flamme plus importante, est un cas particulier.

## 5 Conclusion

Les travaux sur la détermination des paramètres fondamentaux de la combustion dans des conditions physico-chimiques d'accident grave sont très peu nombreux car la prise en compte de la correction pour une flamme à étirement nul est récente. Or, l'évaluation de valeurs correctes est nécessaire à la modélisation des scénarios d'accidents.

La pression et de la température initiales, de la teneur en vapeur d'eau sont autant de paramètres qui influent sur la vitesse fondamentale à étirement nul. Dans le cadre des études de sûreté nucléaire ces données sont nécessaires. Or elles ne sont pas disponibles dans la littérature.

Les propagations accélérées de flammes d'hydrogène ont fait l'objet de diverses études. Toutefois celles-ci portent surtout sur les cas de détonation ou de transition vers la détonation. Elles sont beaucoup moins fournies pour les mélanges très pauvres qui ne peuvent transiter vers la détonation. Or il ressort des travaux publiés que des déflagrations accélérées peuvent avoir un impact destructeur sur les structures. Les mécanismes d'accélération sont encore complexes et le comportement de la flamme lors de la présence de gradients de concentration n'est pas encore décrit dans la littérature.

Enfin les modélisations numériques sont l'objet d'une intense recherche. Toutefois la complexité des phénomènes amène à faire des compromis et des choix susceptibles d'influer

sur la validité des calculs. Les différentes approches ont été détaillées afin de dégager leurs avantages et inconvénients en vue d'une utilisation dans le code TONUS.

## **CHAPITRE II**

### **DISPOSITIFS EXPERIMENTAUX**

Comme cela a été dit précédemment, deux objectifs de cette thèse sont d'une part, d'acquérir des données sur les vitesses normales de combustion et d'autre part d'élaborer des critères de limite d'accélération de flamme. Nous disposons pour cela de deux installations : la bombe sphérique et l'enceinte d'Accélération de Flamme (ENACCEF).

## **1 Bombe sphérique**

Pour la détermination des vitesses normales de combustion, la technique adoptée au laboratoire est celle de la bombe sphérique. Celle-ci était disponible avant ces travaux de thèse et a fait ponctuellement l'objet de modifications mineures, notamment du montage optique et du système d'enregistrement vidéo. Son fonctionnement est simple :

Une étincelle est produite au centre d'une enceinte sphérique rigide contenant un mélange combustible gazeux. Cette source d'inflammation, lorsqu'elle a une énergie suffisante, peut donner naissance à une flamme. Cette dernière se propage sphériquement depuis le centre vers les parois de l'enceinte. L'absence de turbulence initiale n'induit pas de plissement initial.

Lors de la propagation, le dégagement de chaleur dû à la combustion provoque une expansion thermique derrière le front de flamme. Ce phénomène augmente la pression dans l'enceinte, les gaz frais et brûlés sont comprimés de façon sensiblement adiabatique et les températures s'accroissent de part et d'autre du front de flamme. La pression et la température du milieu dans lequel le front de flamme se propage deviennent supérieures aux valeurs initiales. On peut cependant admettre que, pour un rayon de flamme (position radiale du front)  $r$  suffisamment petit devant le rayon interne de l'enceinte, la propagation de la flamme s'effectue à la pression et la température initiales car le volume des gaz brûlés est petit devant le volume des gaz frais.

La vitesse normale de combustion peut être calculée à partir de la mesure de la vitesse spatiale de propagation de la flamme ou bien d'après l'enregistrement de la pression en fonction du temps.

L'acquisition de la séquence vidéo permet d'observer la propagation de la flamme, et en particulier, elle présente l'avantage de pouvoir contrôler la forme de la flamme au cours du temps : on peut ainsi vérifier si la flamme reste sphérique ou si l'on a une direction privilégiée de cette dernière, introduisant ainsi une asymétrie du front de flamme par rapport à la source d'inflammation.

### **1.1 Description de l'appareillage**

L'enceinte expérimentale est une chambre sphérique en acier inoxydable de 8 litres environ (250 mm de diamètre interne), munie de deux cols sur lesquels sont fixés deux hublots plans diamétralement opposés. Les hublots, d'une épaisseur de 30 mm, offrent un passage optique de 70 mm de diamètre.

Deux électrodes en tungstène sont montées diamétralement opposées. Elles sont reliées à un système de décharge de haute tension permettant de produire une étincelle à l'origine de l'inflammation du mélange combustible. Le circuit est constitué d'un circuit de charge / décharge de condensateurs 2000 nF envoyant une impulsion amplifiée en tension

(15 kV ou 30 kV) par un transformateur. L'espace entre les électrodes (de l'ordre du millimètre) est réglable et le point d'inflammation est situé au centre de la sphère.

La tension et l'intensité de décharge sont mesurées respectivement au moyen d'une sonde de courant et d'une sonde haute tension (Tektronix P6015A + P6015A FT). Les signaux sont enregistrés au moyen d'un oscilloscope numérique (Figure 7). Celui-ci envoie également un signal TTL permettant la synchronisation de l'acquisition vidéo et des enregistrements de capteurs aux parois.

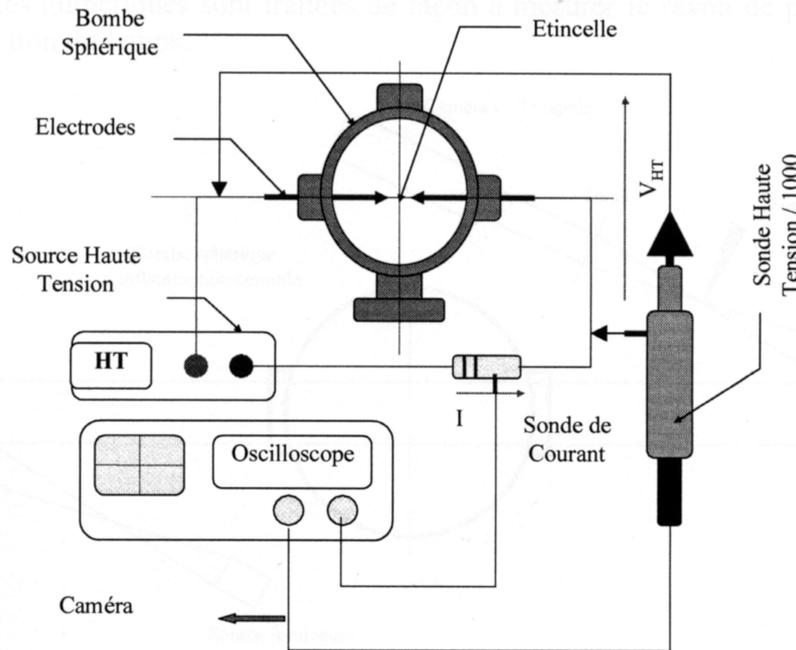


Figure 7 : Système d'inflammation couplé à la bombe sphérique.

## 1.2 Préparation des mélanges combustibles

Les différents gaz utilisés sont de qualité alpha1 (soit "pureté laboratoire") et sont fournis par Air Liquide. Ainsi les puretés de l'hydrogène et de l'hélium sont supérieures à 99,999 % et celle du CO<sub>2</sub> est de plus de 99,95 %. L'air utilisé est reconstitué avec un rapport azote sur oxygène de 4 (80 N<sub>2</sub> – 20 O<sub>2</sub>). Un panneau de distribution permet d'amener les gaz au niveau de l'appareillage expérimental. Les mélanges sont préparés, suivant la méthode des pressions partielles, dans un réservoir en acier inoxydable muni d'un agitateur magnétique. L'ensemble de l'appareillage est équipé d'un système de câbles chauffants régulés et d'un calorifugeage afin de limiter les pertes thermiques. La température initiale peut atteindre 373 K. Les pressions, intermédiaires et finale, sont mesurées au moyen d'un manomètre capacitif de type MKS 621C-14TBFH (gamme de mesure 0 à 13 bars).

## 1.3 Montage optique

Les flammes hydrogène - air sont très peu lumineuses dans le domaine spectral visible. Les essais réalisés ont montré qu'en deçà de 20 % d'hydrogène en volume dans l'air, l'élément sensible de la caméra ne permet pas de visualiser directement le front de flamme. Pour remédier à ce problème, la bombe sphérique est équipée d'un système de strioscopie laser afin d'observer non pas la flamme en direct mais l'ombre de cette dernière. Cette

méthode s'appuie sur la déviation de rayons lumineux parallèles par une variation d'indice optique. Cet indice est ici modifié par la variation de densité et de température de part et d'autre du front de flamme.

Le montage optique est un montage Schlieren en type Z (Figure 8) avec deux miroirs hémisphériques de 100 mm de diamètre et de 50 cm de focale placés de part et d'autre de la bombe sphérique. La source lumineuse est un laser à argon ionisé de 10 W de puissance maximale (Spectra Physics 2017). Une première lentille bi-convergente permet d'obtenir un faisceau parallèle. Ce dernier est focalisé par une seconde lentille bi-convergente au point focal objet du miroir hémisphérique. Le faisceau de lumière parallèle traverse la bombe sphérique avant d'être focalisé par un second miroir hémisphérique. La présence d'un couteau au point focale image intercepte la lumière non déviée. Les images sont projetées sur un écran placé entre le point focal image et la caméra. La caméra utilisée est une caméra numérique rapide équipée d'un détecteur de ½ pouce de diamètre et constitué de 256x256 pixels. La fréquence d'acquisition maximale est de 4 500 images par seconde en plein format et peut atteindre 40 500 images par seconde pour un format partiel.

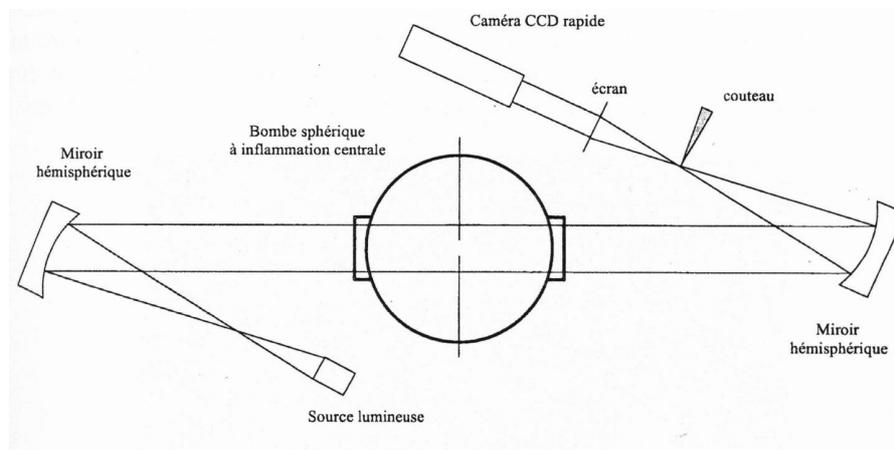


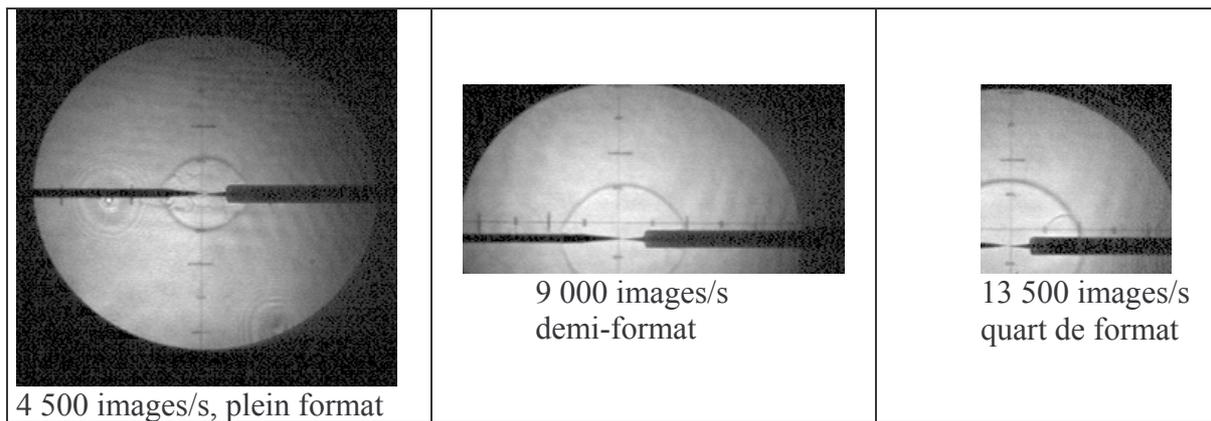
Figure 8 : Schéma du dispositif de visualisation de la flamme par la méthode Schlieren.

Un tel montage en Z permet de limiter l'encombrement de l'installation ainsi que les aberrations optiques. Afin de limiter la déformation de l'image enregistrée, l'optimisation nécessaire du dispositif optique consiste principalement à diminuer les angles d'arrivée de la lumière sur le miroir.

Pour l'étude de certaines flammes particulièrement rapides (mélange dans l'Hélium notamment) un obturateur optique est placé devant la source laser afin de limiter l'intégration temporelle du parcours de la flamme pendant le temps d'ouverture de la caméra. L'obturateur est piloté par un générateur de fréquence en phase avec la caméra numérique. De cette façon le faisceau laser parcourt la bombe pendant une fraction du temps d'acquisition de la caméra et l'effet de flou est évité.

## 1.4 Acquisition vidéo

A partir des images numériques enregistrées par la caméra, une mesure du rayon de la flamme peut être déduite en utilisant le logiciel Visilog 5.2, fournissant une valeur du taux d'accroissement du rayon en fonction du temps. La méthode de dérivation du rayon de la flamme en fonction du temps dépend du type d'images enregistrées et plus précisément du format utilisé. La figure suivante illustre les trois formats possibles en fonction de la vitesse d'acquisition de la caméra.

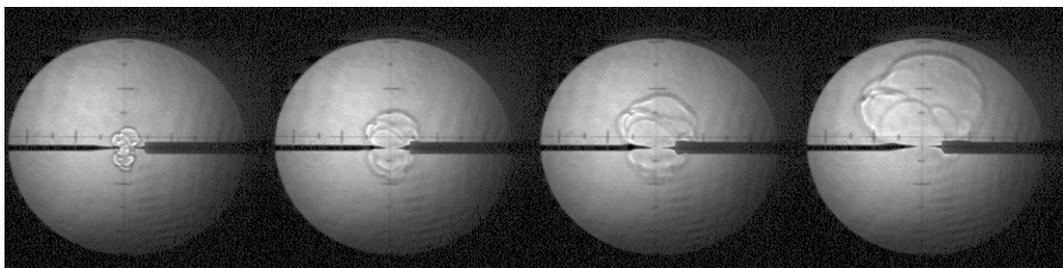


**Figure 9 : Images enregistrées par la caméra numérique rapide à différentes cadences d'acquisition.**

Le choix du format est déterminé par la vitesse spatiale de propagation de la flamme.

- le plein format pour des flammes se propageant à des vitesses inférieures à  $4 \text{ m.s}^{-1}$ ,
- demi-format pour des vitesses de propagation comprises entre 4 et  $8 \text{ m.s}^{-1}$ ,
- quart de format pour des vitesses de propagation supérieures à  $8 \text{ m.s}^{-1}$ .

Dans tous les cas, une série d'images enregistrées en plein format est réalisée afin de s'assurer de la sphéricité (image projetée en forme de disque) et de la planéité de la flamme (absence de plissement de flamme, disque homogène) et d'en déduire ainsi le domaine de mesures. En effet, à partir de l'instant où le front de flamme n'est plus sphérique ou si l'on note une direction de propagation privilégiée comme on peut le voir sur la Figure 10, alors les images correspondantes ne participent pas au traitement de données.



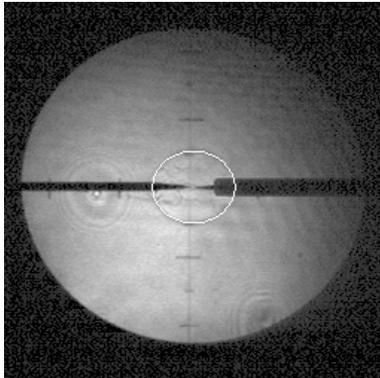
**Figure 10 : Propagation asymétrique d'une flamme dans le cas d'un mélange constitué de 8 %  $\text{H}_2$  + 92 % Air initialement à température ambiante et pour une pression initiale de 200 kPa.**

Si l'apparition d'une direction privilégiée dépend essentiellement des conditions de richesse, la composition des gaz neutres, la température et la pression participent au plissement de la flamme. Celui-ci se manifeste plus ou moins tardivement pendant la propagation, selon les conditions initiales. Les images correspondantes sont alors également écartées du traitement puisque la surface de la flamme ne peut être estimée correctement.

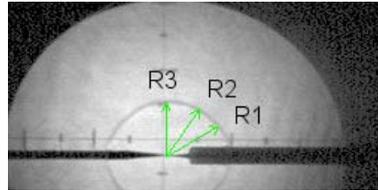
## **1.5 Vitesses spatiales de propagation de flamme**

Le traitement des images s'effectue en tenant compte de la déformation de l'image par le montage optique, soit

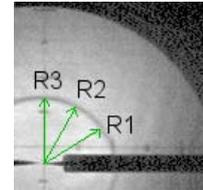
- si l'image est plein format en utilisant la superposition d'une ellipse dont on déduit les rayons verticaux et horizontaux. Un rayon équivalent à une propagation radiale ( $R_f = \sqrt{R_{\min} * R_{\max}}$ ) est alors obtenu.
- soit en effectuant trois mesures de rayons (demi et quart format). Une moyenne des trois rayons est déterminée.



surface ellipse (plein format)



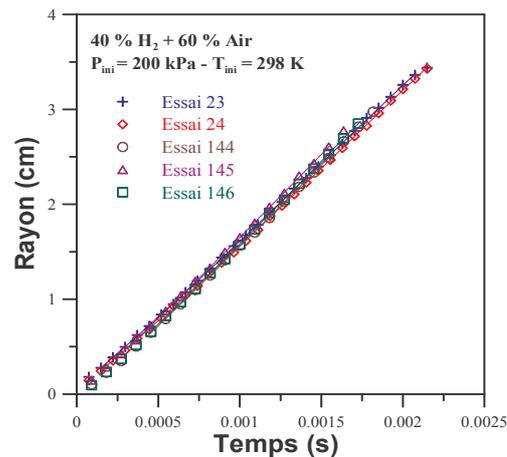
Trois de rayons mesurés  
(demi format)



Trois rayons mesurés  
(quart format)

**Figure 11 : Illustration du choix du rayon de la flamme pour différents formats d'images.**

$R_f$  est le rayon de la flamme. Ainsi, on peut tracer son évolution en fonction du temps comme on peut le voir dans la Figure 12.



**Figure 12 : Evolution du rayon de la flamme en fonction du temps pour un mélange constitué initialement de 40 % d'hydrogène dans l'air (richesse  $\Phi = 1,667$ ). La pression initiale est de 200 kPa et la température initiale est de 298 K.**

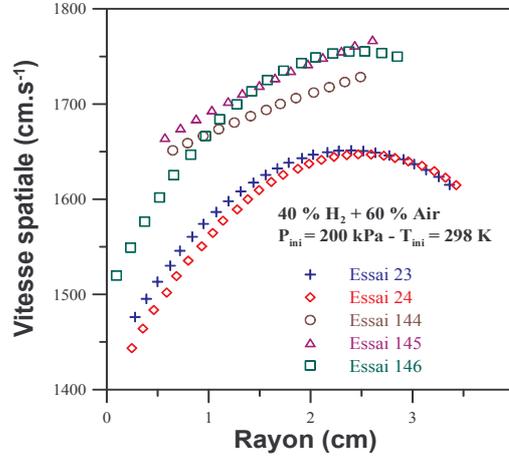
La vitesse spatiale de flamme est directement déduite de sa variation temporelle :

$$V_s = \frac{dR_f}{dt} \quad \text{Eq. 3}$$

Comme on peut le voir sur la Figure 13, la vitesse de propagation de la flamme varie en fonction de sa position. En effet, au cours de sa propagation, le rayon de la flamme augmente ce qui a pour effet de modifier l'étirement auquel est soumis la flamme, noté  $K$ , et qui lui aussi diminue. Il correspond à la variation relative de surface de flamme  $A$  :

$$K = \frac{1}{A} * \frac{dA}{dt} \quad \text{Eq. 4}$$

avec  $A = 4 \cdot \pi \cdot R^2$



**Figure 13 : Evolution de la vitesse spatiale de propagation de flamme en fonction du rayon de la flamme pour un mélange constitué initialement de 40 % d'hydrogène dans l'air ( $\Phi = 1,667$ ). La pression initiale est de 200 kPa et la température initiale est de 298 K.**

Dans le cas d'une flamme laminaire en expansion sphérique, l'étirement du front de flamme est alors donné par :

$$K = \frac{2 * V_s}{R_f} \quad \text{Eq. 5}$$

Une analyse asymptotique [14, 23 25, 27, 105, 9, 82] a mis en évidence une relation linéaire entre l'étirement ( $K$ ) et la vitesse fondamentale de la flamme laminaire ( $S_L$ ), lorsque  $K$  est faible et que le nombre de Zeldovich  $\beta$  (l'énergie d'activation réduite) est grand. Nous obtenons alors :

$$S_L = S_L^0 - L * K \quad \text{Eq. 6}$$

où  $S_L^0$  est la vitesse fondamentale à étirement nul et  $L$  est la longueur de Markstein.

Taylor et collaborateurs [7], [8] ont procédé par intégration de ces équations afin d'obtenir une relation sur le rayon de flamme en fonction du temps :

$$R_f + b \cdot \ln(R_f) = V_s^0 \cdot t + cste \quad \text{Eq. 7}$$

où  $t$  est le temps,  $b$  une constante associée à la longueur de Markstein. La valeur de  $V_s^0$  recherchée ici est déterminée par régression linéaire.  $S_L^0$  est alors obtenu en divisant  $V_s^0$  par le taux d'expansion thermique  $\sigma = \rho_u / \rho_b$ .

Cette procédure remplace celle précédemment utilisée au début de ces travaux de thèse [11], [12]. Elle présente l'avantage de minimiser les sources d'erreur et d'approximation qui

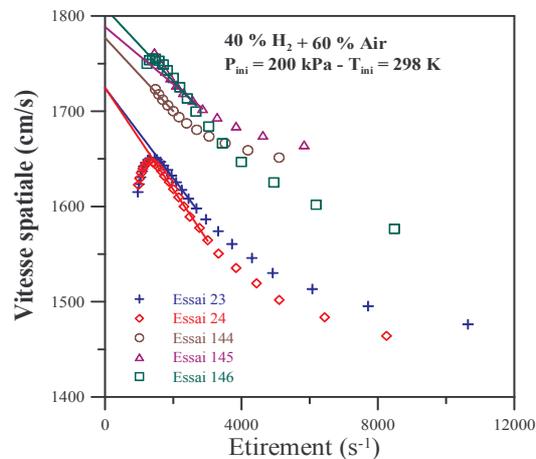
pouvaient intervenir lors de l'établissement puis de la dérivation d'une régression polynomiale de la courbe  $R_f = f(t)$ .

Pour de faibles taux d'étirement, une droite de régression est utilisée pour rendre compte de l'évolution. La pente de vitesse en fonction de l'étirement (Figure 14) nous donne la longueur de Markstein  $L$  :

$$V_s = V_s^0 - L \cdot K \quad \text{Eq. 8}$$

Ce dernier paramètre est relié à la longueur de Markstein des gaz brûlés  $L'$  définie par l'équation suivante :

$$L = L' \cdot \sigma \quad \text{Eq. 9}$$



**Figure 14 : Evolution de la vitesse spatiale de propagation de flamme en fonction de l'étirement pour un mélange constitué initialement de 40 % d'hydrogène dans l'air ( $\Phi = 1,667$ ). La pression initiale est de 200 kPa et la température initiale est de 298 K.**

## 1.6 Vitesses normales de combustion

Une fois la vitesse spatiale de propagation à étirement nul connue, il est aisé de déduire la vitesse normale de combustion à étirement nul en divisant la vitesse spatiale à étirement nul par le facteur d'expansion des gaz brûlés.

$$S_L^0 = \frac{V_s^0}{\sigma} \quad \text{Eq. 10}$$

L'estimation de  $\sigma$  dépend de la composition, de la température adiabatique de flamme et de la pression finale de combustion. Nous l'obtenons à l'aide du programme VFB6 développé au laboratoire.

## 1.7 Outils de simulation

L'utilisation de la simulation fut nécessaire afin d'accéder aux vitesses spatiales de mélanges inaccessibles expérimentalement. Les méthodes de propagation libre, telle que la

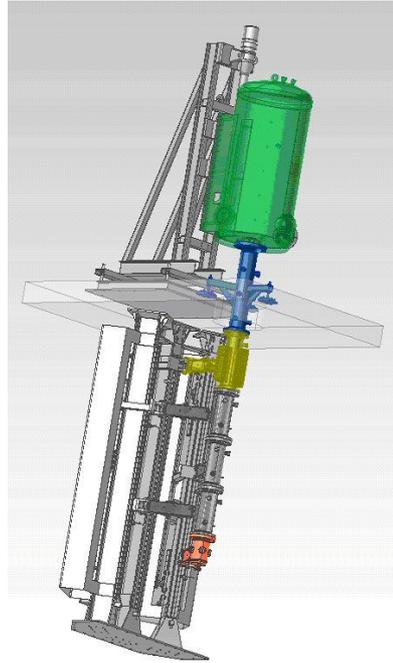
bombe sphérique, permettent l'étude de mélanges plus pauvres en hydrogène que ceux utilisables sur brûleur. Toutefois les mélanges pauvres se trouvent limités par les instabilités thermo-diffusives qui se caractérisent par un plissement du front de flamme visible plus ou moins tardivement. Dans certaines conditions, il n'est pas possible d'avoir une propagation laminaire sur un intervalle de temps assez long, rendant l'exploitation de données relatives à ces conditions impossible. L'accès à ces données par simulation devient alors incontournable.

La simulation de propagation de la flamme a été réalisée à partir de schémas de cinétique chimique disponibles dans la littérature. La modélisation a été effectuée avec le logiciel RUN-1DL développé par Rogg et coll. [83] [84], combiné à Chemkin-II. Ce dernier est utilisé en tant que pré-processeur afin de déterminer les propriétés de transport et thermodynamiques des espèces mises en jeu. La position de la flamme déduite des données issues de RUN1DL est fixée à une température médiane entre les conditions initiales et finales de la combustion adiabatique. La vitesse fondamentale de flamme à étirement nul est directement donnée par le code PREMIX [97], alors qu'il est déduit de la courbe position = f (temps) avec RUN-1DL.

Dans les deux cas, les simulations sont effectuées en utilisant une approximation de transport incluant de multiples composants et les effets thermiques. La base de données thermochimiques et cinétiques utilisée est celle de Marinov et coll. [5], mis à part pour le CO<sub>2</sub> et l'hélium. Afin de prendre en compte les effets de la dilution par le CO<sub>2</sub> et l'hélium, quatre réactions élémentaires sont ajoutées. Les constantes de vitesse utilisées pour ces gaz et réactions sont celles du GRI.

## 2 ENACCEF

Une ENceinte d'ACCElération de Flamme (ENACCEF) a été construite au LCSR-CNRS d'Orléans pour analyser la propagation des flammes en milieu confiné (Figure 15). Elle reproduit à échelle réduite et avec une géométrie simplifiée une partie de l'enceinte de confinement d'un bâtiment réacteur à même d'accélérer notablement une flamme de prémélange. Le dispositif comprend un tube d'accélération surmonté d'un dôme.



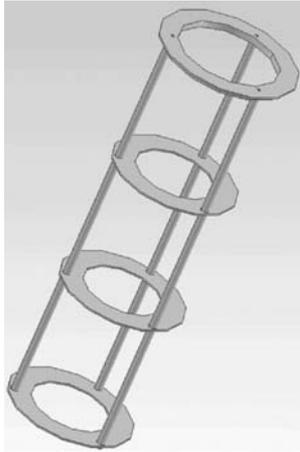
**Figure 15 : Vue d'ensemble de l'enceinte ENACCEF**

## **2.1 Description du tube**

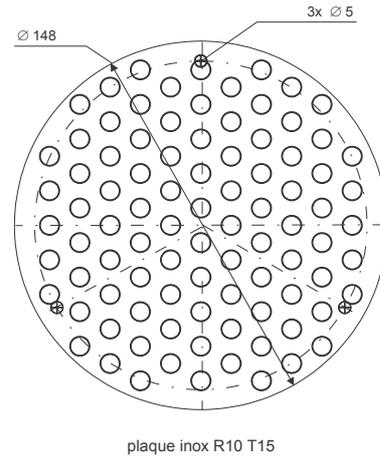
La partie "tube d'accélération" représente une casemate de générateur de vapeur. Elle a une longueur de 3,2 m et un diamètre de 154 mm. Elle est équipée en partie basse d'un allumage par étincelle entre deux électrodes de tungstène (élément rouge Figure 15) qui, comme pour la bombe sphérique, donne naissance à une déflagration laminaire.

Au dessus de la section d'allumage, une partie du tube est équipée d'obstacles répétés dont la forme ainsi que la localisation peuvent être modifiées afin d'optimiser l'accélération de la flamme. Ils sont reliés par des entretoises (Figure 16) dont la hauteur est de 0.16 m. Le premier obstacle est positionné à 0,638 m du point d'inflammation. Deux séries sont nécessaires afin de permettre une configuration avec 9 obstacles.

Les obstacles sont de deux formes : anneaux et grilles. Le taux de blocage (surface libre / surface totale) est variable (0,33 ; 0,40 ; 0,50 ; 0,63) pour les obstacles annulaires, et égal à 0,6 pour les grilles (trous de 10 mm espacés de 15 mm en disposition hexagonale).

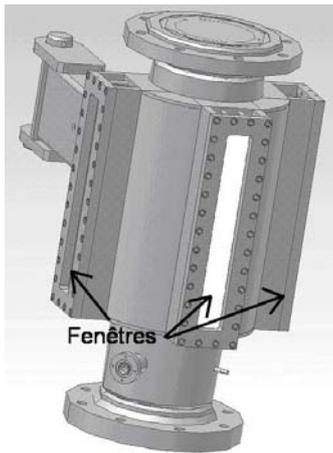


**Figure 16 : Vue d'ensemble d'un assemblage d'obstacles annulaires**



**Figure 17 : Grilles de taux de blocage 0,6**

A une distance de 1,9 m du point d'inflammation (partie jaune de la Figure 15), sont positionnées trois fenêtres rectangulaires en quartz (40 mm x 300 mm de diamètre optique), format un T par rapport à l'axe vertical (Figure 18). Elles permettent l'enregistrement vidéo en ombroscopie ou tomographie, ainsi que l'utilisation de diagnostics optiques tels que la LDV (Vélocimétrie Doppler Laser).



**Figure 18 : Section du tube accueillant les fenêtres en quartz.**



**Figure 19 : Schéma de l'obstacle central (simili GV).**

La dernière section du tube (élément bleu de la Figure 15) peut, selon les besoins des études, être obstruée par un obstacle central représentant un générateur de vapeur (appelé "simili GV") d'une enceinte de réacteur nucléaire (Figure 19).

## **2.2 Description du dôme**

La partie supérieure, cylindrique, de grande dimension est représentative du dôme d'une enceinte de confinement de réacteur nucléaire. Ce dôme a une longueur de 1,7 m et de 738 mm de diamètre interne (élément vert sur la Figure 15).

Il est connecté au tube d'accélération par une pièce supplémentaire conçue afin d'accueillir, selon les besoins, un diaphragme ou une membrane, dans le but de séparer physiquement le tube et le dôme.

La partie cylindrique du dôme est équipée de :

- ✓ 3 piquages de 168,3 mm de diamètre (épaisseur 7,0 mm) et de 80,0 mm de long. Deux sont diamétralement opposés, le troisième est à 90° du plan des deux autres. Ces piquages servent de support à des hublots de visualisation constitués de disques en quartz de 180 mm de diamètre et 42 mm d'épaisseur. L'axe des hublots est situé à 199,5 mm de la face extérieure du fond.
- ✓ 5 bossages de 30 mm de diamètre sont équidistants de 250 mm, l'axe du premier est situé à 199,5 mm de la face extérieure du fond plat. Ces bossages sont destinés à recevoir des disques de quartz (diamètre : 10 mm, épaisseur : 3 mm) en face desquels sont montés des photomultiplicateurs.
- ✓ 2 bossages DN25 NPT 3000 ; le premier est situé à 160 mm de la face extérieure du fond plat, le second est à 950 mm du premier. Ils sont destinés au pompage de l'installation.
- ✓ 2 bossages DN8 NPT 3000, le premier, destiné à l'entrée des gaz, est situé à 310 mm de la face extérieure du fond plat ; le second bossage destiné à raccorder un manomètre capacitif est situé à 120 mm du premier.

Le fond torisphérique supérieur est équipé de :

- ✓ 1 bossage de 30 mm de diamètre destiné à recevoir un capteur piézo-électrique de type ChimieMétal, situé à 1 577 mm de la face externe du fond plat.
- ✓ 1 bossage de 40 mm de diamètre destiné à recevoir un capteur piézo-électrique de type PCB, situé à 1 677 mm de la face externe du fond plat.
- ✓ 1 anneau de fixation central destiné à suspendre l'installation sur son support.

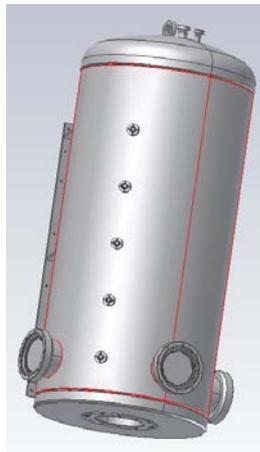


Figure 20 : Schéma de l'enceinte supérieure ou dôme.

### 2.3 Protocole expérimental

Après avoir effectué le vide dans l'enceinte (en dessous de 1 pascal), les gaz sont introduits. L'hydrogène utilisé a une pureté de plus de 99,95 %. L'air (desséché compressé) provient d'une ligne alimentant le laboratoire. Le mélange diluant, constitué de 40 % de He et 60 % de CO<sub>2</sub>, (reproduisant physiquement la vapeur d'eau, comme expliqué ci-après) est fourni sur commande spécifique par Air Liquide. Les mélanges combustibles sont effectués sur la ligne d'alimentation grâce à l'utilisation de débitmètres programmables (MKS1179A). Deux lignes distinctes permettent l'introduction des gaz dans le dôme et dans le tube. La pression finale d'introduction est de 100 kPa. Les expériences sont toutes effectuées à température initiale ambiante.

Etant donné que la vapeur d'eau est présente dans les cas d'accidents graves en centrale nucléaire, mais que le chauffage homogène de l'installation est difficile, un mélange substitutif à la vapeur d'eau a été élaboré avant ces travaux de thèse. Mis au point par simulation, ce mélange a pour but de reproduire au mieux les caractéristiques physiques (thermodynamique et transport) de la vapeur d'eau. Le mélange 40 mol% He et 60 mol% CO<sub>2</sub> est le meilleur compromis selon les critères suivants : coefficient de capacité calorifique Cp, diffusivité et conductivité thermique ( $\lambda$  et  $\alpha$ ) ainsi que coefficient de diffusion massique.

## **2.4 Diagnostics associés**

L'installation ENACCEF est hautement instrumentée pour suivre l'évolution de la flamme, les chargements en pression et analyser la turbulence engendrée dans les gaz frais en avant du front de flamme. La composition des mélanges peut être contrôlée en différents points de l'enceinte par chromatographie gazeuse couplée à la spectrométrie de masse. L'ensemble du dispositif permet d'analyser de façon détaillée le comportement de la flamme dans une enceinte encombrée d'obstacles. Il a pour but notamment de tester la pertinence des critères d'accélération et d'évaluer les effets de gradients de concentration d'hydrogène dans de l'air humide sur la propagation de la flamme.

Outre les hublots décrits précédemment, l'installation dispose de 16 petits accès optiques par hublots en quartz (diamètre optique 8 mm) munis de capteurs de lumière (actuellement des tubes photomultiplicateurs UV-visible, de marque HAMAMATSU référence 1P28). Le signal qu'ils renvoient renseigne sur les temps de passage du front de flamme. Des capteurs de choc (7 transducteurs, produits par CHIMIE METAL) sont également disposés le long de l'installation afin de détecter l'onde de montée en pression accompagnant le front de flamme. Ces capteurs de choc ne sont pas calibrés, contrairement aux deux capteurs PCB (un en haut du tube et un en haut du dôme). Ces capteurs de pression PCB permettent d'avoir une mesure de la montée en pression avant échauffement par la flamme, cette dernière entraînant une chauffe du capteur et, par conséquent, une dérive thermique du signal. Les signaux des différents capteurs sont enregistrés à une fréquence de 20 000 points par seconde et par voie sur deux cartes oscilloscopes du PC d'acquisition. Le signal de référence (TTL) est, comme pour les propagations en bombe sphérique, fourni par un boîtier relié à la sonde de tension : l'impulsion de tension créant l'étincelle indique le temps zéro dans les enregistrements de signaux.

## **2.5 Traitement des données**

Le critère de temps de passage de flamme retenu est la déviation de la ligne de base, aussi bien pour les capteurs de lumière (comme présenté Figure 21) que pour les capteurs de choc ou de pression (Figure 22). Les temps de passage, déduits des signaux enregistrés à des positions données (Figure 23), établissent le profil de vitesse de flamme le long de l'installation. Le premier signal de pression diffère des signaux lumineux car la flamme est initialement laminaire. L'accroissement de la turbulence au cours de la propagation, les différences stochastiques d'historique sont nettement plus marquées en bout d'installation qu'en début. Une moyenne est ensuite opérée sur un certain nombre d'essais afin d'en déduire une tendance représentative.

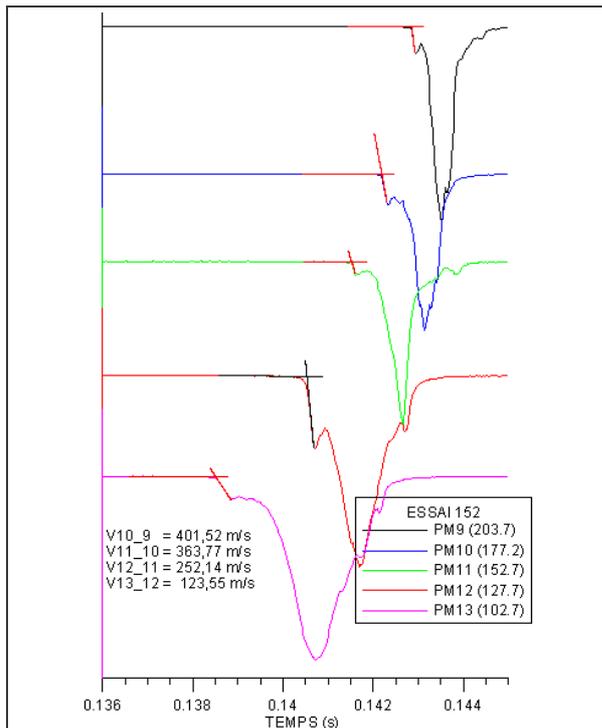


Figure 21 : Exemple de détection de position de flamme par émission lumineuse recueillie par les photomultiplicateurs dans la zone des obstacles. Le mélange initial contient 13 % d'hydrogène dans l'air, à température ambiante et pression de 100 kPa. Le tube est équipé de 9 anneaux caractérisés par un taux de blocage de 0,63.

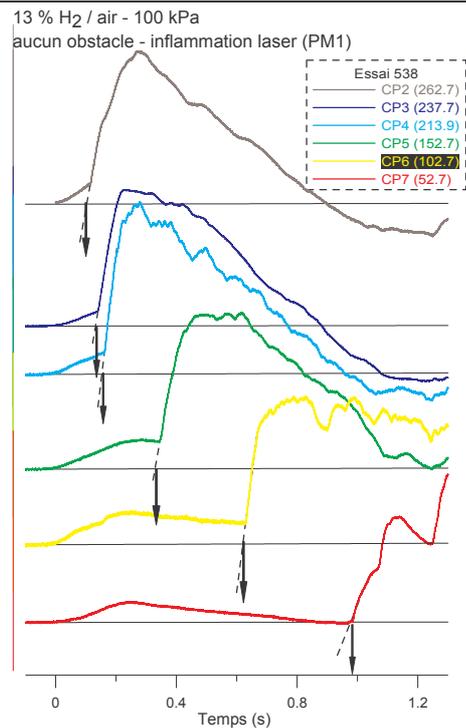


Figure 22 : Exemple de détection de position de flamme par onde de pression recueillie par les capteurs de chocs dans la zone des obstacles. Le mélange initial contient 13 % d'hydrogène dans l'air, à température ambiante et pression de 100 kPa. Le tube est dépourvu d'obstacle et l'inflammation a lieu dans le dôme.

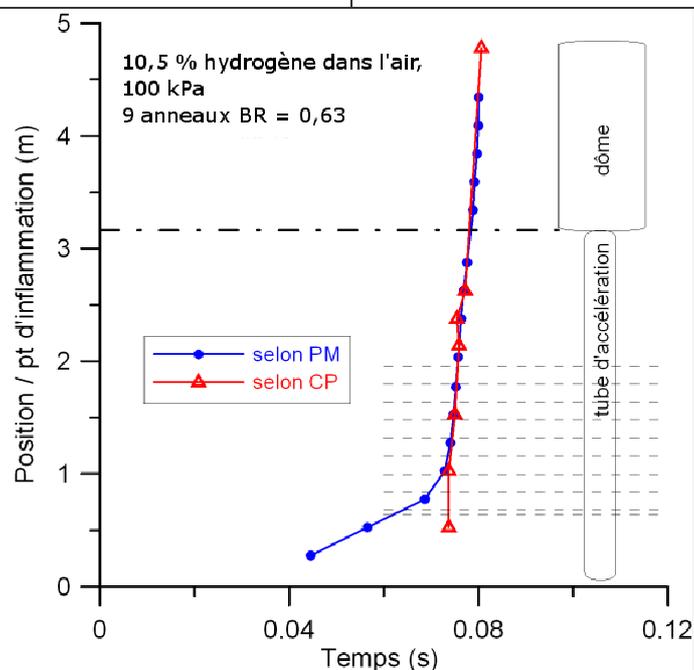


Figure 23 : superposition des profils de position du front de flamme en fonction du temps, obtenus à partir des signaux de pression et signaux lumineux.

## 3 Mélange mimique de la vapeur d'eau

### 3.1 Objectif

Les scénarios d'accidents graves dans des installations nucléaires impliquent souvent une atmosphère humide et chauffée. Or cet aspect est difficilement compatible avec l'observation des flammes accélérées avec l'installation ENACCEF. En effet, la taille de celle-ci pose des incertitudes sur l'homogénéité de la température et par conséquent de la teneur en vapeur d'eau (points de condensation éventuels). Ensuite, les sensibilités thermiques des capteurs utilisés pour suivre l'évolution de la flamme vont induire des erreurs ou des impossibilités de mesure.

L'objectif de cette partie est donc d'établir les compositions de mélanges diluants pouvant se substituer à la vapeur d'eau, que celle-ci soit chauffée ou non.

### 3.2 Contraintes

Les deux contraintes majeures dans la recherche d'un mélange mimique de la vapeur d'eau sont :

- le respect des paramètres caractéristiques de la molécule d'eau indépendamment des effets de la température initiale,
- la recherche d'un mélange permettant de s'affranchir des effets liés à la température initiale de travail.

Ces mélanges doivent également, dans la mesure du possible, respecter les aspects cinétiques de l'oxydation de l'hydrogène dans l'air. Les premières espèces gazeuses évidentes sont :  $\text{CO}_2$ ,  $\text{N}_2$  et He. Ce sont en effet des molécules qu'on peut considérer comme étant inertes (sur le plan cinétique) dans le domaine de notre étude. Une étude [85] a montré que la prise en compte ou non des réactions faisant intervenir  $\text{CO}_2$  dans le modèle cinétique d'oxydation de l'hydrogène n'entraîne pas de variation sur les vitesses fondamentales calculées. De plus, dans le cas où ces réactions sont incluses dans le modèle, l'analyse montre que  $\text{CO}_2$  ne se dissocie pas lors de l'oxydation de l'hydrogène.

Les calculs des paramètres thermodynamiques et de transport ainsi que les vitesses fondamentales de flammes sont menés avec les outils du package CHEMKIN [96], [97], [98]. Les paramètres thermodynamiques et de transport considérés dans la recherche d'un mélange mimique sont :

- Les capacités calorifiques du mélange ( $C_p$ ), les masses volumiques du mélange ( $\rho$ ), les vitesses du son ( $C_s$ ) dans les gaz frais et des gaz chauds,
- Le rapport d'expansion ( $\sigma$ ), la température adiabatique de flamme ( $T_{ad}$ ),
- La diffusivité thermique du mélange ( $\alpha$ ), la viscosité du mélange ( $\nu$ ), le coefficient de diffusion massique de l'hydrogène dans le mélange ( $D_{\text{H}_2,\text{mél}}$ ).

Le coefficient de diffusion massique d'un composé dans un mélange constitué de plus de deux espèces est calculé à partir des coefficients binaires de diffusion selon la relation proposée par Bird et coll. [86] :

$$D_{km} = \frac{1 - Y_k}{\sum_{j \neq k} X_j / D_{jk}}$$

où  $Y_k$  est la fraction massique du composé  $k$  dans le mélange constitué de  $K$  espèces,  $X_j$  est la fraction molaire de l'espèce  $j$  dans le mélange et  $D_{jk}$  est le coefficient de diffusion binaire du composé  $j$  dans le composé  $k$ .  $D_{km}$  est le coefficient de diffusion massique de l'espèce  $k$  dans le mélange.

Nous appellerons mélange de référence le mélange  $H_2$  – air chauffés à 353 K en présence de vapeur d'eau. Sauf indications contraires, le mélange mimique et le mélange de référence associé ont le même rapport d'équivalence<sup>a</sup>.

### **3.3 Respect des paramètres thermodynamiques indépendamment des effets de la température initiale**

Les tableaux de calcul des paramètres sont donnés en Annexe A.

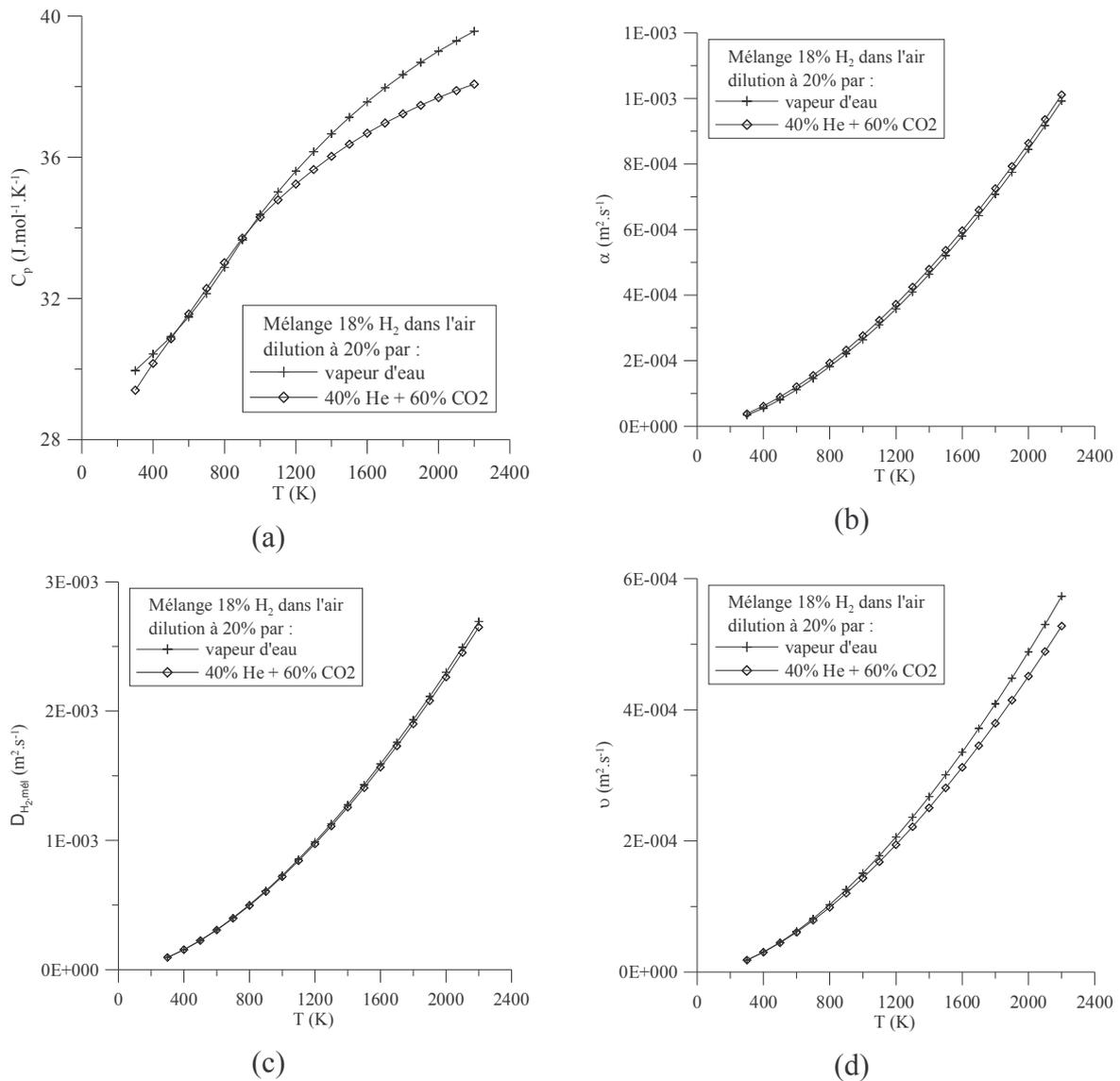
Indépendamment des effets liés à la température initiale, le mélange mimique constitué de 60%  $CO_2$  + 40 % He permet de respecter au mieux l'ensemble des paramètres caractéristiques de la molécule  $H_2O$ . Nous l'appellerons le mélange mimique de type I.

A titre d'exemple, les valeurs de certains paramètres dans le cas d'un mélange (18 %  $H_2$  + 82 % air) dilués à 20 % soit par  $H_2O$  soit par le mélange mimique (60 %  $CO_2$  + 40 % He) sont présentés en fonction de la température initiale, sur la Figure 24. A une température initiale de 300 K, respectivement pour le mélange mimique et le mélange de référence nous avons : rapport d'expansion égaux à 4,29 et 4,28, température de flamme égale à 1 387 K et 1 382 K.

○

---

<sup>a</sup> Le rapport d'équivalence est défini par le rapport des concentrations en hydrogène et en oxygène dans le mélange divisé par ce rapport dans un mélange stoechiométrique.



**Figure 24 : Evolution des différents paramètres thermodynamiques et de transport en fonction de la température initiale (a) : la capacité calorifique du mélange de gaz frais ; (b) : diffusivité thermique ; (c) diffusion de l'hydrogène dans le mélange ; (d) viscosité.**

Les scénarios d'accidents grave en enceinte nucléaire supposent une atmosphère saturée en eau. Compte tenu de la dépendance de la tension de vapeur de l'eau et de la température, il est nécessaire d'établir les compositions de mélanges mimiques afin de simuler la montée en température avec l'augmentation de taux de dilution. En effet, travailler à température ambiante de 293 K limiterait la teneur de diluant type I à 2,3 % tandis qu'à 353 K il est possible de diluer le mélange réactif par 47,3 % de mélange mimique. Se pose alors la question de trouver un mélange mimique qui rende compte, à température ambiante, des paramètres caractéristiques de la vapeur à 353 K.

### 3.4 Température ambiante respectant le rapport d'expansion

Le rapport d'expansion dépend de la température et de la masse molaire du mélange dans l'état initial et dans l'état final de combustion. La variation de la température initiale entre 293 K et 353 K engendre une diminution importante du rapport d'expansion.

Pour maintenir le rapport d'expansion constant par substitution de la vapeur d'eau et abaissement de la température initiale, deux options ont été envisagées :

- Choisir un mélange mimique ayant une masse molaire largement supérieure à celle de la vapeur d'eau tout en gardant le même taux de dilution,
- Changer le taux de dilution de façon à maintenir le rapport d'expansion en ne tenant compte que des effets liés à la variation de la température initiale.

La masse molaire d'un mélange est fortement influencée par celle des diluants. De ce fait, le rapport des masses molaires des gaz frais et brûlés respectivement n'est pas modifié par la nature des diluants considérés. Il n'est donc pas possible de compenser de cette façon la variation de la température initiale.

Puisqu'il n'est pas possible de garder le taux de dilution, nous avons dans un premier temps cherché un mélange mimique à un mélange non dilué chauffé à 353 K. Dans nos conditions d'étude, la température adiabatique de flamme est peu affectée par la température initiale. Il faut donc compenser la variation de la température initiale par le rapport  $M_u/M_b$ . Pour cela, il faut augmenter la masse molaire des gaz chauds et/ou diminuer celle des gaz frais à température ambiante.

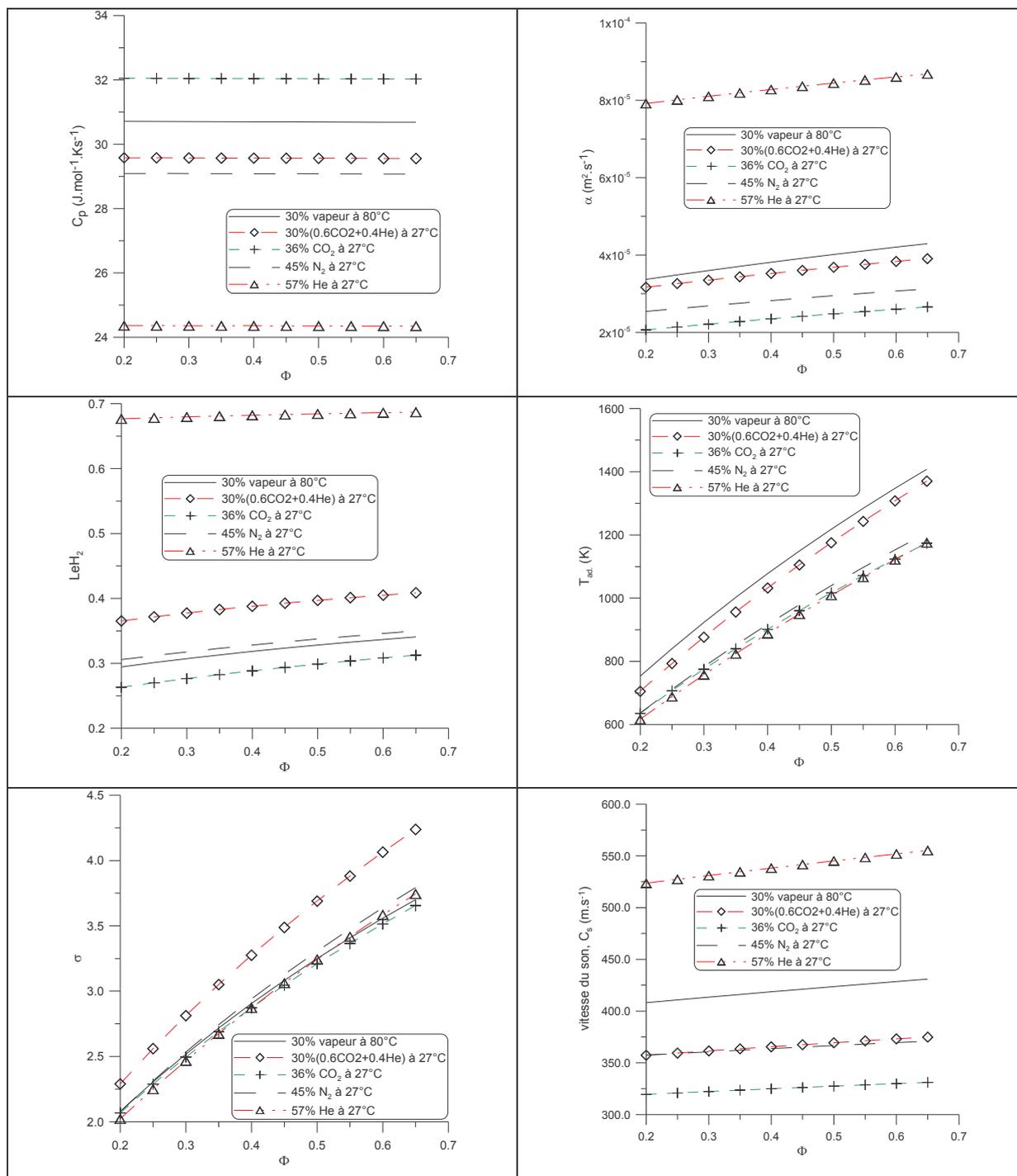
CO<sub>2</sub>, He et N<sub>2</sub> ont été considérés. Quel que soit le diluant envisagé, le calcul des paramètres caractéristiques autres que le rapport d'expansion montre que les valeurs obtenues dans ce type de mélange s'écartent de celles correspondant au mélange de référence.

Les taux de dilution obtenus pour l'hélium comme pour l'azote sont largement supérieurs à ceux des mélanges de référence. Seul le CO<sub>2</sub> permet d'avoir des taux de dilution légèrement plus importants que ceux des mélanges de référence.

Taux de dilution (%) par H <sub>2</sub> O, à 353 K	0	10	20	30	40
Taux de dilution (%) par He, à température ambiante	27	40	47	57	65
Taux de dilution (%) par N <sub>2</sub> , à température ambiante	18	30	40	45	54
Taux de dilution (%) par CO <sub>2</sub> , à température ambiante	12	19	28	36	43

**Tableau 2 : Composition des mélanges mimiques permettant de maintenir les mêmes valeurs du rapport d'expansion que celles des mélanges de référence. Le mélange est constitué de (1-x) [H<sub>2</sub> + air] + x Diluant.**

Les teneurs en He, N<sub>2</sub> et CO<sub>2</sub> permettant de respecter le rapport d'expansion du mélange de référence sont indiquées dans le Tableau 2. Nous appellerons ces mélanges, les mélanges mimiques de type II.



**Figure 25 : Effet du rapport d'équivalence,  $\phi$ , sur la capacité calorifique, la diffusivité thermique, le nombre de Lewis et la température de flamme dans le cas d'un mélange de référence  $H_2$  – air dilué à 30 % par la vapeur d'eau et chauffé à 353 K.**

Dans le cas d'un mélange de référence dilué à 30 % par la vapeur d'eau et chauffé à 353 K, l'évolution de certains paramètres est donnée en fonction du rapport d'équivalence (Figure 25). Ces paramètres sont comparés à ceux des mélanges mimiques de type I et II.

Concernant la capacité calorifique,  $C_p$ , la diffusivité thermique,  $\alpha$ , la température adiabatique de flamme,  $T_{ad}$ , et la vitesse du son dans les gaz frais,  $C_s$ , le mélange mimique de type I peut être considéré comme celui le plus proche du mélange de référence.

Concernant le nombre de Lewis (rapporté à la diffusion de l'hydrogène dans le mélange),  $Le_{H_2}$ , le mélange mimique de type II avec 45 % de  $N_2$  est le plus approchant du

mélange de référence. Mais le taux de dilution de ces mélanges mimiques est trop élevé. Le mélange mimique dilué avec 36 % de CO<sub>2</sub> se caractérise par un nombre de Lewis à peine plus proche de celui pour un mélange humide que celui du mélange mimique de type I.

Le rapport d'expansion  $\sigma$  du mélange mimique de type I ne respecte pas celui du mélange de référence. Les mélanges mimiques de type II respectent le rapport d'expansion du mélange de référence puisqu'il s'agit du point de concordance entre les deux mélanges.

En faisant concorder les rapports d'expansion des mélanges mimiques et de référence, les valeurs des autres paramètres tels que la diffusion thermique ou la température de flamme s'écartent fortement des valeurs des mélanges de référence.

### **3.5 Recherche d'un diluant substitutif de H<sub>2</sub>O respectant la vitesse fondamentale**

Ce diluant mimique doit pouvoir compenser l'élévation de la vitesse fondamentale liée à l'augmentation de la température initiale. Les vitesses considérées dans ce paragraphe sont des vitesses estimées selon la théorie de Mallard et Le Chatelier qui prédit :

$$S_1^0 \approx \sqrt{\alpha w}$$

où  $\alpha$  est la diffusivité thermique du mélange, et  $w$  est la vitesse de réaction cinétique. Ce terme suit une loi d'Arrhénius qui s'écrit :

$$w = A \exp\left(-\frac{E_a}{R T_{ad}}\right)$$

où  $T_{ad}$  est la température adiabatique de flamme et les termes  $E_a$  et  $A$  sont déterminés par extrapolation linéaire des mesures de vitesses de flamme en fonction de la température adiabatique de flamme.  $E_a$  représente l'énergie d'activation du système.  $A$  est une constante. Nous considérerons que les valeurs de l'énergie d'activation et de la constante  $A$ , dans notre domaine d'étude, ne dépendent ni du taux de dilution ni de la nature du diluant. Nous avons pris  $A = 6,81 \cdot 10^6 \text{ s}^{-1}$  et  $E_a = 85,5 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$ .

Nous reviendrons sur la détermination de l'énergie d'activation dans le Chapitre III §4.1. Cette étude ayant été réalisée avant le terme de la campagne de mesures expérimentales, les valeurs utilisées à ce stade sont légèrement différentes de celles qui seront proposées ultérieurement.

#### **3.5.1 Variation du rapport N<sub>2</sub>/O<sub>2</sub> dans la composition de l'air**

Nous avons fait varier le rapport N<sub>2</sub>/O<sub>2</sub> caractérisant la composition de l'air. Ce rapport est égal à 4 dans l'air utilisé dans la détermination des vitesses spatiales de flamme. Si le rapport est égal à 3,5 (au lieu de 4), la vitesse fondamentale estimée dans le cas d'un mélange H<sub>2</sub> - air de rapport d'équivalence égal à 0,5 et à température ambiante est égale à 77,9 cm.s<sup>-1</sup>. La vitesse fondamentale du mélange de référence dans ce cas (même rapport d'équivalence mais l'air est caractérisé par un rapport N<sub>2</sub>/O<sub>2</sub> égal à 4 et la température initiale est de 353 K) est égale à 77,8 cm.s<sup>-1</sup>. Pour ces mêmes mélanges, les températures de flamme sont respectivement égales à 1 705 K et 1 640 K. Les coefficients de diffusion thermique sont respectivement égaux à 3,7.10<sup>-5</sup> m<sup>2</sup>.s<sup>-1</sup> et 4,7.10<sup>-5</sup> m<sup>2</sup>.s<sup>-1</sup>.

Les effets de la température initiale sur la vitesse fondamentale sont ici compensés par la variation de la diffusivité thermique. Mais, la valeur du rapport d'expansion d'un tel mélange mimique est largement supérieure à celle du mélange de référence. Ces valeurs sont respectivement égales à 5,17 et 4,26 pour un mélange caractérisé par un rapport d'équivalence de 0,5.

### 3.5.2 Maintien de la diffusivité thermique

Les différents calculs ont permis de conclure que parmi les diluants examinés, seul l'hélium permet d'augmenter la valeur de la diffusivité thermique d'un mélange considéré à température ambiante. Un mélange H<sub>2</sub> - air dilué à 15 % par He est caractérisé par une diffusivité thermique de  $4,6 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$  à température ambiante. Le mélange de référence de même rapport d'équivalence ( $\phi = 0,5$ ) chauffé à 353 K non dilué est caractérisé par une diffusivité thermique de  $4,7 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ . Les températures de flamme de ces mélanges sont respectivement égales à 1 470 K et 1 640 K, et les vitesses fondamentales sont égales à  $53,6 \text{ cm} \cdot \text{s}^{-1}$  et  $77,8 \text{ cm} \cdot \text{s}^{-1}$ .

Le maintien de la valeur de la diffusivité thermique ne permet pas de maintenir les valeurs de vitesses fondamentales et ceci en raison des variations importantes de la température de flamme (dus d'une part à la dilution du mélange mimique et d'autre part à l'abaissement de la température initiale). Avec la diminution de la température de flamme, le terme exponentiel devient prépondérant dans l'estimation de la vitesse. La valeur du rapport d'expansion d'un tel mélange mimique est voisine de celle du mélange de référence, respectivement 4,56 et 4,26 pour  $\phi = 0,5$ .

### 3.5.3 Substitution de l'azote de l'air

Nous avons également examiné l'effet de la substitution de l'azote de l'air par un autre composé tel que CO<sub>2</sub>, Ar, He ou O<sub>2</sub> dans une gamme de 0 à 100 % de substitution. Nous avons limité le champ d'investigation aux mélanges de référence H<sub>2</sub> - air chauffés à 353 K.

Les mélanges pour lesquels 30 % de l'azote de l'air est substitué par l'hélium à température ambiante présentent des caractéristiques similaires (température de flamme, diffusion thermique, vitesse fondamentale) à celles des mélanges de référence. Le mélange mimique, associé au mélange de référence non dilué à 353 K et de richesse 0,5, est caractérisé par une température de flamme de 1 656 K, une diffusivité thermique de  $4,65 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$  et la vitesse fondamentale estimée est égale à  $79,8 \text{ cm} \cdot \text{s}^{-1}$ . Mais le rapport d'expansion du mélange mimique est égal à 5,06. Celui du mélange de référence est égal à 4,26.

La substitution de l'azote de l'air par le dioxyde de carbone, l'argon ou l'oxygène ne permet de faire concorder un minimum de paramètres entre le mélange mimique et le mélange de référence.

## 3.6 Conclusion

Les calculs ont montré que le mélange type I constitué de 60 % CO<sub>2</sub> + 40 % He présente des caractéristiques thermodynamiques et de transport très proches de celles de H<sub>2</sub>O.

Cependant, si on veut tenir compte des effets liés à la présence de H<sub>2</sub>O mais aussi ceux relatifs à la variation de la température initiale, il n'a pas été possible de trouver un mélange qui réponde à toutes nos exigences. Les mélanges type II sont donc écartés dans le reste de l'étude.

## **CHAPITRE III**

### **VITESSES NORMALES DE COMBUSTION**

Ce chapitre porte sur la détermination des vitesses fondamentales à étirement nul. Caractériser les propriétés fondamentales d'un mélange combustible dans des conditions données est essentiel à la modélisation des propagations de flamme. L'introduction relativement récente de la notion d'étirement a induit la nécessité de réévaluer les mélanges nous intéressant.

## 1 Objectif des mesures

L'objectif est double : valider un modèle cinétique détaillé apte à évaluer la vitesse fondamentale à étirement nul et formuler cette vitesse en fonction de la température, pression, richesse et taux de vapeur d'eau pour les conditions d'accident grave en centrale nucléaire.

L'appareillage utilisé ici est une bombe sphérique, présentée au chapitre précédent. La méthode de traitement consiste est une intégration de la courbe rayon = f (temps) [87], [88].

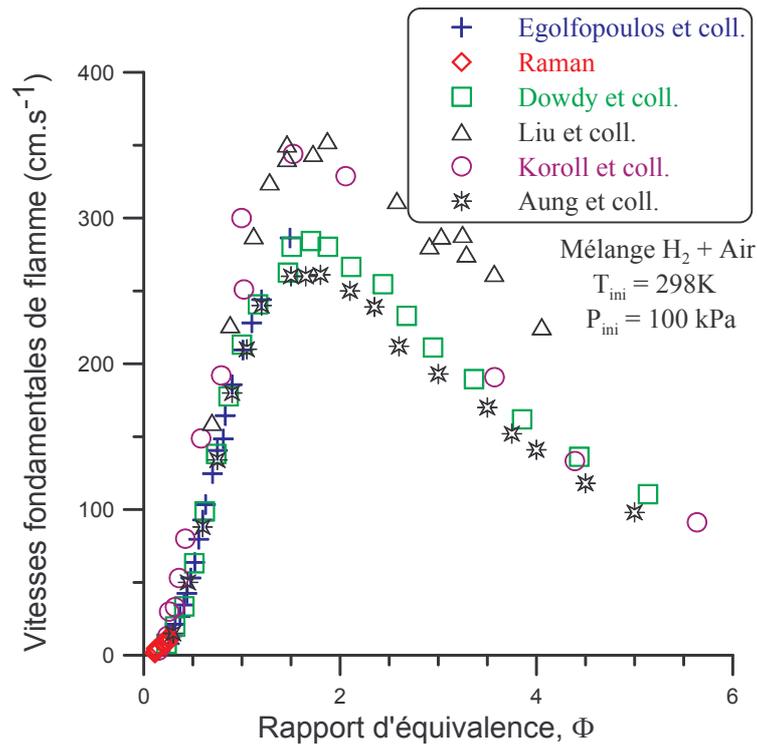
## 2 Détermination expérimentale des vitesses fondamentales de flamme

Dans cette étude, la température initiale est gardée constante voisine de 298 K tandis que la pression initiale prend les valeurs de 100, 200 et 500 kPa. Le domaine d'inflammabilité est parcouru et les expériences reproduites au minimum trois fois. La branche pauvre a fait l'objet d'une étude plus détaillée que la branche riche, mais est limitée par les instabilités thermo-diffusives.

### 2.1 Vitesse fondamentale à étirement nul

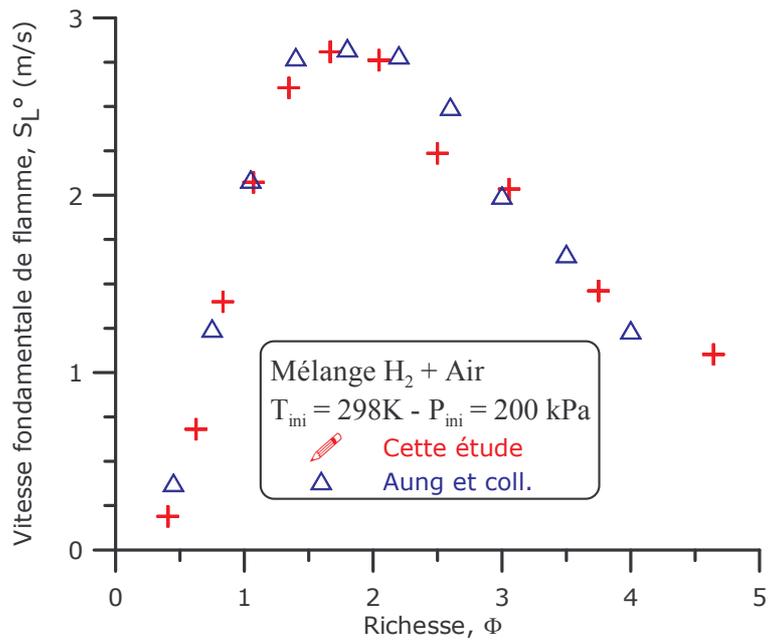
Les valeurs de vitesse fondamentale à étirement nul,  $S_L^0$ , ont été déduites de la mesure des vitesses spatiales de propagation de flamme selon la procédure décrite dans les paragraphes 1.61.5 et 1.6 (p. 41) selon la méthode d'intégration de Taylor et coll. sont très proches de celles déduites selon l'ancienne méthode [89], [90].

La vitesse fondamentale de flamme évolue fortement en fonction du rapport d'équivalence (Figure 26) atteignant une valeur maximale de 279 cm/s pour une teneur en hydrogène dans le mélange de 40 % (soit une richesse de 1,67). Lorsque l'on reporte les données de la littérature concernant les vitesses fondamentales de flamme, nous pouvons noter que les mesures effectuées par Liu et coll. [91] ainsi que Koroll et coll. [92] mènent à des vitesses fondamentales de flamme supérieures aux autres mesures. Cette différence réside dans le fait que ces auteurs n'ont pas tenu compte de l'effet de l'étirement sur les vitesses. Lorsque les mesures sont corrigées pour tenir compte de l'effet de l'étirement, alors nous pouvons noter un bon accord entre les différentes valeurs de la littérature et nos mesures (Figure 27), et cela quel que soit le dispositif expérimental adopté (Dowdy et coll. [87], Egolfopoulos et coll. [93], Raman [94] et Aung et coll. [95]).



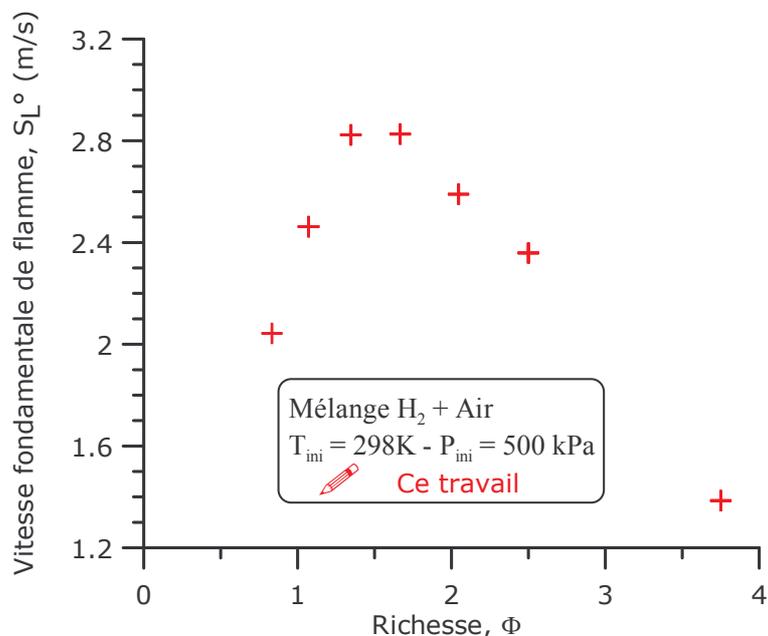
**Figure 26 : Vitesse fondamentale de flamme en fonction de la richesse, comparaison des courbes de résultats simulés, de l'expérience et des valeurs de la littérature à pression initiale de 100 kPa et température initiale de 298 K.**

Lorsque la pression initiale augmente de 100 à 200 kPa, nous notons une légère augmentation du maximum de vitesse qui atteint 285 cm/s et cela pour la même teneur en hydrogène que dans le cas à 100 kPa (Figure 27). Entre les valeurs de vitesse fondamentales déterminées lors de ces travaux et celles de Aung et coll. [9], une bonne reproductibilité est observée à une pression de 200 kPa. Les légères différences entre nos mesures et celles de Aung et coll. résident dans le fait que lors de nos essais nous avons utilisé de l'air synthétique avec un rapport N<sub>2</sub>/O<sub>2</sub> de 4 alors que dans le cas de Aung et coll. ce rapport était de 3,76.



**Figure 27 : Vitesse fondamentale de flamme en fonction de la richesse, comparaison des courbes de l'expérience et des valeurs de la littérature à pression initiale de 200 kPa et température initiale de 298 K.**

A une pression initiale de 500 kPa, la vitesse normale de combustion est maximale avec un mélange de richesse égale à 1,35, soit 35 % d'hydrogène dans l'air, et vaut 285 cm/s (Figure 28). Ainsi, lorsque la pression initiale augmente de 200 à 500 kPa, la vitesse normale de combustion reste sensiblement la même, alors que le maximum de vitesse se déplace vers de plus faibles richesses. Aucune comparaison avec la littérature n'a pu être effectuée en raison de l'absence de données.



**Figure 28 : Vitesse fondamentale de flamme en fonction de la richesse, expériences à pression initiale de 500 kPa**

De même, le domaine d'apparition des instabilités thermo-diffusives correspondant à la branche pauvre est augmenté rendant difficile les mesures pour des teneurs en hydrogène

inférieures à 20 %. Ce phénomène se caractérise par l'apparition de cellules sur la surface de la flamme qui correspond à une augmentation de sa surface par plissement.

En effet, l'augmentation de pression accentue les instabilités de flamme. A 200 kPa, le domaine d'interprétabilité diminue légèrement par comparaison avec l'étude à 100 kPa. La restriction intervient notamment pour la branche pauvre (qui est d'intérêt dans les études de sûreté nucléaire), car le front de flamme est sujet à des instabilités thermo-diffusives. Celles-ci résultent de la compétition entre les diffusions thermique et massique. Elles induisent un plissement de la flamme qui modifie la surface de la flamme de manière non quantifiable à l'heure actuelle, produisant un étirement et donc une accélération de la propagation du front de flamme. Il n'est alors pas possible de déduire une vitesse fondamentale à étirement nul pour des flammes pauvres à 500 kPa. Un exemple est donné sur la Figure 29 pour un mélange pauvre à 200 et 500 kPa : si le plissement pour 200 kPa est limité pour permettre une interprétation, celui à 500 kPa interdit toute mesure, le front étant perturbé depuis son allumage.

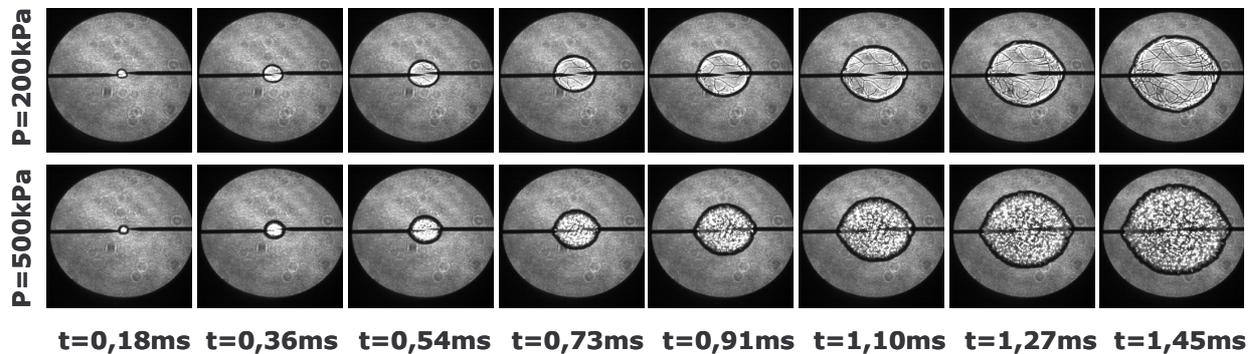


Figure 29 : Séquence de propagation de flamme dans la bombe sphérique : plissement de la flamme pauvre à 200 et 500 kPa. Température initiale de 298 K. Mélange réactif : 30 % H<sub>2</sub>, 56 % N<sub>2</sub>, 14 % O<sub>2</sub>.

Afin de limiter le domaine d'apparition des instabilités thermo-diffusives et d'étendre le domaine de mesures à haute pression, nous avons décidé de substituer l'azote par de l'hélium. Dans le cas des mélanges H<sub>2</sub>/O<sub>2</sub>/He respectant le rapport  $\frac{He}{O_2} = 4$ , la vitesse normale de combustion est fortement augmentée par rapport à celle déterminée en présence de mélanges H<sub>2</sub>/O<sub>2</sub>/N<sub>2</sub>, toutes choses étant égales par ailleurs, comme le montre la Figure 30 (a). Lorsque la pression initiale est égale à 500 kPa, la vitesse est maximale et vaut 522 cm/s avec un mélange contenant 35 % d'hydrogène. L'effet de la pression sur la vitesse normale de combustion dans le cas de mélanges dilués par l'hélium est plus sensible que celui observé avec les mélanges dilués par l'azote. Comme le montre la Figure 30 (b), en présence d'un mélange stoechiométrique, la vitesse normale de combustion vaut 345 et 518 cm/s respectivement à 200 et 500 kPa.

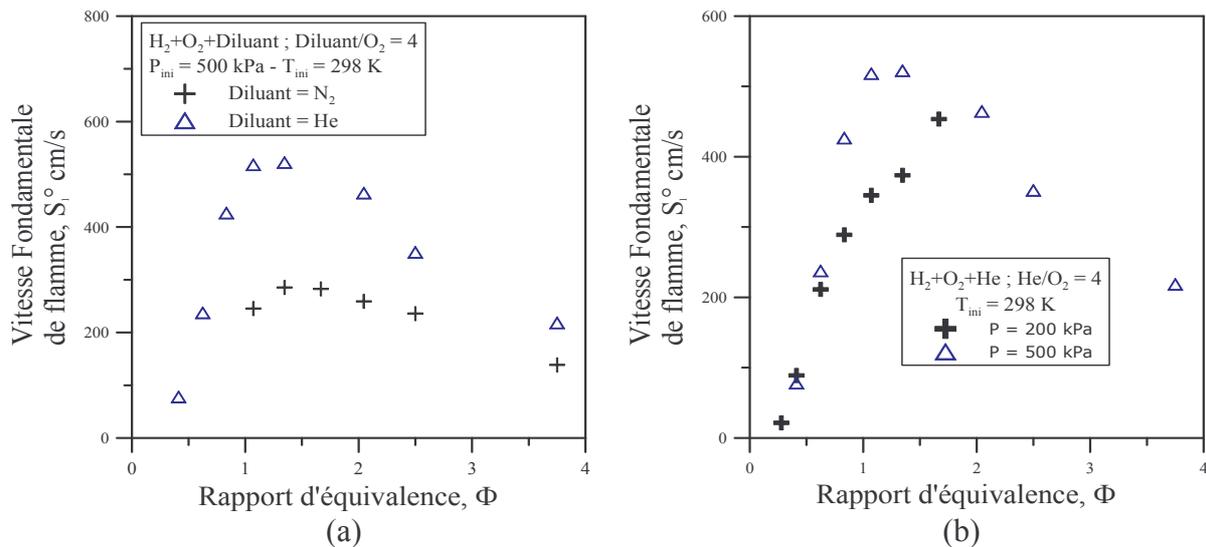


Figure 30 : Evolution de la vitesse normale de combustion à étirement nul en fonction de la richesse pour des mélanges  $H_2/O_2/He$  à température ambiante. (a) Effet de la substitution de l'hélium par l'azote, (b) Effet de la pression initiale.

## 2.2 Effet de l'ajout d'un diluant sur les vitesses fondamentales de flamme

Les vitesses spatiales de flammes ont été mesurées en présence de mélanges  $H_2/O_2/N_2$  dilués par 10 et 20 % d'un mélange mimique constitué de 40 % He et 60 %  $CO_2$ . A une richesse donnée, la vitesse normale de combustion diminue avec la dilution du mélange comme le montre la Figure 31. Avec le mélange mimique, la flamme est instable, ce qui complique l'exploitation des mesures de vitesses spatiales de flammes en présence des mélanges les plus pauvres (14 % voire 20 % d'hydrogène). Aussi, la détermination des vitesses n'a-t-elle pu être faite qu'à une pression de 200 kPa. Ces résultats sont comparés à ceux obtenus précédemment [16] à une pression initiale de 100 kPa. Les vitesses normales de combustion diminuent lorsque la pression augmente de 100 à 200 kPa, comme le montre la Figure 32.

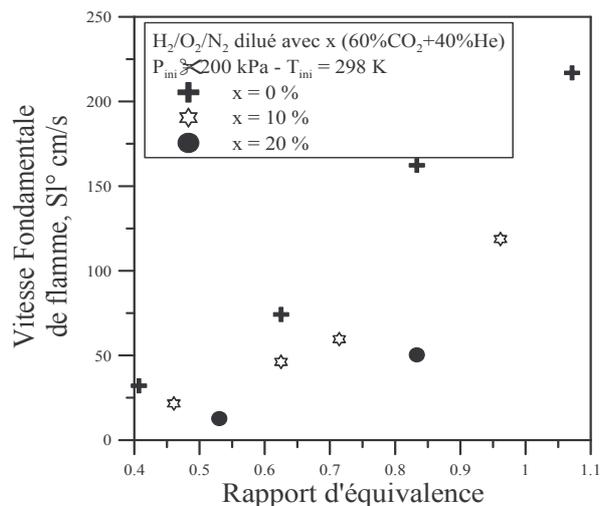


Figure 31 : Evolution de la vitesse normale de combustion en fonction de la richesse des mélanges  $H_2/O_2/N_2$  dilués par le mélange mimique constitué de 60 %  $CO_2$  et 40 % He à température ambiante et 200 kPa.

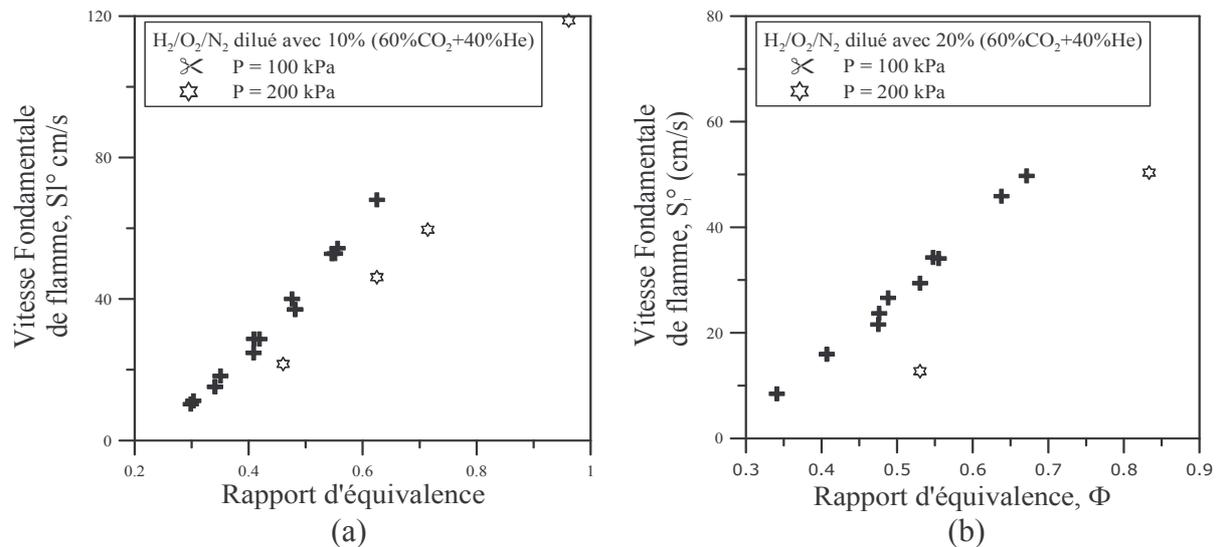


Figure 32 : Evolution de la vitesse normale de combustion à étirement nul en fonction de la richesse des mélanges  $H_2/O_2/N_2$  dilués par (a) 10 % et (b) 20 % de mélange mimique constitué de 60 %  $CO_2$  + 40 % He. Effet de la pression initiale à température ambiante.

### 3 Choix d'un modèle cinétique

Une étude de simulation de la vitesse normale de combustion a été entreprise afin de permettre l'extrapolation des résultats aux compositions inaccessibles expérimentalement. Cela nécessite deux séries d'expériences supplémentaires à 200 et 500 kPa avec des mélanges  $H_2/O_2/He$ , afin de valider l'extrapolation numérique. En effet la substitution de l'azote par de l'hélium diminue les instabilités thermodiffusives.

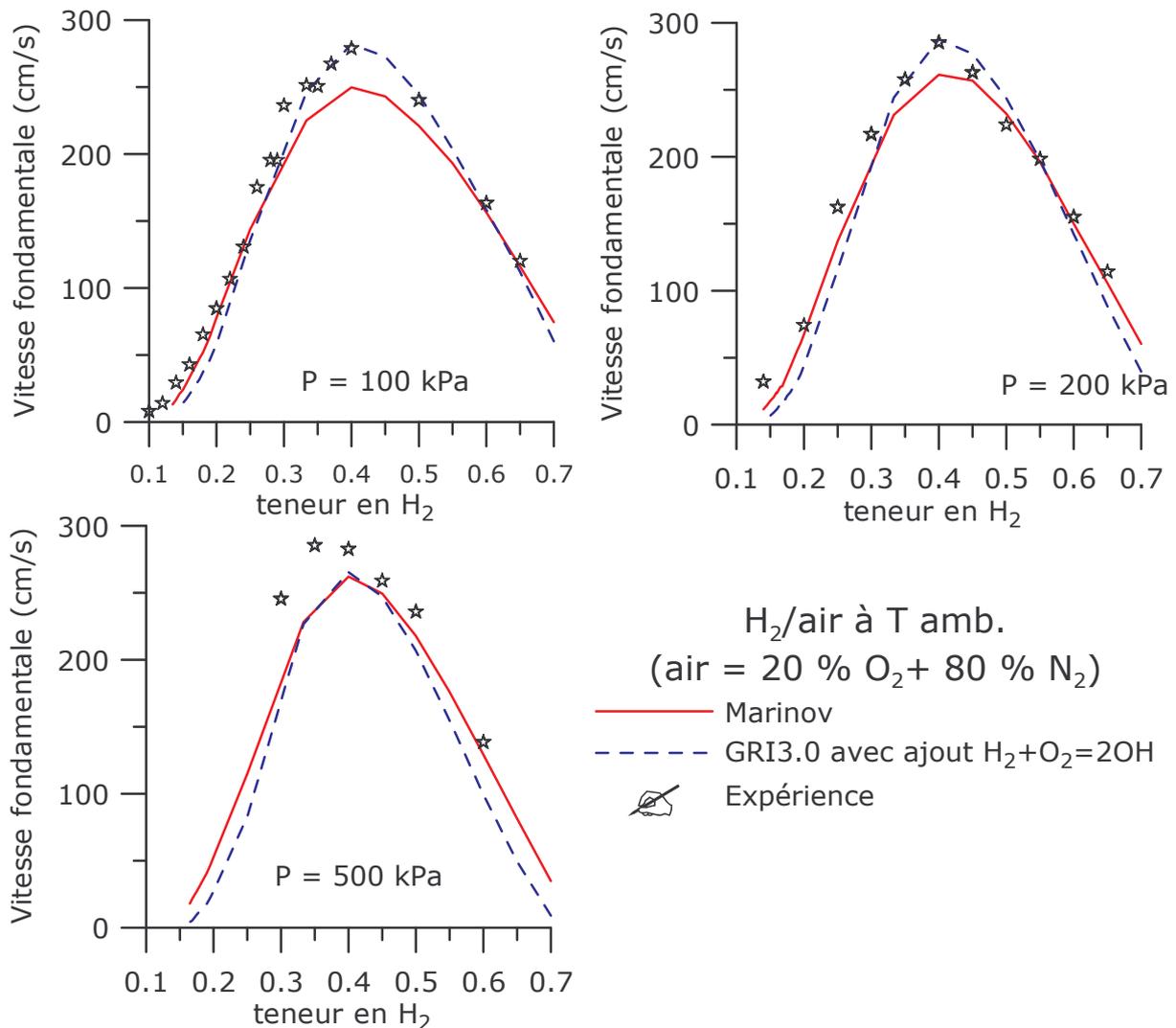
Les vitesses normales de combustion sont calculées en utilisant le code CHEMKIN [96]/PREMIX [97] (version II). Ce code permet de calculer le débit de gaz frais en amont de la zone réactionnelle plane dans le cas d'une flamme plate de prémélange se propageant librement à pression constante. Pour cela, les équations classiques de conservation sont résolues en tenant compte de l'évolution de la composition chimique du mélange et de la diffusion des espèces. Les vitesses de production de chacune des espèces chimiques sont calculées à partir des constantes de vitesse des réactions élémentaires incluses dans le modèle cinétique détaillé. Au cours de ce travail, deux schémas réactionnels ont été étudiés ; le premier est proposé par Marinov et coll. [5], le second est présenté par le Gas Research Institute (GRI3.0) [6] auquel une réaction élémentaire a été ajoutée ( $H_2 + O_2 = 2 OH$ ). Les propriétés physiques du mélange ont été déterminées à partir des équations générales détaillées par Kee et coll. [98]. Les bases de données thermodynamiques et les paramètres de transport utilisés sont ceux fournis par les auteurs conjointement aux modèles cinétiques détaillés.

Les conditions aux limites sont estimées par l'utilisateur et consistent en la description de la composition des gaz brûlés et d'un profil estimé de la température des gaz. La position de la flamme est déterminée en précisant la température en un point. Dans ce travail, la température fixée est égale à 310 K pour une position  $x = 0$ .

La vitesse normale de combustion est déduite du débit des gaz frais en amont de la zone réactionnelle correspondant à une position  $x = -2$  cm.

Les calculs ont été effectués pour des compositions de mélanges identiques à celles étudiées expérimentalement à température ambiante. Les vitesses fondamentales calculées avec le code PREMIX ont été comparées à celles déterminées à étirement nul.

La Figure 33 montre les vitesses normales de combustion, pour différentes pressions initiales, en fonction de la teneur en hydrogène dans l'air constitué de 20 % d'oxygène et 80 % d'azote. Notons le bon accord entre les résultats expérimentaux et ceux issus de la modélisation à 100 et 200 kPa. Pour une teneur en hydrogène supérieure à 0,3, les valeurs issues du modèle du GRI3.0 [6] sont légèrement supérieures à celles obtenues avec le modèle de Marinov et coll. [5]. A une pression initiale égale à 500 kPa, avec des mélanges contenant moins de 40 % d'hydrogène, on notera l'écart entre les valeurs issues des simulations et celles déterminées expérimentalement. Rappelons que, dans ces conditions, la détermination des vitesses normales de combustion est rendue très difficile en raison de l'apparition précoce de structures liées aux instabilités hydrodynamiques.



**Figure 33 : Vitesse fondamentale de flamme en fonction de la teneur en hydrogène dans l'air à différentes pressions initiales. L'air est, ici, constitué de 20 %  $O_2$  + 80 %  $N_2$ .**

A 100 kPa avec les mélanges contenant moins de 25 % d'hydrogène, les valeurs des vitesses normales de combustion déterminées expérimentalement sont plus proches des

résultats simulés obtenus avec le modèle cinétique détaillé de Marinov et coll. [5] que de ceux issus du modèle du GRI3.0 [6].

A 200 et 500 kPa, les mesures des vitesses spatiales sont réalisées en substituant l'azote de l'air par de l'hélium. Les résultats obtenus par simulation, en utilisant les modèles cinétiques détaillés du GRI [6] et de Marinov et coll. [5], sont présentés respectivement sur la Figure 34 et la Figure 35. Avec des mélanges pauvres (moins de 20 % d'hydrogène dans le mélange) dilués dans l'hélium, les résultats expérimentaux sont plus proches de ceux obtenus en utilisant le modèle cinétique du GRI3.0 [6] que de ceux issus du modèle de Marinov et coll. [5]. Pour des mélanges plus riches en hydrogène dilués dans l'hélium, les résultats expérimentaux sont en accord avec ceux issus de la simulation utilisant le modèle de Marinov et coll. [5].

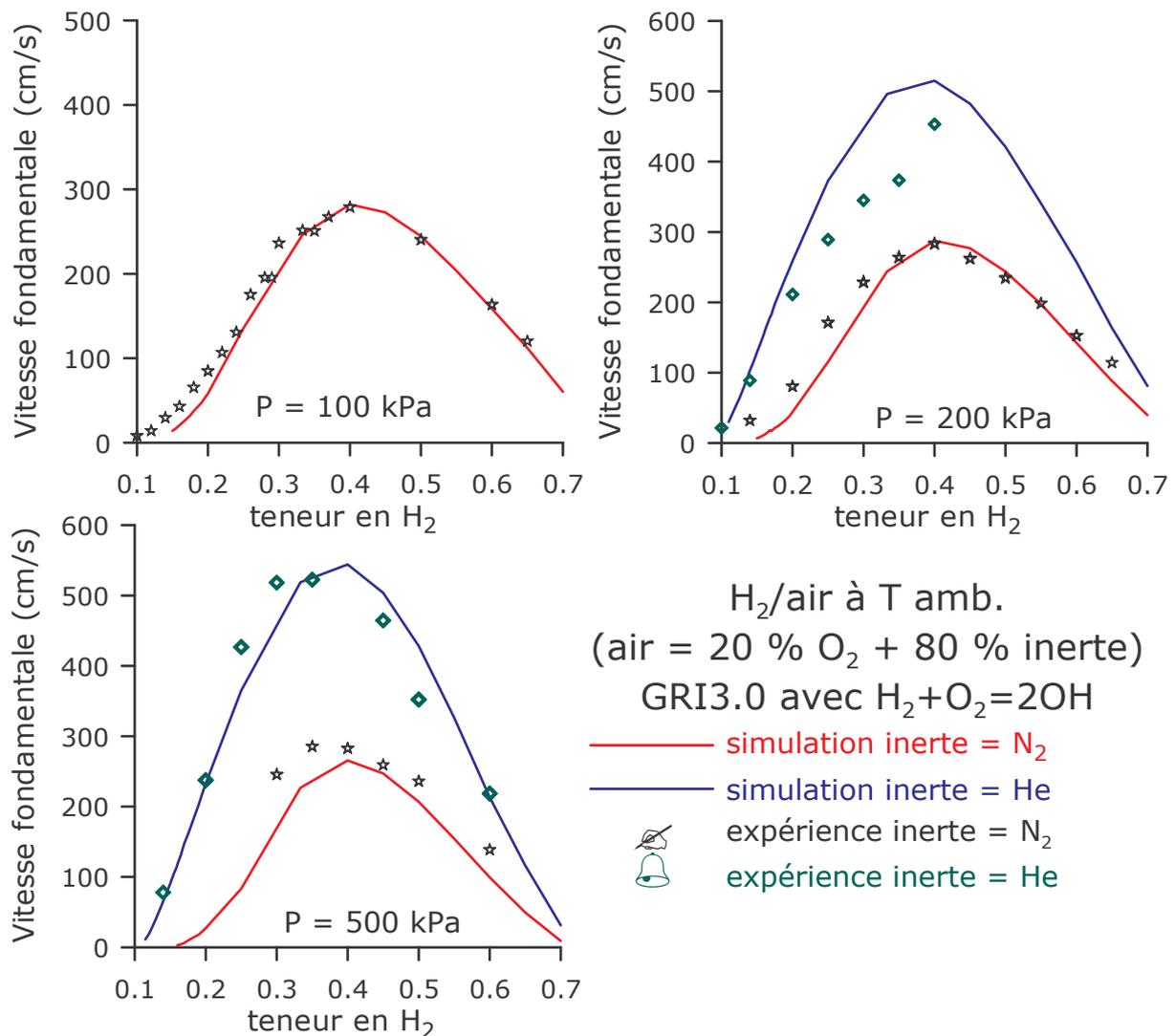


Figure 34 : Vitesses normales de combustion en fonction de la teneur en hydrogène dans le mélange à différentes pressions initiales. Résultats de simulation obtenus en utilisant le modèle cinétique détaillé du GRI3.0 [6].

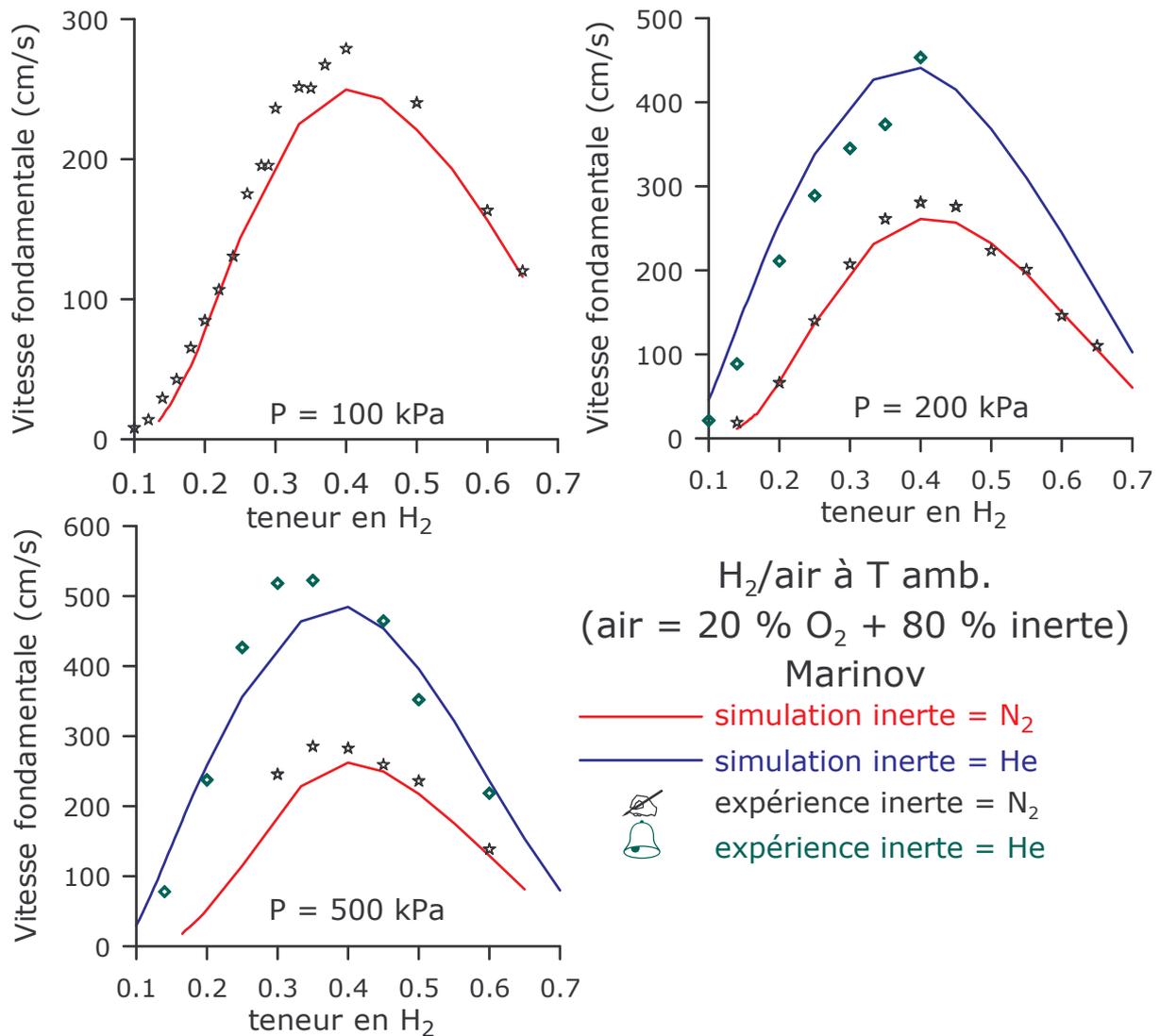
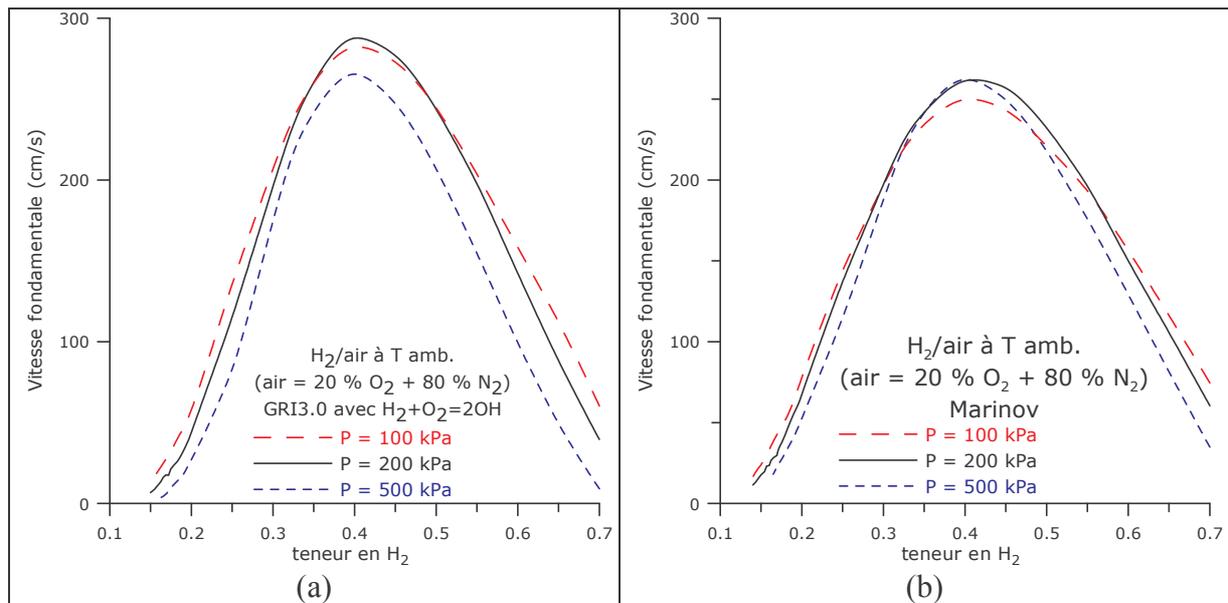


Figure 35 : Vitesses normales de combustion en fonction de la teneur en hydrogène dans le mélange à différentes pressions initiales et à température ambiante. Résultats de simulation obtenus en utilisant le modèle cinétique détaillé de Marinov et coll. [5].

Les écarts sont très faibles entre les résultats expérimentaux et ceux issus de la simulation avec PREMIX [97] utilisant les modèles cinétiques de Marinov et coll. [5] ou du GRI3.0 [6]. Toutefois, la comparaison des résultats simulés avec PREMIX montre un effet différent de la pression sur les vitesses normales de combustion selon le modèle cinétique utilisé (Figure 36). Avec les mélanges contenant moins de 33% d'hydrogène dans l'air, les résultats issus des deux modèles cinétiques montrent que l'augmentation de la pression initiale engendre un abaissement des vitesses normales de combustion. Avec les mélanges riches, l'effet de la pression sur les vitesses se traduit différemment selon le modèle cinétique utilisé. Notons que l'effet de la pression est plus important sur les résultats obtenus par simulation en utilisant le modèle du GRI3.0 [6] que sur ceux issus du modèle de Marinov et coll. [5].

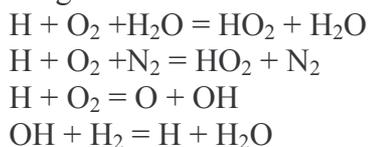


**Figure 36 : Vitesses normales de combustion en fonction de la teneur en hydrogène dans le mélange dilué par l'azote à différentes pressions initiales et à température ambiante. (a) Simulation avec le modèle du GRI3.0 [6]. (b) Simulation avec le modèle de Marinov et coll. [5].**

Une étude de sensibilité est faite en utilisant ce dernier modèle cinétique. Les résultats sont présentés sous forme de diagramme pour deux compositions de mélanges à 100, 200 et 500 kPa. La sensibilité d'une réaction est définie par la quantité :

$$S = \frac{A_i}{S_1^0} \frac{\partial S_1^0}{\partial A_i}$$

où  $A_i$  représente la constante pré-exponentielle introduite dans la constante de vitesse de la  $i^{\text{ème}}$  réaction élémentaire. Les résultats pour deux compositions de mélanges sont présentés en Figure 37 et Figure 38. Il apparaît que quatre réactions élémentaires sont d'autant plus importantes pour la détermination des vitesses normales de combustion que la pression initiale est grande. Ces réactions sont les suivantes :



Si la teneur en hydrogène dans le mélange augmente de 16 à 33,33 % d'hydrogène, l'impact des constantes de vitesses des réactions identifiées sur la vitesse normale de combustion est moins importante lorsque la pression initiale est augmentée (Figure 38).

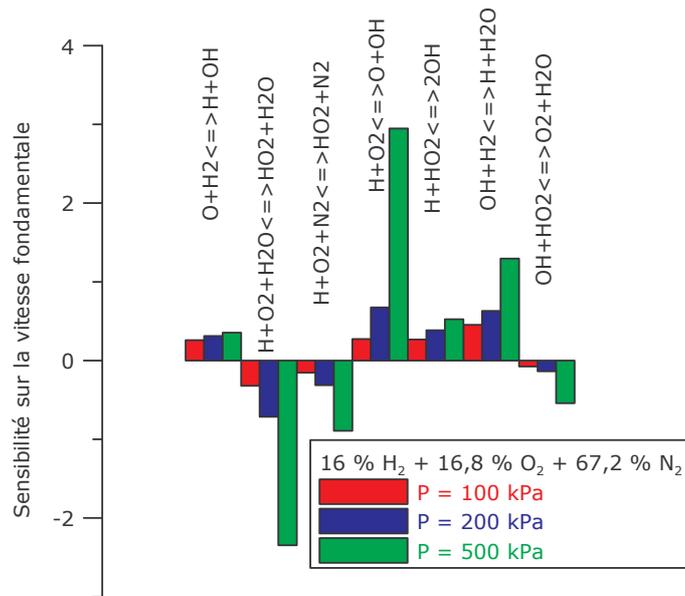


Figure 37 : Etude de sensibilité sur la vitesse normale de combustion avec un mélange contenant 16 % H<sub>2</sub> + 16,8 % O<sub>2</sub> + 67,2 % N<sub>2</sub> à température ambiante et différentes pressions initiales, mécanisme GRI3.0 modifié.

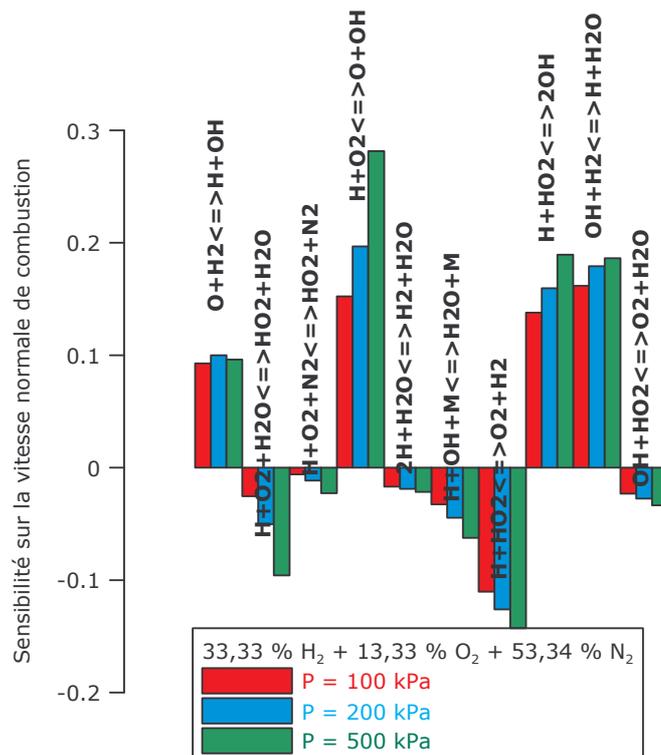


Figure 38 : Etude de sensibilité sur la vitesse normale de combustion avec un mélange contenant 33,33 % H<sub>2</sub> + 13,33 % O<sub>2</sub> + 53,34 % N<sub>2</sub> à température ambiante et différentes pressions initiales, mécanisme GRI3.0 modifié.

Les deux modèles cinétiques de la littérature utilisés pour dériver la vitesse normale de combustion, bien que satisfaisants, nécessitent d'être optimisés afin de mieux rendre compte de la cinétique à haute pression. Une mise à jour bibliographique concernant les réactions trimoléculaires ainsi que les réactions mettant en jeu le radical HO<sub>2</sub> est notamment nécessaire.

## 4 Calcul des paramètres extraits de la mesure des vitesses fondamentales

### 4.1 Energie globale d'activation

Un des objectifs secondaires de ces travaux est l'obtention de données relatives à l'énergie d'activation ( $E_a$ ) et au nombre de Zeldovich ( $\beta$ ). L'étude s'effectue selon la méthode décrite dans le chapitre 2, en établissant une corrélation à partir des résultats expérimentaux. Les valeurs sont reportées dans le Tableau 3.

Mélanges	$\Phi$	P (kPa)	T (K)	$E_a$ (kJ.mol <sup>-1</sup> )
H <sub>2</sub> -air	< 1,02	100	amb.	84,1
H <sub>2</sub> -air	> 2,05	100	amb.	60,0
H <sub>2</sub> -air-CO <sub>2</sub> -He	< 0,67	100	amb.	80,2
H <sub>2</sub> -air-H <sub>2</sub> O	< 0,67	100	353	91,5
H <sub>2</sub> -air	< 1,07	200	amb.	102,5
H <sub>2</sub> -air	> 1,67	200	amb.	61,1
H <sub>2</sub> -air	> 1,35	500	amb.	55,3

Tableau 3 : Energie d'activation globale pour divers mélanges à base d'hydrogène

$E_a$  a été estimé par simulation en modifiant la concentration de diazote afin d'obtenir les températures adiabatiques de flamme correspondantes. Les valeurs obtenues sont ainsi comparées avec celles publiées par d'autres équipes [99], [30] à une pression initiale de 101 kPa (Figure 39).

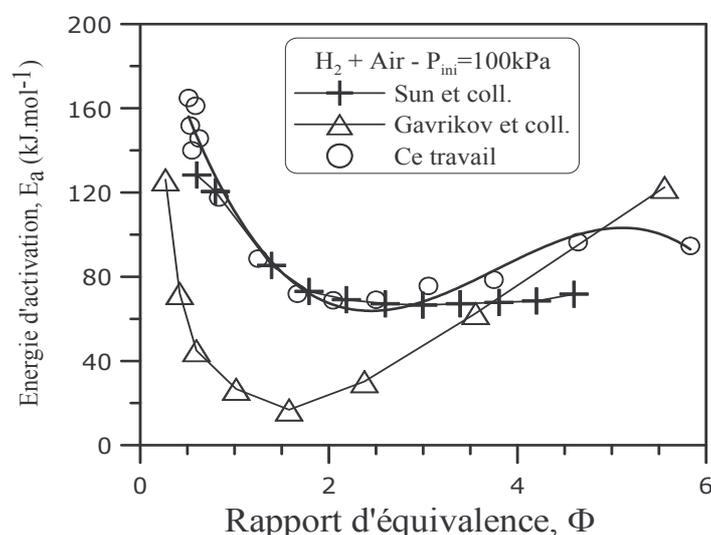


Figure 39 : Energie d'activation de mélanges H<sub>2</sub>-air à température ambiante en fonction de la richesse. Comparaison avec la littérature.

Les résultats sont en bon accord avec ceux présentés par Sun et coll. [99]. Ces derniers utilisaient un mécanisme cinétique différent [100]. Les valeurs présentées par Gavrikov et coll. [101] sont inférieures à celles déterminées dans nos travaux, ce qui pourrait s'expliquer par leur choix de la version ancienne 2.11 du mécanisme cinétique du GRI [102], notablement différente de la version 3.0 utilisée.

La Figure 40 présente les énergies d'activation en fonction de la richesse, pour les séries d'expériences menées à 101 kPa, 200 kPa et 500 kPa (toutes trois à 300 K), ainsi qu'une série à 101 kPa à 353 K.

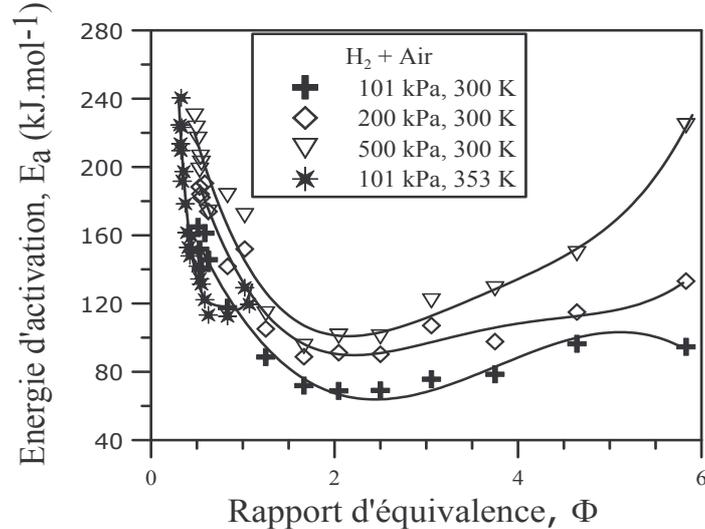


Figure 40 : Energie d'activation de mélanges H<sub>2</sub>-air à température ambiante en fonction de la richesse. Influence de la pression initiale selon l'équation 7.

Une corrélation polynomiale est obtenue de ces données afin de déduire l'énergie d'activation en fonction de la richesse, de la température et de la pression initiales sous la forme :

$$E_a(P, T, \phi) = \sum_{i=0}^4 a_i(P, T) \phi^i \quad \text{Eq. 11}$$

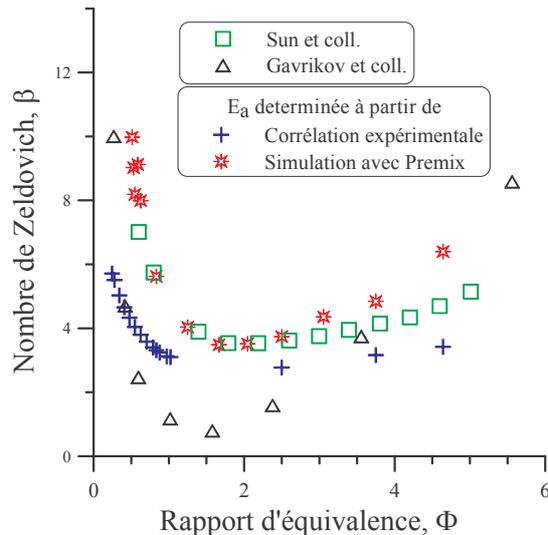
Les coefficients obtenus sont exposés dans le Tableau 4.

P (kPa)	T (K)	a <sub>0</sub>	a <sub>1</sub>	a <sub>2</sub>	a <sub>3</sub>	a <sub>4</sub>
100	353	936,4	-4144,4	7896,1	-6687,0	2117,2
100	amb	224,1	-156,0	47,1	-4,2	0
200	amb	298,0	-259,9	113,9	-20,6	1,3
500	amb	332,0	-291,9	129,2	-23,8	1,6

Tableau 4 : Coefficients polynomiaux intervenant dans la formulation de l'énergie globale d'activation E<sub>a</sub> (P,T,Φ).

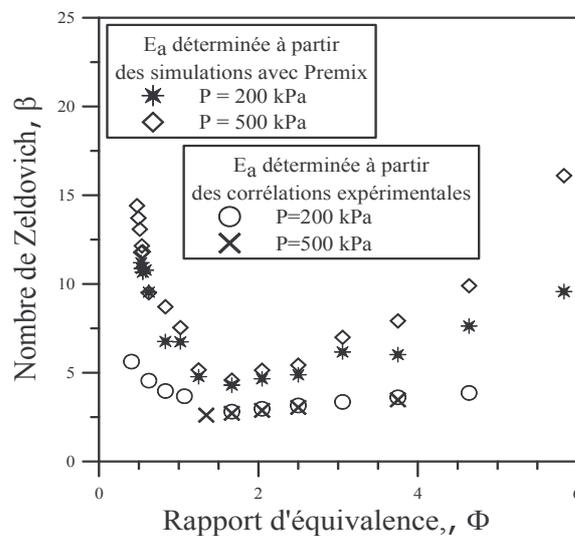
## 4.2 Nombre de Zeldovich β

L'énergie réduite d'inflammation, ou nombre de Zeldovich (β), est déduite des résultats expérimentaux et tracée en fonction de la richesse pour une pression initiale de 101 kPa (Figure 41). Dans ces conditions, le nombre de Zeldovich dépend faiblement de la méthode expérimentale et des résultats obtenus par différents auteurs, à l'exception de ceux présentés par Gavrikov et coll. [103] (Figure 41).



**Figure 41 : Nombre de Zeldovich en fonction de la richesse, pour des mélanges H<sub>2</sub>-air à température initiale ambiante et pression initiale de 101 kPa.**

Dans la branche pauvre, une diminution rapide de l'énergie d'activation réduite  $\beta$  a lieu lors de l'augmentation de la richesse. ( $\beta_{101 \text{ kPa}} = 10$  à  $\phi = 0,5$  et  $\beta_{101 \text{ kPa}} = 4$  à  $\phi = 1$ , Figure 41). Pour la branche riche, le nombre de Zeldovich ré-augmente avec la richesse ( $\beta_{101 \text{ kPa}} = 6,4$  à  $\phi = 4,6$ ). Les mêmes tendances sont observées pour des pressions plus élevées de 200 kPa et 500 kPa (Figure 42). Lors de l'augmentation de la pression, la richesse en combustible influe légèrement plus sur la valeur du nombre de Zeldovich (Figure 42).



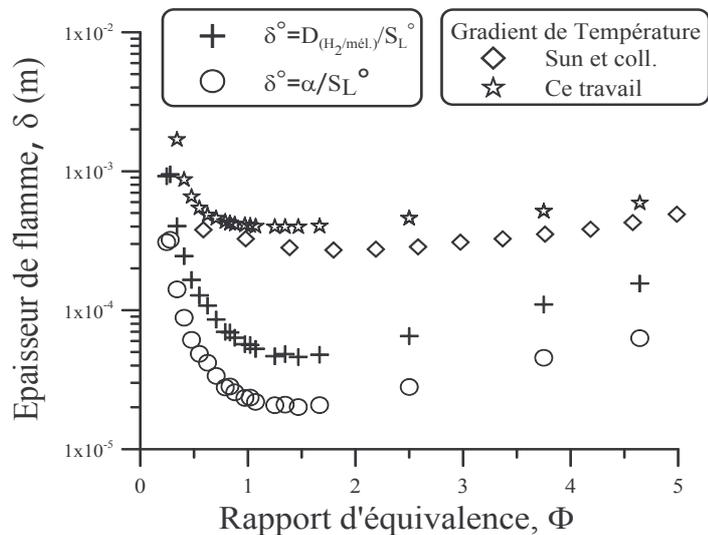
**Figure 42 : Nombre de Zeldovich en fonction de la richesse, pour des mélanges H<sub>2</sub>-air à température initiale ambiante et pression initiale de 200 et 500 kPa.**

### 4.3 Longueur de Markstein

#### 4.3.1 Epaisseur de flamme

La détermination de la longueur de Markstein fait appel à la corrélation établie ci-avant pour les valeurs du nombre de Zeldovich en fonction de la richesse. La longueur de Markstein ( $L'$ ) traduit la susceptibilité de la flamme à réagir à un étirement par une accélération positive ou négative.  $L'$  dépend de la valeur d'épaisseur de flamme retenue pour

sa définition. L'épaisseur de flamme varie grandement selon les publications (Figure 43). Les valeurs publiées par Sun et coll. [99] sont bien plus élevées que celles établies par simulation reposant successivement sur la diffusion massique dans le mélange puis la diffusivité thermique.



**Figure 43 : Epaisseur de flamme en fonction de la richesse pour des mélanges H<sub>2</sub>-air initialement à température ambiante et pression 100 kPa.  $\alpha$  est la diffusivité thermique et  $D_{(H_2/mixt)}$  est le coefficient de diffusion massique dans le mélange.**

La détermination de la longueur de Markstein est effectuée via l'équation :

$$L' = (b-k)/2\sigma \quad \text{Eq. 12}$$

La valeur de  $b$  est déduite de la corrélation sur les résultats expérimentaux, selon l'équation mentionnée en 4.1.

La valeur de  $k$  peut être obtenue par simulation [87, 88]. Poinot [104] a toutefois proposé une solution plus générale où  $k$  est déduit de l'épaisseur de flamme  $\delta$  et du taux d'expansion  $\sigma$  :

$$k = \delta (1+\sigma) \quad \text{Eq. 13}$$

### 4.3.2 Mélange hydrogène-air

Dans le cadre de ces travaux, l'épaisseur de flamme repose sur la diffusion massique dans le mélange gazeux. Les valeurs de  $b$  et  $k$  sont comparées à celles fournies par Dowdy et coll. [87], pour une pression de 100 kPa et une température ambiante (Figure 44). Les résultats sont en bon accord si la richesse est supérieure à 0,5. Les valeurs de  $k$  pour les mélanges plus pauvres diffèrent du fait de la prise en compte de coefficients de diffusion différents.

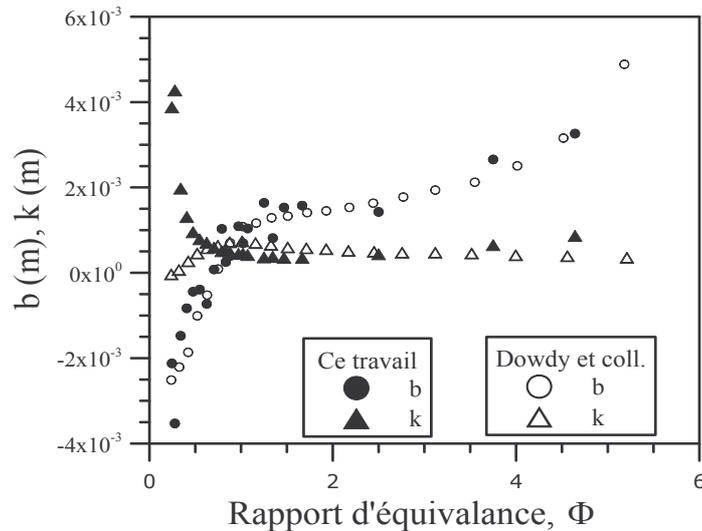


Figure 44 : Paramètres  $b$  et  $k$  en fonction de la richesse. Comparaison avec la littérature. À température ambiante et pression 100 kPa.

Les longueurs de Markstein  $L'$  sont en bon accord avec plusieurs sources disponibles dans la littérature concernant les flammes en expansion [87], [105] ou des flammes à contre-courant [106] (Figure 45), pour une pression de 100 kPa. La méthode d'intégration montre un avantage certain car elle nécessite un faible nombre d'étapes de calcul, ce qui limite les erreurs potentielles. La susceptibilité à l'accélération est inversée pour une composition autour de 25 % d'hydrogène dans l'air. Aung et coll. [9] ont identifié une inversion à 23 %  $H_2$  / air.

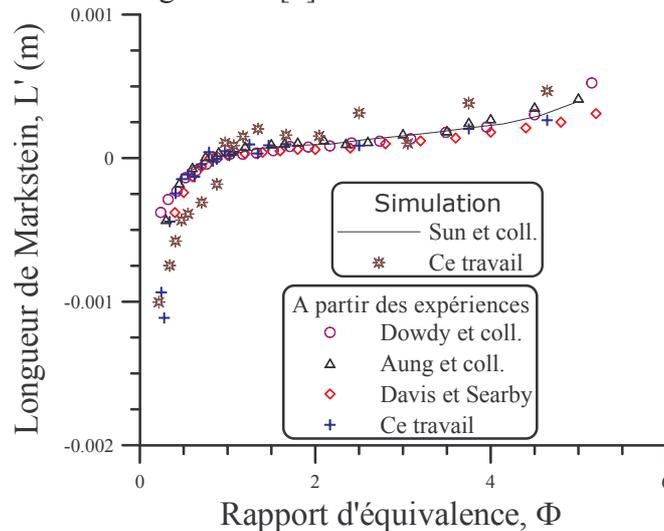


Figure 45 : Longueur de Markstein en fonction de la richesse, pour des mélanges  $H_2$ -air, initialement à température ambiante et pression de 100 kPa.

A température ambiante et pour des pressions de 200 kPa et 500 kPa, la même tendance est observée : augmentation de la longueur de Markstein avec la richesse (Figure 46).

Pour une pression de 200 kPa, les valeurs obtenues sont en bon accord avec celles établies par Aung et coll. [9]. La transition entre les flammes stables et instables est identifiée entre 25 % et 30 % d'hydrogène dans l'air, sensiblement identique à celle de Aung et coll. [9]

La comparaison avec les essais à 500 kPa montre une indépendance de la longueur de Markstein à la pression.

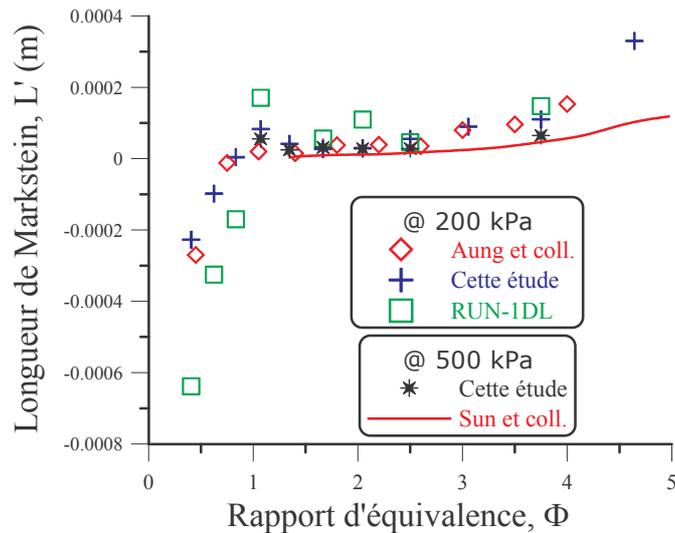


Figure 46 : Longueur de Markstein en fonction de la richesse, pour des mélanges H<sub>2</sub>-air, initialement à température ambiante et pression de 200 et 500 kPa.

### 4.3.3 Mélange hydrogène-air-diluant

Aux nouvelles séries d'expériences réalisées dans le cadre de l'établissement d'une corrélation sur la vitesse fondamentale, se sont ajoutées les ré-évaluations des anciennes données expérimentales. Celles-ci portent sur la propagation de flammes laminares dans des mélanges pauvres ( $\phi < 0,6$ ) dilués ou non. La dilution peut être effectuée avec le mélange diluant (60 % CO<sub>2</sub> + 40 % He) jusqu'à hauteur de 40 %, ou encore avec de la vapeur d'eau avec une température initiale de 353 K [89], [90].

Pour un mélange donné, une augmentation de la température (de 298 à 353 K pour  $\phi < 0,4$ ) entraîne une diminution de la longueur de Markstein. L' diminue également lorsque l'on augmente la dilution du mélange réactif. (Figure 47 et Figure 48).

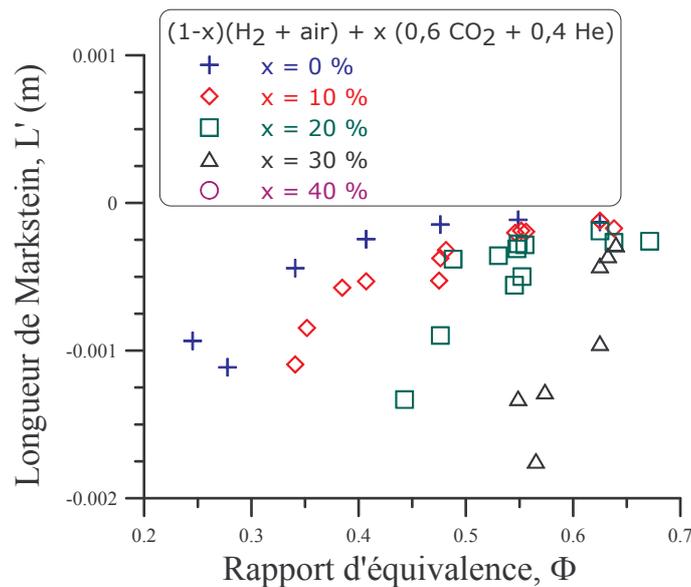
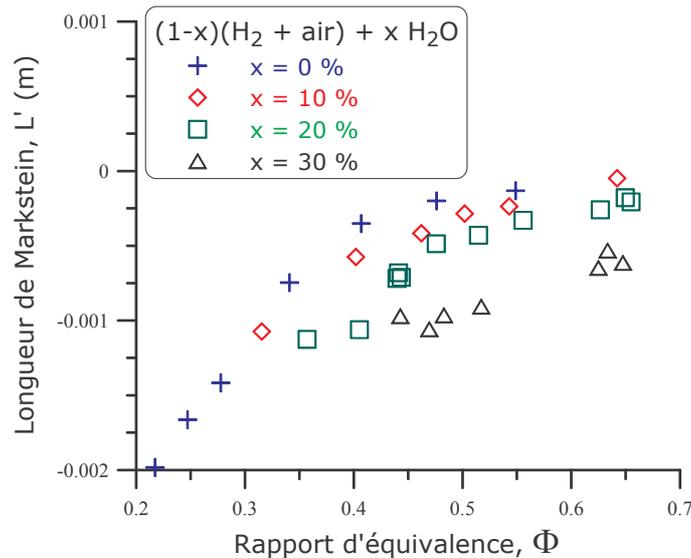


Figure 47 : Longueur de Markstein en fonction de la richesse, à 100 kPa, à température ambiante, pour un mélange H<sub>2</sub>-air dilué par un mélange (60 % CO<sub>2</sub> + 40 % He).



**Figure 48 : Longueur de Markstein en fonction de la richesse, à 100 kPa, à température de 353 K, pour un mélange H<sub>2</sub>-air dilué par de la vapeur d'eau.**

Il est à remarquer que, comme noté précédemment, les phénomènes d'instabilités dans le front de flamme limitent l'étude de la branche pauvre lors de l'augmentation de la dilution. Les structures cellulaires plissent d'autant plus rapidement la flamme lors de sa propagation que le puits thermique, induit par la teneur en vapeur ou en pseudo-vapeur d'eau, est important. La diffusion de matière devient alors prédominante sur la diffusion thermique et les instabilités thermo-diffusives introduisent une incertitude supplémentaire sur la détermination de la longueur de Markstein, incertitude pouvant atteindre 100 % [107].

## 5 Formulation de la vitesse fondamentale à étirement nul en fonction des pression, température, composition initiales

Plusieurs séries d'expériences en bombe sphérique ont été réalisées en présence ou non de diluants. Les conditions expérimentales sont reportées dans le tableau suivant :

Mélanges	Pression	% molaire d'H <sub>2</sub>
H <sub>2</sub> - O <sub>2</sub> - N <sub>2</sub>	100, 200 et 500 kPa	14 à 65
H <sub>2</sub> - O <sub>2</sub> - N <sub>2</sub> - 10 % (40 % He - 60 % CO <sub>2</sub> )	200 kPa	14 à 50
H <sub>2</sub> - O <sub>2</sub> - N <sub>2</sub> - 20 % (40 % He - 60 % CO <sub>2</sub> )	200 kPa	14 à 20
H <sub>2</sub> - O <sub>2</sub> - He	200 et 500 kPa	10 à 60

**Tableau 5 : Conditions expérimentales des études.**

Les vitesses fondamentales ont été déduites selon une nouvelle approche, proposée par Taylor et coll. [87], [88]. Les valeurs expérimentales ont été comparées avec des simulations sur le code CHEMKIN/PREMIX.

Les paramètres fondamentaux tels que l'énergie d'activation ou les nombres de Markstein sont déduits aussi bien des données expérimentales que des simulations

numériques, pour les conditions ci-dessus (Tableau 5). Un bon accord est obtenu avec les résultats publiés dans la littérature lorsque ceux-ci existent. L'utilisation de valeurs extrapolées par simulation a permis la détermination des données lorsque celles-ci étaient inaccessibles expérimentalement.

Une corrélation déterminant la vitesse fondamentale de flamme en fonction de la richesse, du taux de diluant, de la température et de la pression a pu être établie :

$$S_1^\circ(\Phi, \Psi, T, P) = (1,44 * \Phi^2 + 1,07 * \Phi - 0,29) * (1 - Y)^4 * (T / T_{ref})^{2,2} * (P / P_{ref})^{-0,5}$$

Avec :  $P_{ref} = 100$  kPa,  $T_{ref} = 298$  K

Validation sur les plages : P [100 à 500 kPa],  $\Phi$  richesse [0,24 à 0,7], T (K) [298 à 353K],  $\Psi$  (fraction de diluant) [0 à 0,4].

## **CHAPITRE IV**

# **DEFLAGRATIONS ACCELEREES DANS UNE ENCEINTE ENCOMBREE D'OBSTACLES**

L'objet de ce chapitre est double :

- Analyser la propagation d'une flamme dans une enceinte encombrée d'obstacles afin de déterminer des critères d'accélération forte de la flamme
- Valider un code de simulation numérique (TONUS)

## 1 ENACCEF

L'influence de la géométrie et particulièrement de la présence d'obstacles est reconnue comme un facteur accélérant la propagation de flamme. Le nombre, la forme et le taux de blocage de ces derniers sont des paramètres importants. Dans certains cas l'accélération produite peut induire des détonations (Lee et al. (1985), Knystautas et al. (1986)...). En propagation verticale pour des mélanges très pauvres ( $< 18\%_{\text{molaire}}$ ) en hydrogène, il n'y a pas de résultats dans la littérature. L'influence de la gravité non seulement sur l'homogénéité du mélange mais aussi sur la propagation de la flamme n'est donc pas connue.

Les expériences de propagation de flamme turbulente dans l'enceinte ENACCEF pendant ces travaux de thèse ont eu pour objectif la détermination de l'influence :

- du taux de blocage des obstacles,
- de la forme des obstacles,
- de la composition,
- de l'impact de gradients de concentration.

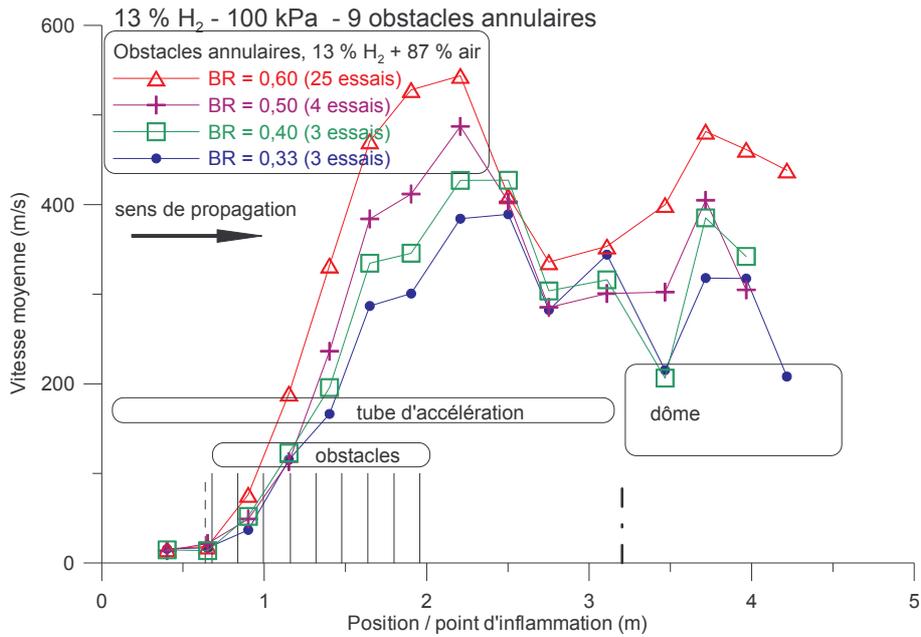
Sur les graphiques de profil de vitesse, les traits verticaux sur l'axe des abscisses sont relatifs aux positions des obstacles. La séparation entre le tube et le dôme est symbolisée de la même façon avec un trait discontinu.

Rappel : sauf mention particulière, les mélanges gazeux au sein de l'installation sont homogènes dans l'espace, à température initiale ambiante et avec une pression initiale de 100 kPa. La disposition et le nombre (9) des obstacles sont constants sauf études en tube lisse.

## 2 Influence du taux de blocage des obstacles

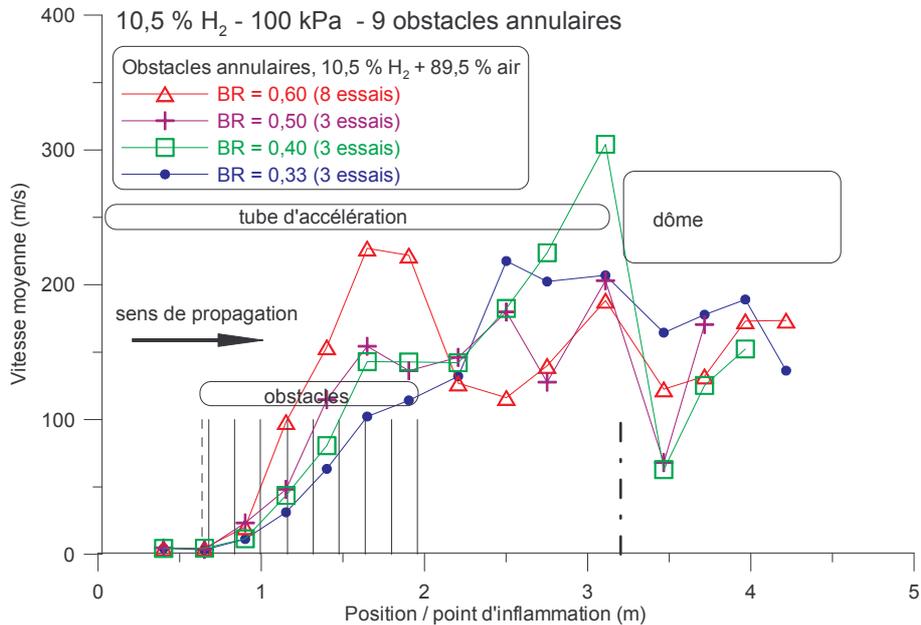
Dans cette étude les neuf obstacles internes sont identiques. Ils sont de forme annulaire. Le taux de blocage varie selon les expériences, en fonction des diamètres internes des obstacles. Divers mélanges sont étudiés successivement.

L'influence du taux de blocage avec des obstacles annulaires et un mélange combustible de 13% d'hydrogène dans l'air est récapitulée en Figure 49. La vitesse maximale de flamme est obtenue en sortie de la zone obstruée. Elle augmente avec le taux de blocage. Ainsi, pour un taux de blocage BR de 0,33, la vitesse maximale observée est de  $389 \text{ m.s}^{-1}$  et augmente à  $510 \text{ m.s}^{-1}$  pour  $\text{BR} = 0,63$ .



**Figure 49 : Influence du taux de blocage sur le profil de vitesse de flamme le long de l'installation ENACCEF. Obstacles annulaires, 13 % H<sub>2</sub> / air sec, 100 kPa, 293 K.**

Dans le cas de flammes se propageant dans un mélange composé de 10,5 % d'hydrogène dans l'air, la vitesse maximale est nettement moins dépendante du taux de blocage : celle-ci passe de 218 m.s<sup>-1</sup> pour BR = 0,33 à 245 m.s<sup>-1</sup> pour BR = 0,63 (Figure 50).



**Figure 50 : Influence du taux de blocage sur le profil de vitesse de flamme le long de l'installation ENACCEF. Obstacles annulaires, 10,5 % H<sub>2</sub> / air sec, 100 kPa, 293 K.**

Les signaux de pression sont en accord avec les enregistrements des photomultiplicateurs. Ils sont enregistrés en haut du dôme afin de retarder l'instant où la flamme chauffe le capteur et subit une dérive thermique négative du signal renvoyé. Les valeurs enregistrées sont donc fiables aussi longtemps que la température du capteur reste constante et atteste qu'il n'y a pas d'échauffement par contact avec la flamme. Les valeurs de pression sont rapportées dans le Tableau 6.

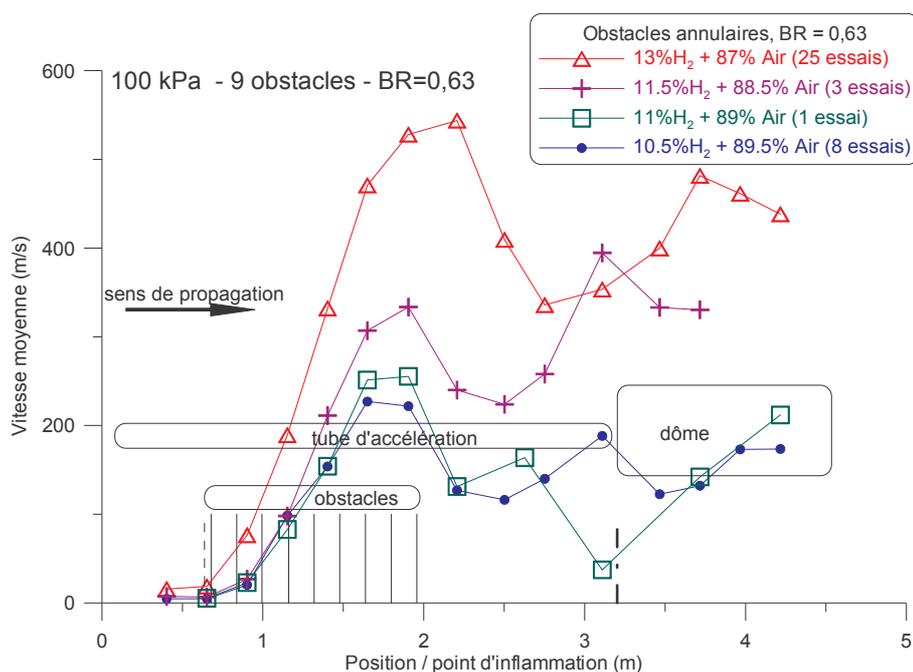
Indépendamment de la composition du mélange, la vitesse globale de combustion augmente lorsque le taux de blocage passe de 0,33 à 0,63. La surpression maximale enregistrée à la paroi passe ainsi de 192 à 361 kPa.

Taux de blocage BR	0,33	0,40	0,50	0,63
Surpression enregistrée au PCB2 (kPa)	1,92	2,74	3,44	3,61

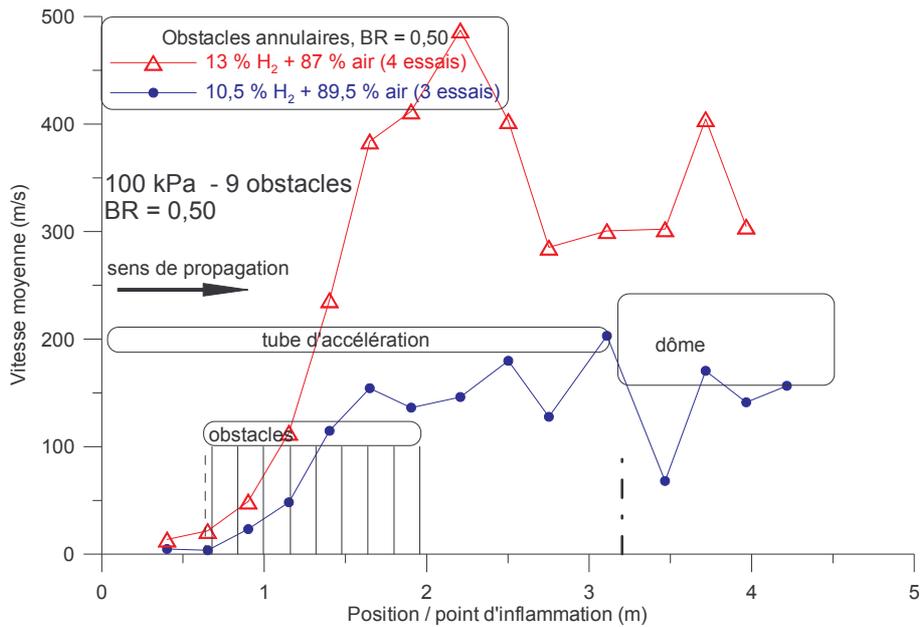
**Tableau 6 : Surpression maximale enregistrée par le capteur PCB2 en fonction du taux de blocage. Capteur positionné en haut du dôme, à 4,88 m de l'étincelle. Le mélange (13 % H<sub>2</sub> / air sec) est initialement à 100 kPa et 293 K.**

L'accélération induite par la restriction de section est d'autant plus faible que le mélange est plus pauvre. Dans ce dernier cas, la vitesse laminaire et le taux d'expansion thermique sont plus élevés.

La composition du mélange a plus d'influence sur l'accélération de la flamme que le taux de blocage. Ainsi la Figure 52 permet de comparer les vitesses pour deux compositions (13 % et 10,5 % d'hydrogène dans l'air) pour un taux de blocage de 0,5. Les vitesses maximales sont nettement différentes et la décélération en sortie de la zone obstruée n'est présente que pour le mélange le plus riche ; le mélange le plus pauvre a une vitesse de propagation quasiment constante lorsque la flamme est accélérée. D'autre part, la vitesse maximale est obtenue en sortie de la zone obstruée lorsque le mélange est riche, atteinte au 2/3 de la zone obstruée lorsque le mélange est pauvre.

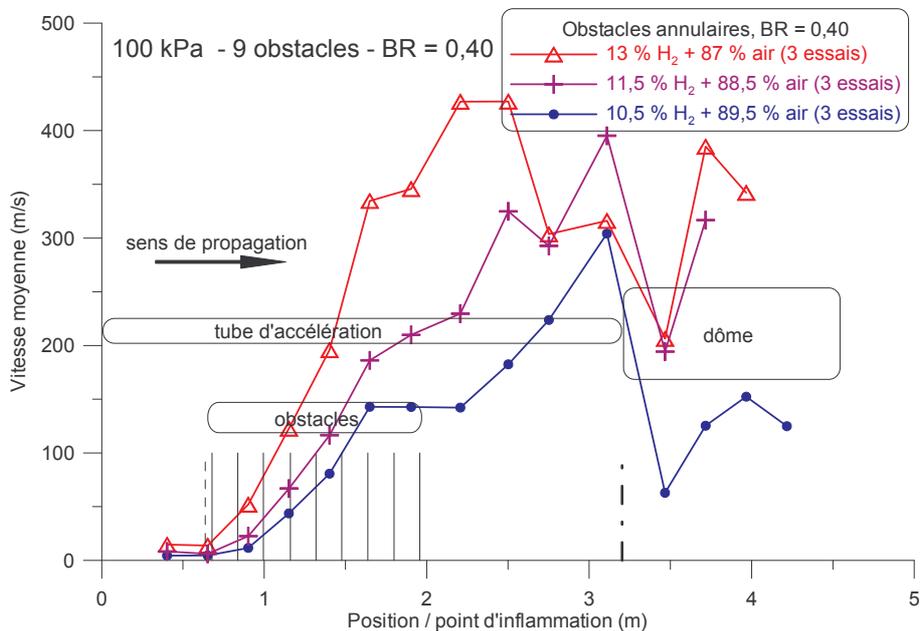


**Figure 51 : Influence de la composition sur le profil de vitesse de flamme le long de l'installation ENACCEF, pour un taux de blocage de 0,63. Pression et température initiales de 100 kPa et 293 K.**



**Figure 52 : Influence de la composition sur le profil de vitesse de flamme le long de l'installation ENACCEF, pour un taux de blocage de 0,50. Pression et température initiales de 100 kPa et 293 K.**

Des profils de vitesse de propagation de flamme proches des précédents sont enregistrés pour des taux de blocage plus faibles (0,4 pour la Figure 53 et 0,33 pour la Figure 54).



**Figure 53 : Influence de la composition sur le profil de vitesse de flamme le long de l'installation ENACCEF, pour un taux de blocage de 0,40. Pression et température initiales de 100 kPa et 293 K.**

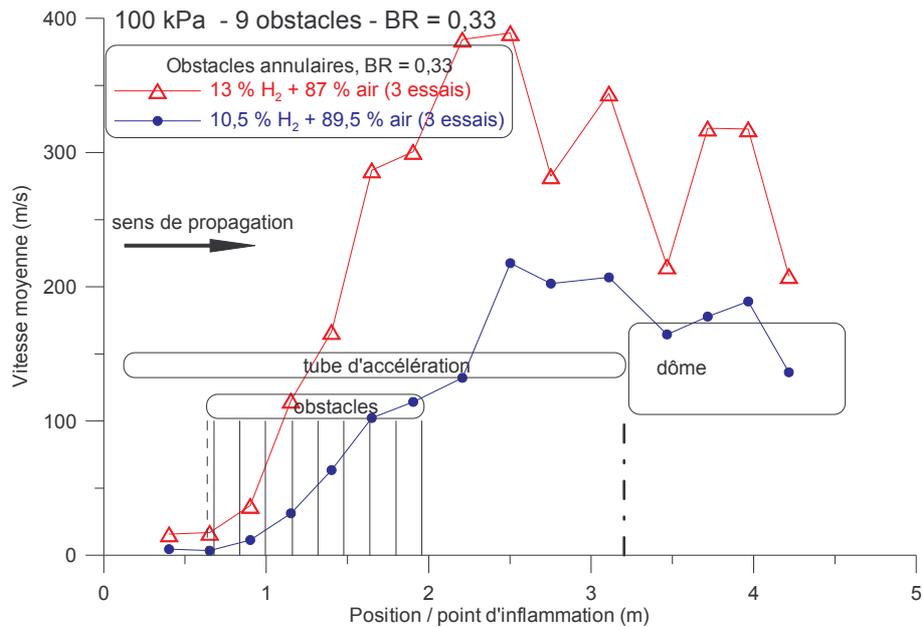
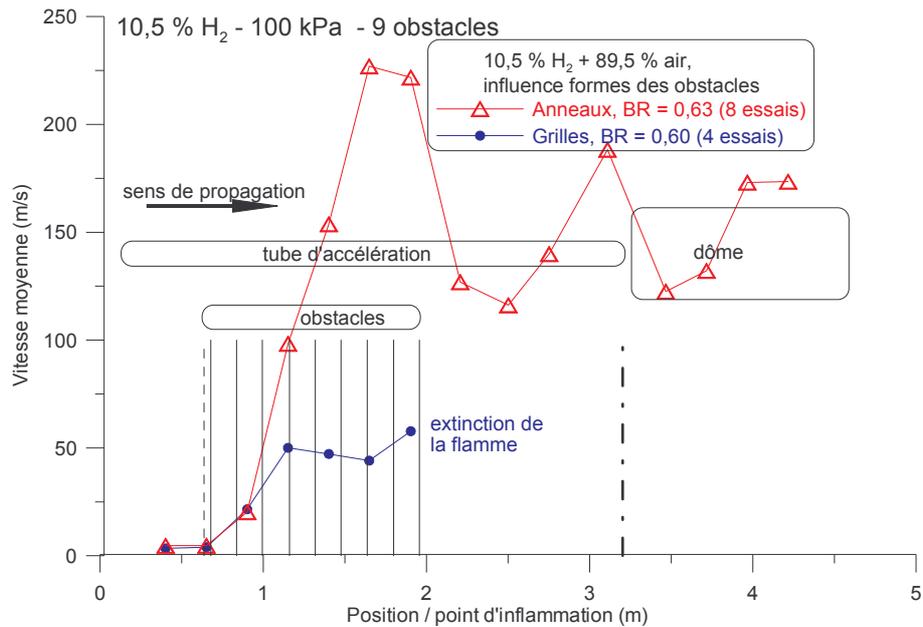


Figure 54 : Influence de la composition sur le profil de vitesse de flamme le long de l'installation ENACCEF, pour un taux de blocage de 0,33. Pression et température initiales de 100 kPa et 293 K.

### 3 Influence de la forme des obstacles

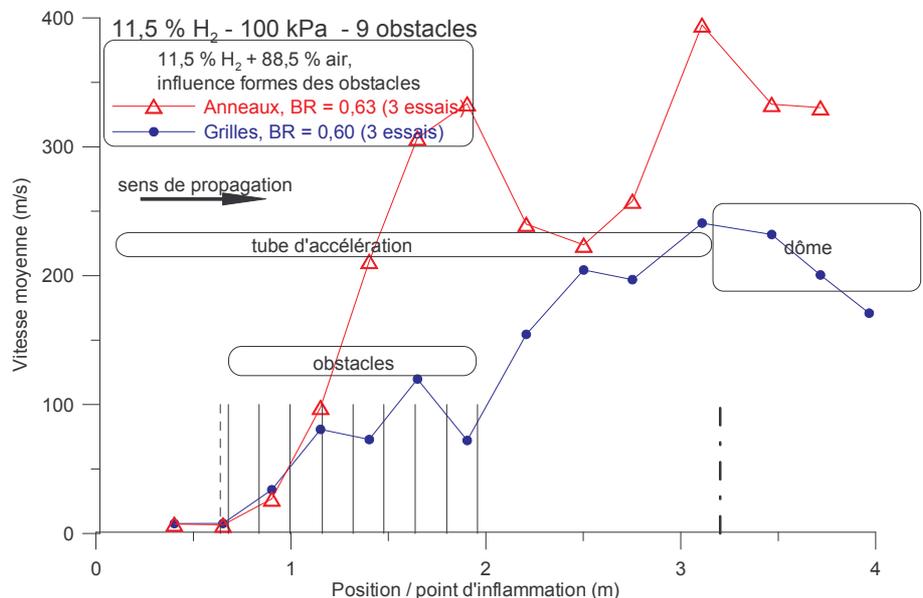
Dans cette étude le taux de blocage est fixé autour de 0,6. Les influences des obstacles annulaires (BR = 0,63) sont comparées à celles des obstacles en forme de grille (BR = 0,6). Trois mélanges à 13 %, 11,5 % et 10,5 % d'hydrogène sont étudiés séparément.

Lorsque le mélange est très pauvre, les obstacles annulaires ont tendance à accélérer plus fortement la flamme que les grilles. En effet, pour une flamme se propageant dans un mélange à 10,5 % d'hydrogène, les anneaux induisent une vitesse maximale de  $245 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$  et la flamme se propage jusqu'en haut de l'installation. Les grilles provoquent, d'une part, une accélération plus faible (la vitesse maximale étant de  $76 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ ), et d'autre part, éteignent la flamme avant sa sortie de la zone obstruée (Figure 55). Ceci pourrait s'expliquer par des pertes thermiques plus importantes (les grilles présentant une surface de contact plus efficace) et une turbulence de petite échelle plus intense et donc propice à diluer thermiquement le front de flamme.



**Figure 55 : Influence de la forme des obstacles sur le profil de vitesse de flamme le long de l'installation ENACCEF, pour un mélange contenant 10,5 % H<sub>2</sub>. Taux de blocage : 0,6 pour la grille et de 0,63 pour les anneaux. Pression et température initiales de 100 kPa et 293 K.**

Le mélange à 11,5 % d'hydrogène présente des caractéristiques similaires. L'accélération induite par la présence d'obstacle est ainsi comparable à celles des grilles au début de la zone d'accélération, mais moins intense par la suite. La flamme continue son accélération en sortie de la zone obstruée contrairement à la configuration avec les anneaux qui voit une nette décélération. Les deux flammes atteignent quasiment la même vitesse de propagation entre la sortie des obstacles et la transition tube-dôme (Figure 56).

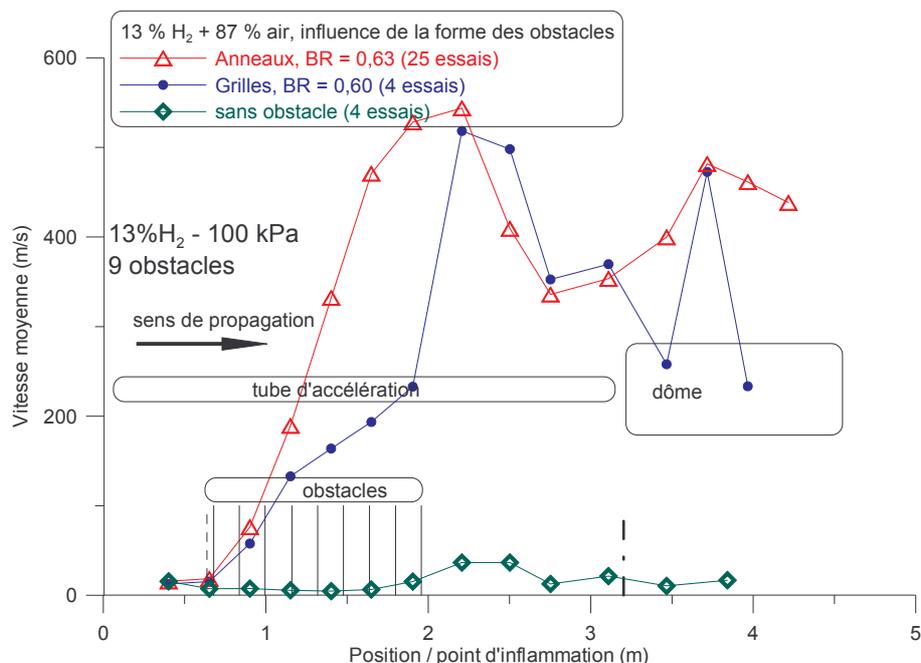


**Figure 56 : Influence de la forme des obstacles sur le profil de vitesse de flamme le long de l'installation ENACCEF, pour un mélange contenant 11,5 % H<sub>2</sub>. Taux de blocage : 0,6 pour la grille et de 0,63 pour les anneaux. Pression et température initiales de 100 kPa et 293 K.**

Dans le cas de flammes se propageant dans des mélanges à 13 % d'hydrogène dans l'air, les anneaux accélèrent régulièrement la vitesse de la flamme qui est à son maximum à la sortie de la zone obstruée (Figure 57).

Avec un mélange de richesse identique et la présence de grilles, l'accélération est moins importante pendant la traversée de la zone obstruée mais augmente fortement en sortie des obstacles.

Ainsi, les vitesses maximales observées avec les anneaux ou les grilles sont identiques et coïncident spatialement. La flamme se propage dans l'intégralité de l'enceinte dans les deux cas. Les profils de vitesse sont toutefois nettement différents car les historiques de flamme (et donc les conditions locales de température, pression, vitesse d'écoulement) jouent un rôle majeur sur l'évolution de la flamme, phénomène instationnaire.



**Figure 57 : Influence de la forme des obstacles sur le profil de vitesse de flamme le long de l'installation ENACCEF, pour un mélange contenant 13 % H<sub>2</sub>. Taux de blocage : 0,6 pour la grille et de 0,63 pour les anneaux. Pression et température initiales de 100 kPa et 293 K.**

La montée en pression enregistrée en haut de l'enceinte (Tableau 7) est plus faible avec les grilles (261 kPa) qu'avec les anneaux (361 kPa).

	Surpressions (kPa)	
	Grilles	Anneaux
Capteur PCB2	261	361

**Tableau 7 : Surpression maximale enregistrée par le capteur PCB2 en fonction de la forme des obstacles. Capteur positionné en haut du dôme, à 4,88 m de l'étincelle. Le mélange (13 % H<sub>2</sub> / air sec) est initialement à 100 kPa et 293 K.**

## 4 Influence de la composition

Dans cette étude les obstacles sont de forme annulaire et présentent un taux de blocage de 0,63. La composition varie selon les essais et fait intervenir le diluant simulant la vapeur d'eau.

Une augmentation de la concentration d'hydrogène dans le mélange combustible, de 10,5 % à 13 %, augmente de manière importante la vitesse maximale observable en sortie de la zone obstruée (Figure 58). A 13 % d'hydrogène dans l'air la vitesse maximale observée est

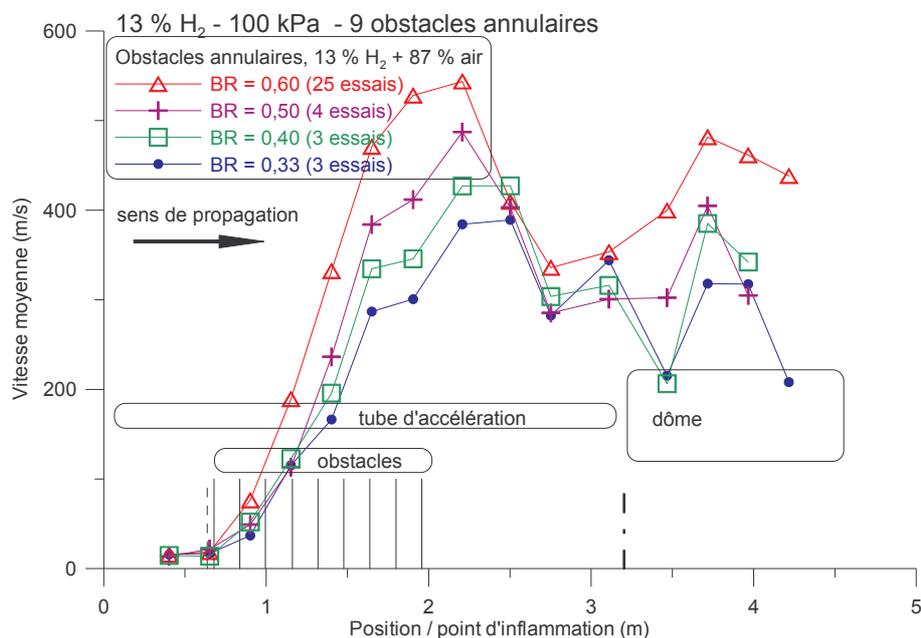
de  $535 \text{ m.s}^{-1}$  tandis qu'elle chute à  $220 \text{ m.s}^{-1}$  quand la concentration en hydrogène descend à 10,5 %.

Après le passage de la zone obstruée, la flamme décélère pour atteindre une vitesse de  $330 \text{ m.s}^{-1}$  pour un mélange à 13% d'hydrogène et autour de  $150\text{-}200 \text{ m.s}^{-1}$  pour un mélange à 10,5 %  $\text{H}_2$ . Ces mélanges présentent des taux d'expansion qui les placent de part et d'autre de la valeur limite selon le critère d'accélération de flamme proposé par Dorofeev et collaborateurs (1999) [1] : le facteur d'expansion de flamme séparant une flamme lente d'une flamme rapide est de 3,75. Or pour ces deux compositions de référence, nous avons :

$$\sigma_{13\%H_2} = 4,21$$

$$\sigma_{10,5H_2} = 3,66$$

Comme ce critère le confirme, le mélange à 13 %  $\text{H}_2$  dans l'air a un fort potentiel d'accélération et peut atteindre un régime choqué. Les mélanges plus pauvres montrent des dépendances à la géométrie et à la turbulence moins marquées (Figure 58).



**Figure 58 : Influence de la composition sur le profil de vitesse de flamme le long de l'installation ENACCEF. Obstacles annulaires, taux de blocage de 0,63. Pression et température initiales de 100 kPa et 298 K.**

L'effet de la dilutions par le mélange (60 %  $\text{CO}_2$ , 40 % He) substitutif à la vapeur d'eau fut étudié en deux temps afin de comparer les essais avec ceux effectués sans vapeur d'eau : à taux d'hydrogène constant, et à richesse constante.

composition	$\sigma$ (facteur d'expansion thermique)
13 % H <sub>2</sub> + 87 % Air	4,21
13 % H <sub>2</sub> + 67 % Air + 20 % diluant	4,09
13 % H <sub>2</sub> + 57 % Air + 30 % diluant	4,03
13 % H <sub>2</sub> + 47 % Air + 40 % diluant	4,00
12,8 % H <sub>2</sub> + 87,2 % (O <sub>2</sub> + 3,0 N <sub>2</sub> )	4,16
12,2 % H <sub>2</sub> + 87,8 % (O <sub>2</sub> + 3,25 N <sub>2</sub> )	4,03
11,9 % H <sub>2</sub> + 81,1 % (O <sub>2</sub> + 3,0 N <sub>2</sub> ) + 7 % diluant	3,92
11,6 % H <sub>2</sub> + 88,4 % (O <sub>2</sub> + 3,5N <sub>2</sub> )	3,90
11,5 % H <sub>2</sub> + 79,5 % (O <sub>2</sub> + 3,0 N <sub>2</sub> ) + 10 % diluant	3,82
11 % H <sub>2</sub> + 89 % Air	3,77

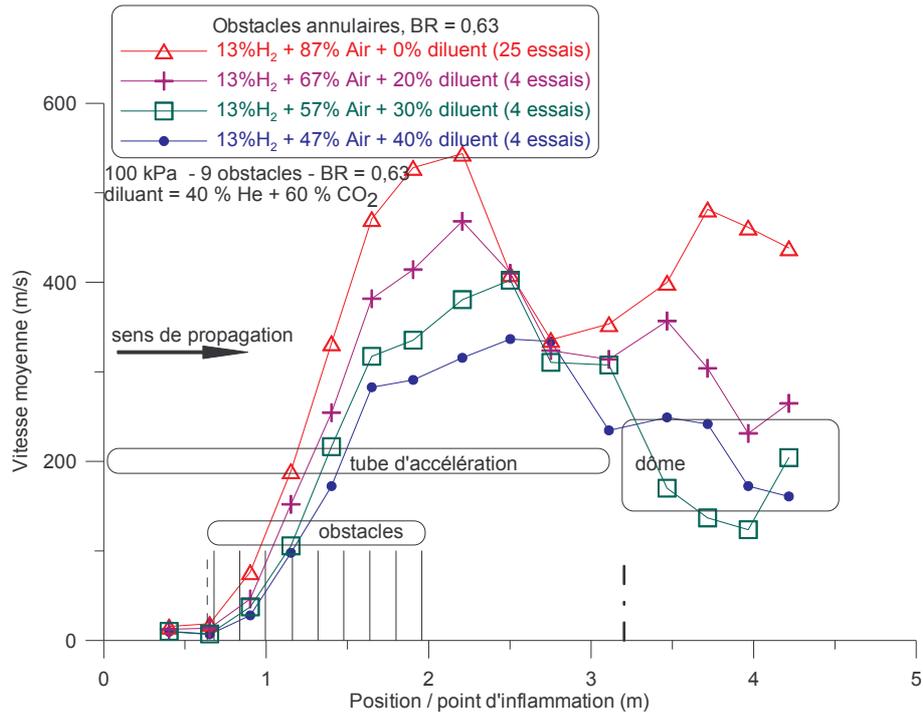
**Tableau 8 : Coefficient d'expansion thermique pour divers mélanges utilisés dans ENACCEF. Le diluant est constitué de (60 % CO<sub>2</sub> + 40 % He).**

La première série d'expérience a conservé une fraction d'hydrogène constante, tandis que le mélange mimique (40 % He et 60 % CO<sub>2</sub>) remplaçait une partie de l'air présent. Comme le montrent les résultats de la Figure 59, les profils de vitesse changent avec la substitution de l'air par la pseudo-vapeur d'eau. La vitesse maximale observée passe ainsi de 535 m.s<sup>-1</sup> à 330 m.s<sup>-1</sup>. Ceci est expliqué en partie par le fait que le taux d'expansion thermique passe de 4,21 à 4 (Tableau 8).

Lorsque le mélange contient 40 % de mélange substitutif à la vapeur d'eau, la flamme est relativement lente bien que le critère d'accélération de flamme prévoie pour celle-ci un régime choqué ( $\sigma$  étant égal à 3,75 pour ce mélange).

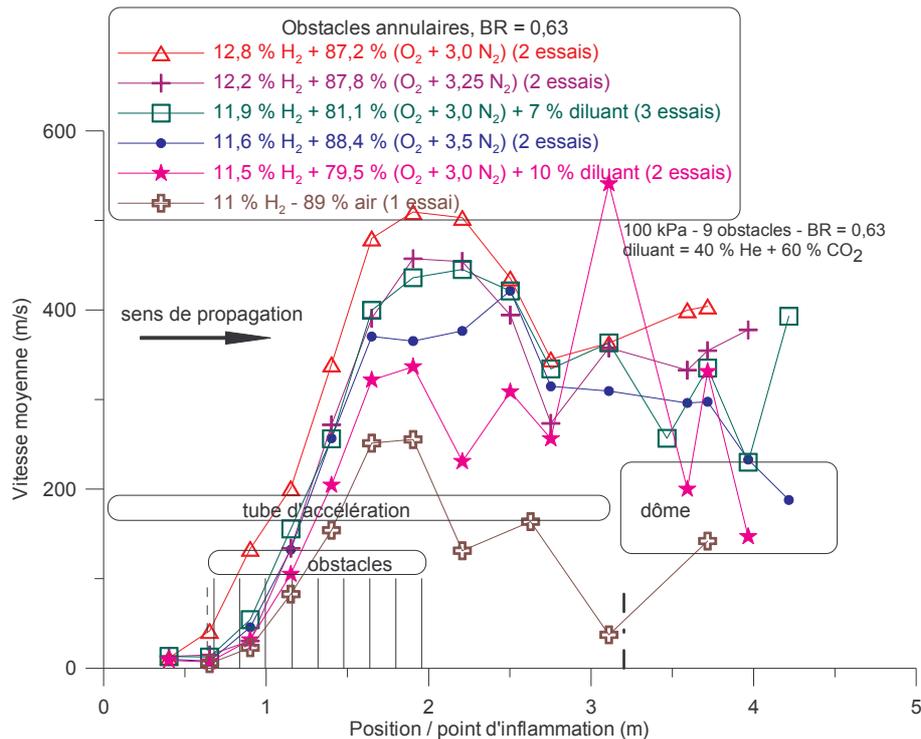
D'autre part, il faut remarquer que cette diminution de vitesse va à l'opposé de la richesse, qui augmente avec la substitution de l'air par la pseudo vapeur d'eau. Si l'augmentation de richesse a tendance à donner lieu à des flammes plus rapides, c'est l'effet de frein par dilution qui prédomine. Cela est explicable principalement par l'effet de puits thermique dû à la présence de pseudo vapeur d'eau, qui abaisse la température de flamme et donc le taux d'expansion thermique.

Enfin la dilution amplifie la phase de décélération en sortie de la zone obstruée, ce qui modifie l'historique de la flamme lors de sa propagation dans le dôme.



**Figure 59 : Influence de la dilution sur le profil de vitesse de flamme le long de l'installation ENACCEF. Obstacles annulaires, taux de blocage de 0,63. Pression et température initiales de 100 kPa et 298 K.**

La seconde série d'expériences consiste à conserver la richesse constante et égale à  $0,294 \pm 0,002$ . L'augmentation du taux de diluant induit également une diminution de la vitesse maximale de flamme observée en sortie des obstacles. Le classement des courbes, selon leur vitesse maximale, est en accord avec la variation du taux d'expansion pour ces mélanges gazeux (Tableau 8).



**Figure 60 : Influence de la composition sur le profil de vitesse de flamme le long de l'installation ENACCEF, à richesse constante à 0,294 et divers taux de diluant et oxygène. Obstacles annulaires BR = 0,63, 13 % H<sub>2</sub> – air sec, 100 kPa, 293 K.**

## 5 Gradients de concentration

Dans cette étude les obstacles sont de forme annulaire et présentent un taux de blocage de 0,63. La composition varie selon les essais et spatialement à l'intérieur de l'enceinte.

Si les mélanges homogènes ont déjà fait l'objet d'études expérimentales en environnement encombré, très peu de données sont disponibles concernant les propagations dans des atmosphères présentant initialement des gradients de concentration (Whitehouse et coll. 1996, Sochet et coll. 1997).

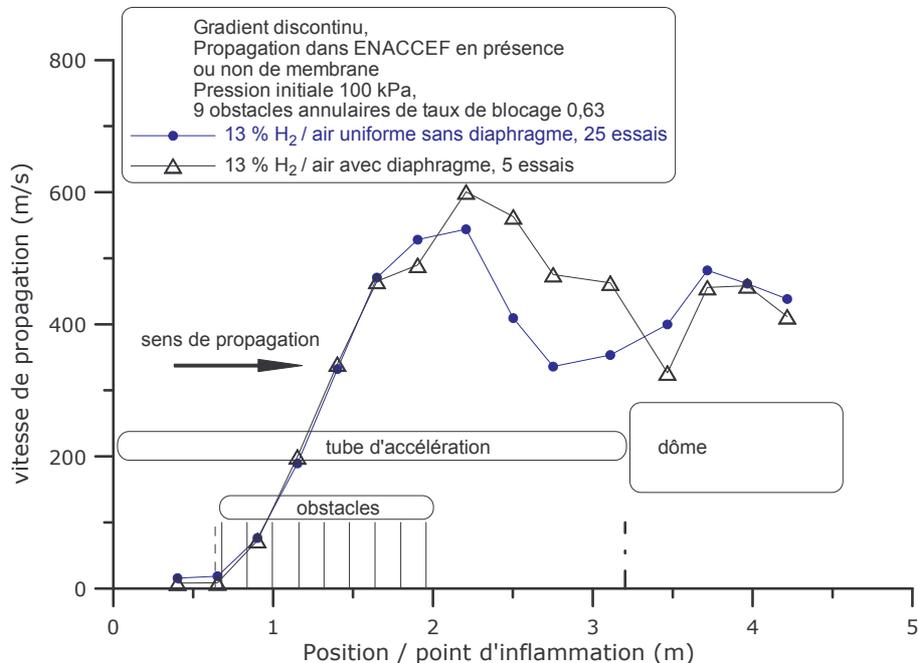
L'étude de mélanges non homogènes en concentration est conduite en deux temps : avec des gradients discontinus puis avec des gradients continus. La vérification de la composition se fait par prélèvement puis analyse en chromatographie gazeuse. Six points de prélèvement sont utilisés afin de quantifier chaque gradient. La réalisation des gradients de concentration dans l'enceinte ENACCEF s'effectue selon des protocoles assez proches dans les deux cas :

1. Pour obtenir des gradients discontinus, le tube est séparé physiquement du dôme grâce à l'utilisation d'une membrane en terphane tendue sur la pièce de jonction (voir description de l'appareillage). Deux mélanges différents sont ensuite introduits dans les compartiments préalablement vidés. La propagation de la flamme produit une onde de pression qui déchire la membrane avant que la flamme n'arrive sur elle. L'influence de la présence de cette membrane au moment de l'inflammation est discutée ci-après.
2. Les gradients continus sont créés par mélange forcé de deux mélanges introduits de part et d'autre d'une membrane isolant le tube et le dôme. L'introduction dans le tube est stoppée avant d'atteindre la pression finale. L'utilisation d'une membrane pliée, de 8 microns,

permet de connaître approximativement la surpression (environ 20-30 kPa) nécessaire à sa rupture. L'éclatement de la membrane crée un jet de gaz du dôme (dont la pression est proche de celle de fin d'introduction) vers le tube obstrué. La pression finale dans l'enceinte est atteinte par remplissage uniquement dans le dôme. Trois minutes d'attente permettent au gradient de s'établir de manière fiable. Les prélèvements sont ensuite effectués et l'inflammation/enregistrement lancés.

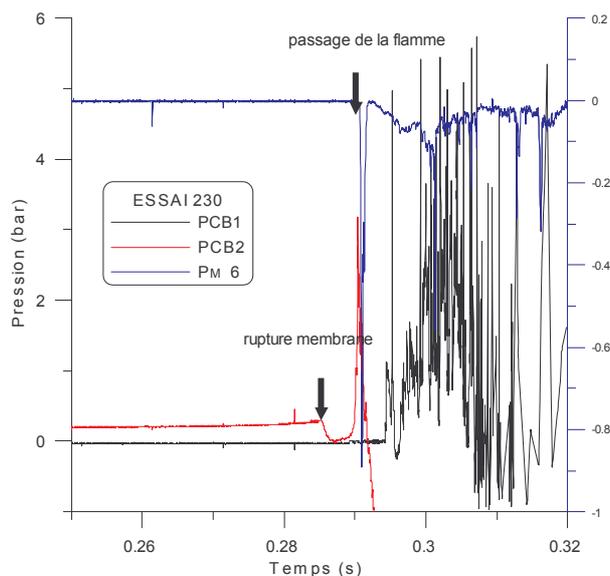
## 5.1 Gradients discontinus

Les expériences portant sur l'effet des gradients discontinus de concentration en hydrogène sur la propagation de la flamme montrent que la pression monte notablement dans le tube avant éclatement de la membrane. La comparaison d'une telle expérience avec celle d'un mélange homogène sans membrane met en évidence le rôle de accélérateur de la membrane sur la vitesse de flamme (Figure 61).



**Figure 61 : Influence de la présence d'une membrane sur le profil de vitesse de flamme dans ENACCEF. Mélange de 13 % hydrogène/air dans le dôme et le tube.**

Ce phénomène s'explique par la montée en pression avant que la membrane n'éclate. Par la suite, l'éclatement de la membrane donne naissance à un jet de gaz comprimés dans le dôme (Figure 62). Cette perturbation due à la présence de la membrane introduit une incertitude supplémentaire et rend les essais non comparables à ceux en milieu homogène.



**Figure 62 : Propagation de flamme en présence d'une membrane. Mélange 13 % H<sub>2</sub> dans le tube et le dôme, 9 obstacles annulaires, membrane terphane 8 μm. PCB1 : capteur de pression en haut du dôme, PCB2 en haut du tube d'accélération et en dessous de la membrane, photomultiplicateur 6 en face du PCB2.**

Ces perturbations, rendant les résultats non directement comparables avec ceux établis pour les études antérieures, ont incité à mettre au point un protocole nous permettant d'obtenir des gradients continus, sans séparation physique (membrane) dans l'enceinte.

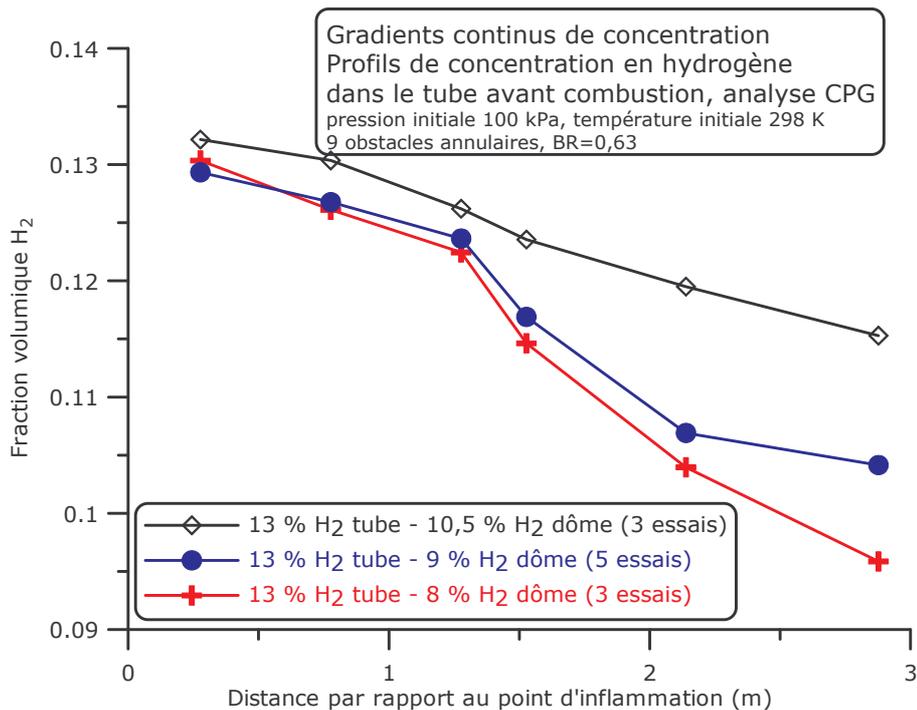
## 5.2 Gradients continus

Les gradients continus sont produits avant l'allumage : la rupture de la membrane force le mélange par diffusion et convection lors de l'égalisation de pression dans le tube. Les compositions injectées dans le tube et le dôme pour l'établissement des gradients sont exposées dans le Tableau 9.

Tube (H <sub>2</sub> , % vol.)	13	13	13	18	13	13 tube lisse
Dôme (H <sub>2</sub> , % vol.)	8	9	10,5	8	13	10,5

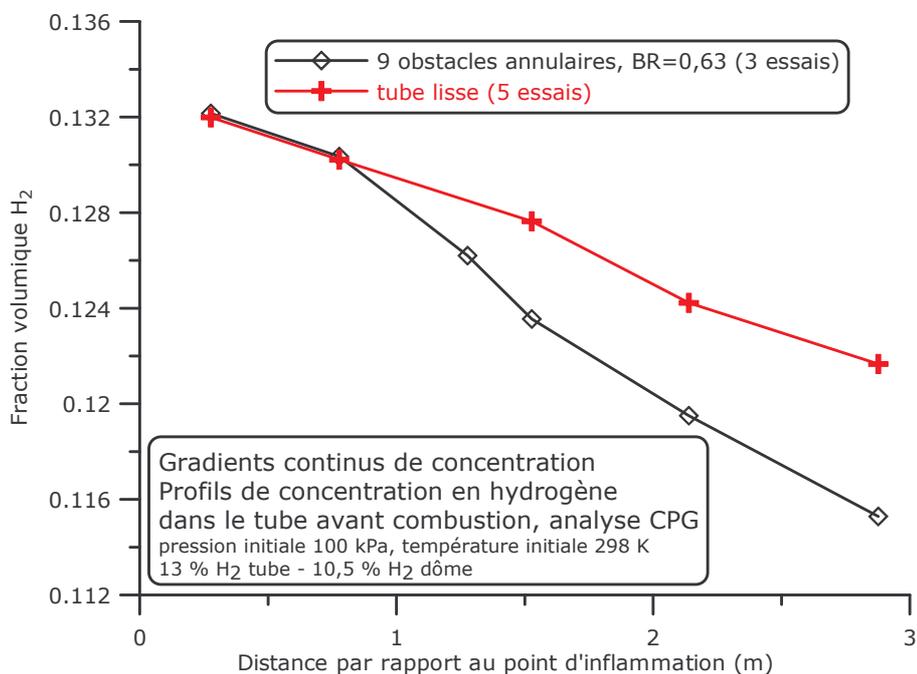
**Tableau 9 : Composition des mélanges injectés dans le tube et le dôme pour former des gradients de concentration dans ENACCEF.**

La mise en place de ce protocole opératoire nécessite un chronométrage des opérations car la diffusion massique fait évoluer le gradient dans le temps. Les sources de variations / incertitudes sur la composition au moment de l'inflammation sont identifiés (pression de rupture de membrane, remplissage final plus ou moins long, rupture de membrane non contrôlable, temps de prélèvement, incertitude sur l'analyse inférieure à 3% en masse ...). Une relativement bonne reproductibilité des profils de concentration le long du tube est toutefois obtenue et les profils de concentration sont proches des attentes, comme le montre la Figure 63.



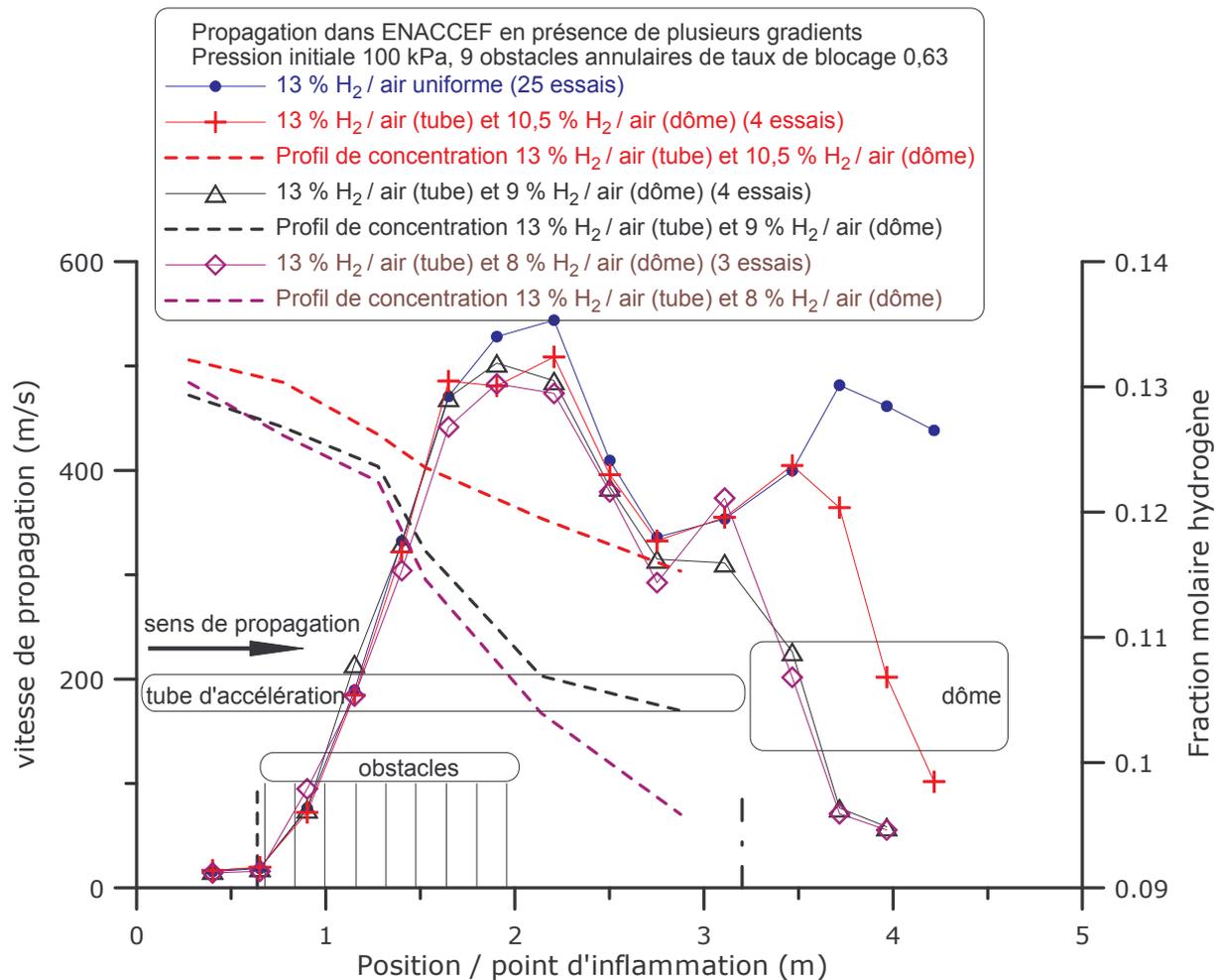
**Figure 63 : Profils de concentration en hydrogène le long du tube muni de 9 obstacles annulaires (BR = 0,63), avant combustion.**

Si l'on regarde l'influence de la configuration interne du tube sur le profil de concentration, on observe un gradient plus prononcé en présence d'obstacles (Figure 64).



**Figure 64 : Profils de concentration en hydrogène le long du tube muni ou non de 9 obstacles annulaires (BR = 0,63), avant combustion, pour un gradient 13 % H<sub>2</sub> tube – 10,5 % H<sub>2</sub> dôme.**

Les profils de vitesse pour les gradients continus montrent un faible impact de la présence du gradient (Figure 65) dans la zone où celui-ci est établi. En effet, les profils de vitesse au niveau du tube sont très proches des profils correspondant aux mélanges homogènes injectés dans le tube.



**Figure 65 : Comparaison de profils de vitesse de flamme dans ENACCEF pour divers gradients continus, dont la composition de fond de tube est constante à 13 % hydrogène /air. 9 obstacles annulaires de taux de blocage 0,63.**

Cela peut être partiellement expliqué par deux faits :

- le gradient n'est pas établi jusqu'au point d'allumage
- le rapport de volumes important entre le tube et le dôme.

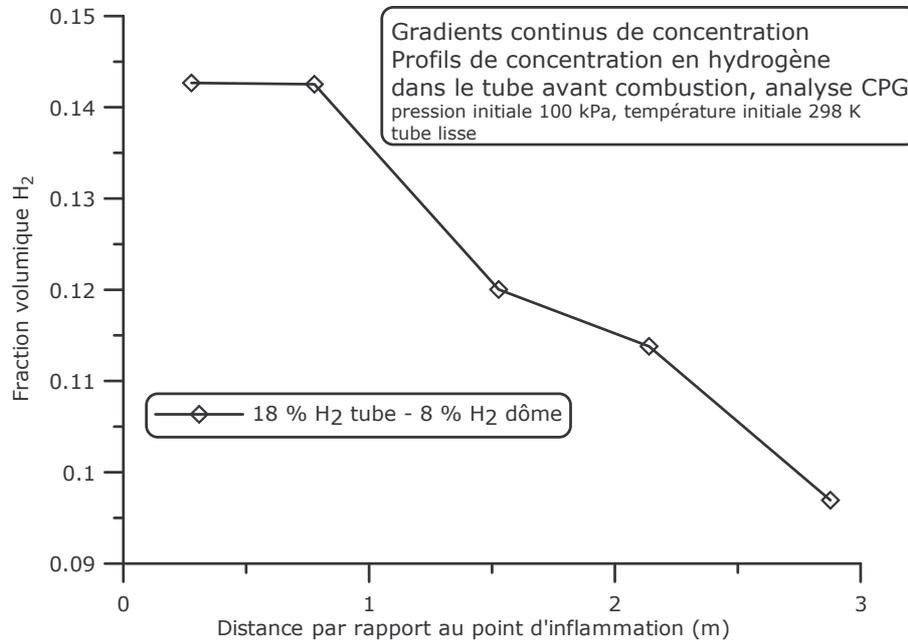
L'effet piston engendre une poussée des gaz et le rapport de volume entre le dôme et le tube étant grand, il y a peu d'augmentation de la pression globale mais bien un entraînement des gaz frais vers le dôme. Ainsi la hauteur du tube (3,2 m) est telle que l'on peut considérer que, même pour des mélanges pauvres, lorsque la flamme arrive en haut du tube, elle a en fait brûlé le mélange contenu initialement dans un volume situé à moins d'un mètre du point d'allumage. Or, il nous est difficile d'établir un gradient de concentration aussi loin de la zone de rupture comme vu précédemment (Figure 63) ou comme nous pouvons le voir par suite pour un fort gradient de concentration (Figure 66).

### 5.3 Gradient fort, évolution temporelle

L'influence du gradient de concentration sur le profil de vitesse de flamme étant faible, dans les conditions exposées précédemment, des essais en présence d'un gradient nettement

plus prononcé ont été tentés. Ceux-ci ont été effectués en configuration tube lisse pour éviter une détonation potentiellement induite par l'accélération trop rapide en cas d'obstruction.

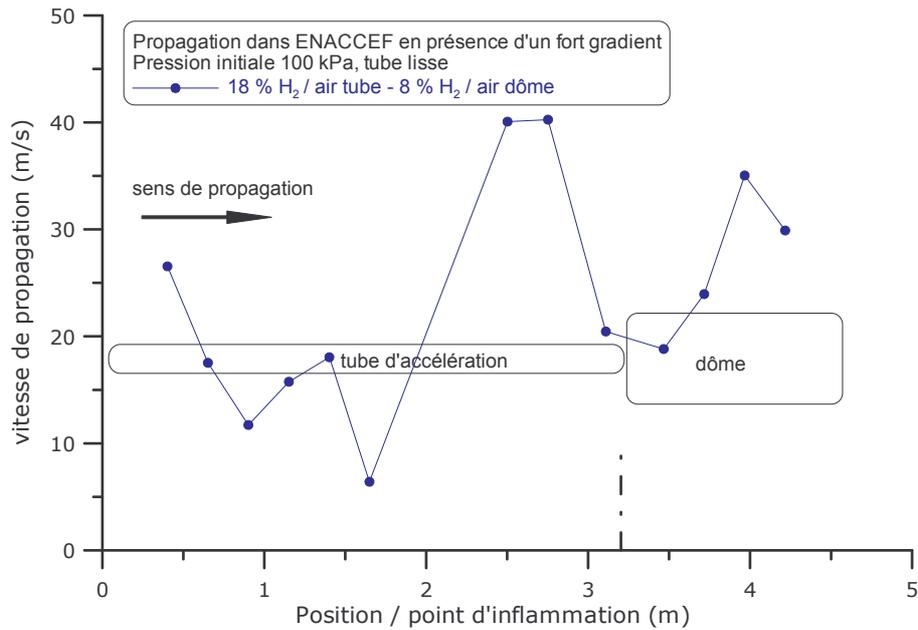
Le profil de concentration est similaire à ceux précédemment observés. Le plateau proche du point d'inflammation est toutefois mieux marqué du fait de l'amplitude du gradient (Figure 66).



**Figure 66 : Profils de concentration en hydrogène le long du tube lisse, avant combustion, pour un gradient 18 % H<sub>2</sub> tube – 8 % H<sub>2</sub> dôme.**

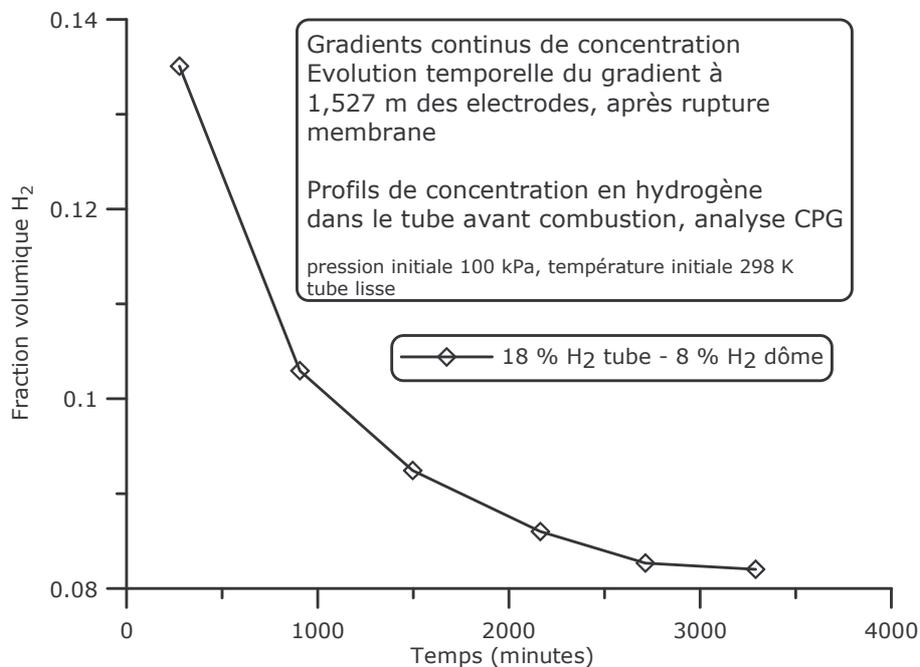
Cette distribution de concentration d'hydrogène a donné lieu à une propagation chaotique mais d'allure générale proche des propagations en tube lisse effectués auparavant : pas de réelle accélération, effet tulipe induit par les pertes thermiques donnant lieu à une propagation en apparence pulsée.

En effet, dans le cas de tube lisse avec des vitesses de propagation assez faibles, les pertes thermiques sont responsables de refroidissement et de contre effet piston. Ceci est particulièrement connu sous le nom d'effet tulipe : une ré-aspiration au bout d'un certain temps donne des vitesses négatives ou nulles. Le front de flamme forme alors temporairement une parabole inverse de celui d'une flamme en propagation normale.



**Figure 67 : Profil de propagation d'une flamme dans ENACCEF en présence d'un fort gradient de concentration (18 % H<sub>2</sub> tube – 8 % H<sub>2</sub> dôme). Tube lisse.**

Ce fort gradient nous a permis d'autre part de réaliser une étude de l'évolution temporelle de la concentration en hydrogène. L'hydrogène possède en effet une forte diffusivité et une faible masse. Ceci a pour effet respectivement d'homogénéiser rapidement les concentrations et donc de neutraliser le gradient établi, et d'autre part d'enrichir par décantation la partie supérieure de l'installation, allant à l'encontre du gradient présentement étudié.



**Figure 68 : Evolution temporelle du gradient de concentration en hydrogène, à 1,527 m du point d'allumage, après rupture de la membrane et pour un fort gradient de concentration (18 % H<sub>2</sub> tube – 8 % H<sub>2</sub> dôme).**

Pour cela un gradient est constitué et la concentration en hydrogène analysée périodiquement en un point donné (1,527 m de l'électrode dans notre cas) jusqu'à six heures après la rupture de la membrane (Figure 68).

Le profil temporel de diffusion est conforme aux attentes et valide les hypothèses du protocole opératoire : lorsque l'on travaille sur de plus faibles gradients de concentration, le faible délai (environ une minute) entre l'opération de prélèvement pour analyse et l'allumage du mélange combustible induit une très faible modification du profil de concentration étudié.

## 6 Critère d'accélération de flamme

L'ensemble des données expérimentales obtenues sur l'installation ENACCEF permet également la recherche d'un critère d'accélération de flamme. Dans le domaine de la sûreté d'installation et de la modélisation informatique associée, il est en effet nécessaire de savoir si un scénario donné nécessite une simulation. Afin donc de réduire les coûts d'expertise induits par les simulations, un critère d'accélération a pour but de déterminer *a priori* si la flamme atteindra ou non un régime de propagation accéléré. Ce critère doit être établi sur la base des conditions initiales : pression, température, composition, géométrie et les grandeurs physiques et thermodynamiques qui en découlent.

Ainsi une déflagration est communément reconnue comme accélérée et potentiellement destructrice (les montées en pression ne sont plus négligeables) quand la vitesse spatiale dépasse la moitié de la vitesse du son dans les gaz brûlés.

Ce critère d'accélération est établi pour une géométrie *a priori* susceptible d'accélérer la flamme. Dans le cas d'ENACCEF c'est ainsi la configuration du tube muni de neuf obstacles de taux de blocage de 0,63 qui est retenue comme potentiellement la plus accélératrice.

### 6.1 Classification des flammes

La classification usuelle des flammes consiste à comparer leur vitesse de propagation à celle du son dans les gaz brûlés. Ainsi, plusieurs types de flammes ont pu être observés au cours de ces travaux. Elles sont classées selon la vitesse maximale mesurée à la sortie du champ d'obstacles d'après les signaux délivrés par les photomultiplicateurs. On distinguera la vitesse maximale de propagation et celle mesurée en sortie des obstacles à 2,2 m du point d'inflammation. Ainsi, une flamme dont la vitesse maximale rapportée à celle du son dans les gaz brûlés :

- ✓ est supérieure à 0,5 est dite '*flamme rapide*',
- ✓ est inférieure à 0,5 est dite '*flamme lente*',
- ✓ tandis qu'une flamme dont la propagation est stoppée est dite '*flamme coincée*'.

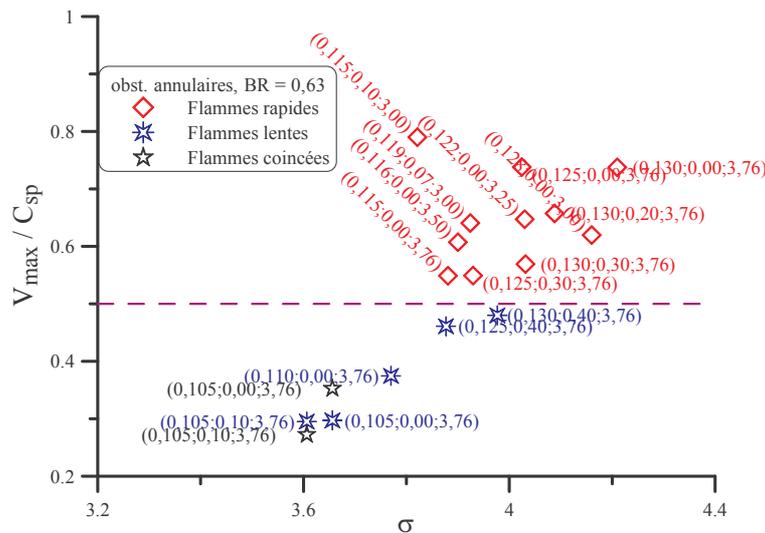
Les paramètres physico-chimiques des mélanges étudiés sont précisés dans le Tableau 10.

x	y	z	$\phi$	$\sigma$	$C_{sr}$	$C_{sp}$	$\gamma$	Le	$\beta$	$\beta(Le-1)$	$T_f$	$Si^\circ$	$Ma_b$
0,13	0	3,76	0,36	4,21	367	725	1,40	0,36	10,64	-6,84	1614	0,20	-1,23
0,13	0,20	3,76	0,46	4,09	367	712	1,40	0,39	10,17	-6,22	1551	0,18	-1,17
0,13	0,30	3,76	0,54	4,03	368	707	1,39	0,40	9,74	-5,82	1522	0,13	-1,39

0,13	0,40	3,76	0,66	3,98	368	701	1,39	0,42	9,10	-5,31	1494	0,13	-1,28
0,115	0,00	3,76	0,31	3,88	364	693	1,40	0,35	11,77	-7,66	1476	0,11	-1,00
0,11	0,00	3,76	0,29	3,77	363	682	1,40	0,35	12,19	-7,96	1430	0,12	-1,31
0,105	0,00	3,76	0,28	3,66	362	671	1,40	0,34	12,62	-8,28	1383	0,09	-1,10
0,105	0,10	3,76	0,31	3,61	362	665	1,40	0,36	12,49	-7,99	1356	-	-
0,116	0,00	3,50	0,30	3,90	364	694	1,40	0,35	11,83	-7,70	1485	0,13	-1,12
0,122	0,00	3,25	0,29	4,03	365	707	1,40	0,35	11,52	-7,46	1539	0,17	-1,21
0,128	0,00	3,00	0,29	4,16	365	718	1,40	0,36	11,23	-7,23	1593	0,18	-1,39
0,119	0,07	3,00	0,29	3,92	364	695	1,40	0,36	11,82	-7,54	1490	0,14	-1,15
0,115	0,10	3,00	0,29	3,82	363	685	1,40	0,37	12,10	-7,68	1445	0,13	-1,06

**Tableau 10 : Paramètres des mélanges étudiés ( $\phi$  : rapport d'équivalence,  $\sigma$  : rapport d'expansion,  $C_{sr}$  et  $C_{sp}$  : vitesse ( $m.s^{-1}$ ) du son respectivement dans les gaz frais et gaz brûlés,  $\beta$  : nombre de Zeldovich,  $T_f$  : température (K) adiabatique de flamme,  $S_f^\circ$  : vitesse fondamentale de flamme ( $m.s^{-1}$ )),  $Ma_b$  : nombre de Markstein des gaz brûlés. Les mélanges sont composés de  $x H_2 + y (0,6 CO_2 + 0,4 He) + (1-x-y)(1/(1+z) O_2 + z/(1+z) N_2)$**

Les expériences réalisées permettent de classer les flammes dans ces trois catégories : accélérées, lentes et coincées (Figure 69). Ainsi sont mentionnés sur les figures suivantes les compositions sous le format (fraction molaire d'hydrogène ; fraction en diluant ; rapport concentration  $N_2 / O_2$ ).



**Figure 69 : Critère d'accélération de flamme : rapport de vitesse maximale de flamme sur la vitesse du son dans les gaz frais en fonction du taux d'expansion thermique. ENACCEF est muni de 9 obstacles annulaires de taux de blocage de 0,63. Les compositions rapportées mentionnent la teneur en hydrogène, en diluant "pseudo-vapeur d'eau", et le rapport  $N_2/O_2$ .**

## 6.2 Critère basé sur le coefficient d'expansion des gaz brûlés

Comme il a pu être rapporté par diverses publications [47], [108], [109], il apparaît bien sur la Figure 69 que la valeur du taux d'expansion thermique ( $\sigma$ ) est un critère favorisant l'accélération de la flamme mais non suffisant pour prédire *a priori* le comportement de la flamme.

## 6.2.1 Effet de la composition initiale

D'autres critères d'accélération de flamme ont pu être proposés par différents auteurs [47, 109, 108]. Ces derniers prennent en référence divers paramètres, comme le rapport de la dimension caractéristique de passage des obstacles divisé par l'épaisseur de flamme, le nombre de Markstein ou encore la susceptibilité à l'étirement. Les premiers ont été mis en défaut au cours de la série d'expérience. Toutefois le dernier a donné de bons résultats. Il exprime un taux d'expansion critique ( $\sigma^*$ ) en fonction du paramètre  $\beta(\text{Le}-1)$ . La répartition entre les flammes lentes et les flammes accélérées a pu ainsi être affinée au cours de ces travaux et rapportés sur la Figure 70 lorsque le nombre de Zeldovich est calculé à partir de l'énergie d'activation déterminée selon l'équation [11], page 71. L'équation [14] donne la relation entre  $\sigma^*$  et  $\beta(\text{Le}-1)$  selon

$$\sigma^* = 0,075 \beta(\text{Le}-1) + 4,38 \quad \text{Eq. [14]}$$

Si le mélange initial possède un taux d'expansion supérieur à cette valeur limite, alors la flamme atteindra lors de sa propagation une vitesse maximale supérieure à la moitié de celle du son dans les gaz frais.

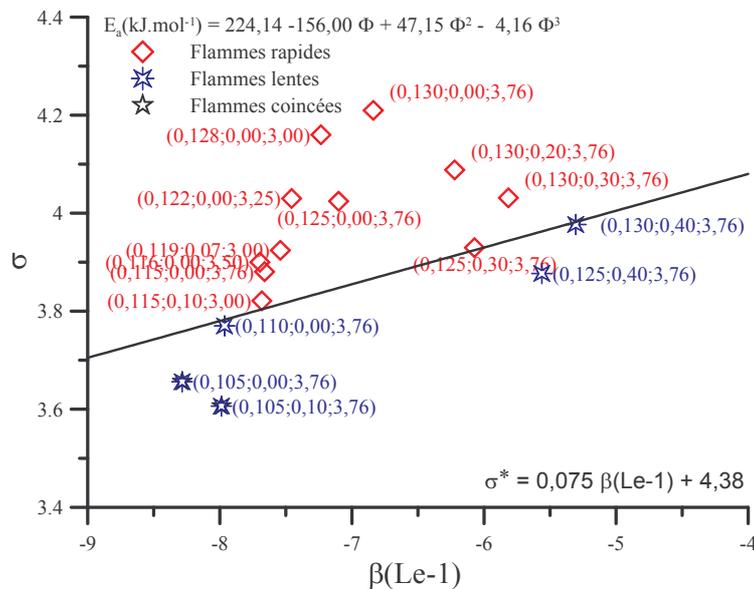


Figure 70 : Critère d'accélération de flamme : taux d'expansion thermique en fonction du paramètre de stabilité de flamme  $\beta(\text{Le}-1)$ . ENACCEF est muni de 9 obstacles annulaires de taux de blocage de 0,63. Les compositions rapportées mentionnent la teneur en hydrogène, en diluant "pseudo-vapeur d'eau", et le rapport  $\text{N}_2/\text{O}_2$ .

Dorofeev et coll. [47] ont proposé une relation entre  $\sigma^*$  et la température d'activation du mélange normalisée par la température initiale,  $x = \theta_a/T_i$ , selon l'équation [15] :

$$\sigma^* = 0,910^{-5} x^3 - 0,0019x^2 + 0,1807x + 0,2314 \quad \text{Eq. [15]}$$

La température d'activation,  $\theta_a$ , dépend du rapport d'équivalence des mélanges selon l'équation [16] :

$$\theta_a(K) = 7,73.10^3 - 4,06.10^2.\phi + 896.10^1.\phi^2 - 4,32.10^{-1}.\phi^4 \quad \text{Eq. [16]}$$

Les valeurs calculées par l'équation [16] sont proches de 7 600 K alors que celles obtenues à partir de l'équation [11] sont proches de 21 650 K. Les valeurs de  $\sigma^*$  calculées selon l'équations [14] sont rapportées dans le Tableau 11. Elles sont comparées aux valeurs données par Dorofeev et coll. [47]. Notons que les valeurs obtenues à partir de l'équation [12] sont proches de celles recommandées par Dorofeev et coll. [47].

H <sub>2</sub> (%)	$\phi$	$\sigma$	T <sub>f</sub> (K)	Ma <sub>b</sub>	$\beta(\text{Le}-1)$	$\sigma^*(\text{Ma}_b)$	$\sigma^*(\beta(\text{Le}-1))$	$\sigma^*(x)$
13,0	0,36	4,21	1614	-1,229	-6,84	3,99	3,88	3,751
11,5	0,31	3,88	1476	-1,002	-7,66	3,74	3,81	3,756
10,5	0,28	3,66	1383	-1,097	-8,28	3,87	3,75	3,761

**Tableau 11 : Valeurs du  $\sigma^*$  pour différentes compositions des mélanges H<sub>2</sub>-air à température ambiante.  $\phi$  est le rapport d'équivalence,  $\sigma$ , le rapport d'expansion, T<sub>f</sub>, la température adiabatique de flamme, Ma<sub>b</sub>, le nombre de Markstein dans les gaz brûlés,  $\beta$ , le nombre de Zeldovich, Le, le nombre de Lewis,  $\sigma^*(\beta(\text{Le}-1))$  et  $\sigma^*(x)$  les valeurs de  $\sigma^*$  calculées à partir des équations [14] et [15], respectivement.**

## 6.2.2 Effet de l'encombrement de l'enceinte

Les effets de la configuration des obstacles répétés sur les vitesses de propagation de la flamme ont été présentés en détail dans les paragraphes 2 et 3 de ce chapitre. Ces essais permettent d'établir une cartographie des flammes en fonction d'une part du rapport d'expansion et d'autre part d'une dimension caractéristique des obstacles,  $l$ .

Précisons que cette dimension n'est pas l'échelle intégrale de turbulence, puisque cette dernière dépend non seulement de la géométrie de l'obstacle mais aussi de la distance par rapport à cet obstacle. La dimension caractéristique est définie avec :

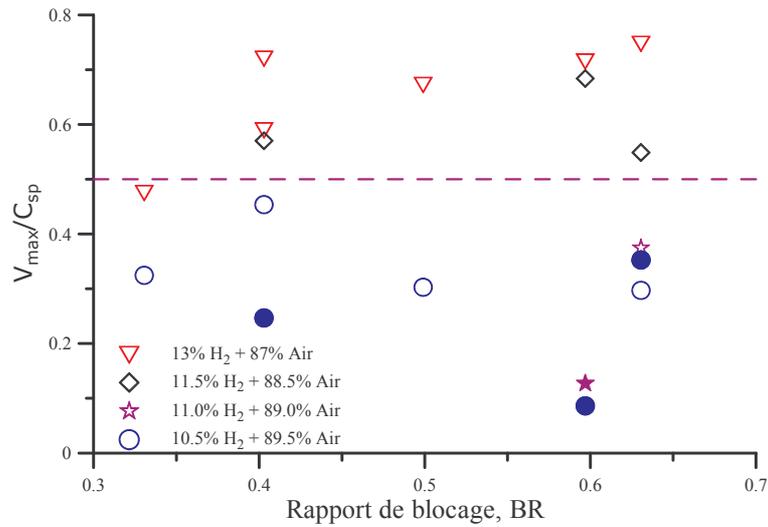
- ✓ les obstacles annulaires, par :  $l = (D-d)/2$ , où D est le diamètre interne du tube (D=154 mm), d est le diamètre intérieur de l'anneau,
- ✓ les grilles, par :  $l = M$  où M est la maille des grilles.

Les différentes valeurs de la dimension caractéristique sont reportées dans le Tableau 12 pour les différents obstacles.

Forme	anneau	anneau	anneau	anneau	grille
Rapport de blocage	0,33	0,40	0,50	0,63	0,60
$l(\text{mm})$	14	17,5	22,5	30,2	15

**Tableau 12 : Dimension caractéristique,  $l$ , des obstacles en fonction de leur forme et de leur rapport de blocage.**

Pour quatre compositions de mélanges, la forme et le rapport de blocage des obstacles répétés placés dans l'enceinte permettent d'accélérer plus ou moins fortement la propagation de la flamme comme le montre la Figure 71. En présence des mélanges les plus pauvres en hydrogène, respectivement 10,5 et 11,0 % en volume dans le mélange, nous n'avons pas observé de flammes rapides. Avec 11,5 % d'hydrogène dans le mélange, la propagation de la flamme n'a été mesurée qu'en présence d'obstacles de rapport de blocage supérieur à 0,40. Avec les mélanges contenant 13 % H<sub>2</sub>, la flamme ne se propage lentement qu'avec les obstacles de rapport de blocage égal à 0,30 et en l'absence d'obstacle.



**Figure 71 : Vitesse maximale de propagation des flammes (en sortie du champ d'obstacles équidistants) normalisée par la vitesse du son dans les gaz brûlés en fonction du rapport de blocage des obstacles. Les symboles pleins représentent les cas de flammes coïncées.**

Nous avons reporté en Figure 72 les différents types de flamme selon leur rapport d'expansion en fonction de la dimension caractéristique des obstacles,  $\ell/\delta$ . La présence du simili-GV (BR = 0,435), alors que l'enceinte est encombrée de neuf obstacles annulaires de rapport de blocage égal à 0,40, engendre une accélération de la propagation de la flamme dans un milieu contenant 13 % H<sub>2</sub> + 87 % air, son extinction dans deux cas sur cinq dans un mélange contenant 11,5 % d'hydrogène dans l'air et son extinction systématique de celle-ci dans un milieu contenant 10,5 % H<sub>2</sub> + 89,5 % air. Les essais n'ont pas été reportés sur la Figure 72 car il reste à définir une dimension caractéristique à la configuration combinant les obstacles annulaires (BR = 0,40) et le simili-GV. Lorsque le rapport  $\ell/\delta$  est supérieur à 43, nous n'avons pas observé de flammes lentes. Lorsque le rapport d'expansion est inférieur à 3,8, nous n'avons pas observé de flammes rapides. Mais pour un rapport  $\ell/\delta$  inférieur à 43 et un rapport d'expansion supérieur à 3,8, il est difficile d'établir une relation entre  $\sigma^*$  et cette dimension caractéristique des obstacles.

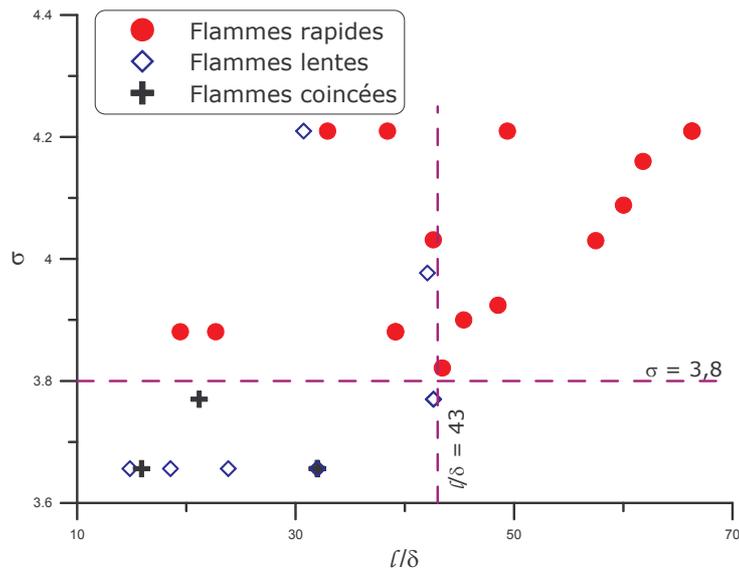


Figure 72 : Caractérisation des flammes H<sub>2</sub>-air se propageant dans l'enceinte ENACCEF encombrée de 9 obstacles équidistants de 154 mm, selon  $\sigma$  et  $l/\delta$ .

## 7 Conclusion

Les objectifs de cette étude ont été atteints en grande partie. L'étude des formes d'obstacles a mis en évidence un comportement différent de la flamme en fonction de l'échelle caractéristique de la turbulence. La vitesse maximale atteinte est similaire mais les profils de vitesse de flamme sont différents. Les historiques sont alors plus ou moins destructeurs pour l'enceinte. L'influence de la composition a montré une dépendance forte entre l'accélération et le taux d'expansion thermique. La présence de pseudo vapeur d'eau réduit les vitesses maximales de flamme en apportant une inertie thermique diminuant le taux d'expansion. L'établissement du gradient de concentration était initialement un point très incertain et a montré sa faisabilité mais doit faire l'objet d'amélioration afin de créer des gradients jusqu'au point d'inflammation comme prévu initialement. L'évaluation de critères d'accélération de flammes a été affinée vis-à-vis des travaux disponibles dans la littérature. Dans une configuration particulière d'encombrement (obstacles annulaires de rapport de blocage égal à 0,63) une relation simple du critère  $\sigma^*$  en fonction du paramètre  $\beta(Le-1)$  a pu être établie, tandis que les autres critères d'accélération proposés dans la littérature mis en défaut. Ce critère permet de caractériser la capacité d'un mélange à donner naissance à une flamme fortement accélérée si les conditions géométriques sont favorables à cette accélération.

## **CHAPITRE V**

**SIMULATION NUMERIQUE DE LA**

**PROPAGATION DE LA FLAMME**

L'étude expérimentale exposée dans les chapitres précédents a pour objectif l'amélioration de la connaissance des mécanismes de propagation de flamme de prémélange d'hydrogène dans une atmosphère humide.

Dans ce chapitre, on se propose d'utiliser les résultats de l'étude expérimentale pour valider et améliorer le code de calcul TONUS développé en collaboration par l'IRSN et le CEA.

Avant de présenter les résultats de l'étude numérique, une introduction des modèles utilisés dans le code est effectuée dans le paragraphe 1. Le paragraphe 2 est dédié à la simulation de flamme laminaire sur la base des essais réalisés sur la bombe sphérique. Le paragraphe 3 est consacré à l'étude numérique des essais réalisés dans l'enceinte ENACCEF.

## 1 Description du code TONUS

Le code de calcul développé par l'IRSN pour les aspects modélisation de la physique d'accidents graves dans les enceintes de réacteur nucléaire est baptisé TONUS. Il permet la modélisation de plusieurs phénomènes intervenant lors d'accidents graves dans une centrale nucléaire, la combustion de prémélange d'hydrogène étant l'un d'entre eux.

La modélisation de la combustion en prémélange dans une enceinte est basée sur le code CREBCOM développé par Efimenko et Dorofeev [110]. Le code fait abstraction de la cinétique chimique au sein de la flamme et complète la mécanique des fluides modélisée par les autres fonctions de CASTEM.

### 1.1 Mécanique des fluides

Pour décrire l'écoulement, la modélisation peut s'appuyer sur le système des équations de Navier-Stokes ou celles d'Euler (bilans de masse, quantité de mouvement et énergie). Les équations d'Euler sont utilisées dans le cadre de ces calculs. Elles sont une simplification des équations de Navier-Stokes, dans la mesure où elles négligent les phénomènes de conduction thermique et de viscosité au sein des gaz.

Pour prendre en compte l'aspect réactif de l'écoulement, ce système d'équations est couplé aux équations de conservation des espèces chimiques dans le mélange. Dans le cas où la chimie serait décrite par une réaction unique et globale, le système des équations de conservation peut s'écrire sous la forme :

conservation de masse

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \vec{w} = 0 \quad \text{Eq. 17}$$

conservation de quantité de mouvement

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho \vec{w} + \nabla \cdot (\rho \vec{w} \otimes \vec{w} + P) = 0 \quad \text{Eq. 18}$$

conservation d'énergie

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho \cdot e_i + \nabla \cdot (\rho \vec{w} h_i) = (h_i^0 - h_f^0) \rho \left( \frac{d\xi}{dt} \right)_{crebcom} - H(T - T_i) \quad \text{Eq. 19}$$

bilan de réaction chimique

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho \xi + \nabla \cdot (\rho \vec{w} \xi) = \rho \left( \frac{d\xi}{dt} \right)_{crebcom} \quad \text{Eq. 20}$$

- $w$  est la vitesse dans les gaz,
- $e_t$  et  $h_t$  sont l'énergie et l'enthalpie spécifique,
- $h_i^o$  et  $h_f^o$  sont les enthalpies de formation à 0 K pour les mélanges de gaz frais et brûlés,
- $T_i$  est la température initiale du mélange des gaz frais,
- $H$  est un coefficient de dissipation d'énergie (en  $W.m^{-3}.K^{-1}$ ) artificiel.

Les équations d'Euler sont modifiées afin de tenir compte d'un puits énergétique relatif à une perte thermique. Sans réalité physique intrinsèque, ce puits permet toutefois une représentation du refroidissement des gaz brûlés à moindre coût de calcul. Les variables thermodynamiques sont calculées en fonction de la température du mélange gazeux. Les équations d'Euler sont complétées par la loi des gaz parfaits  $P = \rho \frac{R}{M} T$  et par le modèle de combustion CREBCOM afin de fermer le système d'équations. En présence de la réaction de combustion et dans le référentiel des variables de TONUS, la loi est exprimée :

$$P = \rho T \left[ (1 - \xi) \left( \sum_j Y_{j,i} \frac{R}{M_j} \right) + \xi \left( \sum_j Y_{j,f} \frac{R}{M_j} \right) \right] \quad \text{Eq. 21}$$

où  $P$  est la pression (Pa),  $T$  la température (K),  $M$  la masse molaire (kg/mol).

Il convient également d'ajouter l'énergie interne :

$$e = \int_0^T \left\{ (1 - \xi) \left( \sum_j Y_{j,i} C_{v,j}(\alpha) \right) + \xi \left( \sum_j Y_{j,f} C_{v,j}(\alpha) \right) \right\} d\alpha \quad \text{Eq. 22}$$

où  $C_{v,j}$  est la capacité calorifique de l'espèce  $j$ , à volume constant.

La résolution des équations relatives à la mécanique des fluides est effectuée en volume fini selon un algorithme explicite.

## 1.2 Modèle de combustion : CREBCOM

Le modèle de combustion CREBCOM est développé par l'Institut Kurchatov [34] pour la simulation des déflagrations lentes et rapides dues à la combustion de l'hydrogène. Le modèle CREBCOM s'appuie sur une approche type "lagrangienne" qui permet de suivre le front de la flamme et de traiter la combustion uniquement au voisinage de ce front. L'expression du taux de réaction chimique (ou de la vitesse de combustion) à l'intérieur de la zone réactionnelle est évaluée à l'aide de la vitesse visible de la flamme. Cette vitesse est donnée par des corrélations issues des mesures expérimentales.

L'approche de CREBCOM est de type "propagation d'un incendie". La transmission de la combustion d'une maille à une autre est fonction de :

- l'état d'avancement de la combustion (et des valeurs initiale et finale associées),
- le seuil d'inflammation  $\varepsilon$ ,
- la vitesse numérique de combustion  $K_0$ .

### 1.3 État d'avancement de la combustion

L'état d'avancement de la combustion est défini par la variable :

$$\xi = \frac{Y_{H_2} - Y_{H_2,i}}{Y_{H_2,f} - Y_{H_2,i}}. \quad \text{Eq. 23}$$

$Y_{H_2}$  est la fraction massique d'hydrogène et les indices i et f se réfèrent aux états initial et final.  $\xi$  est sans dimension, compris entre 0 (gaz réactifs) et 1 (gaz entièrement brûlés). La valeur de  $Y_{H_2}$  (et donc celle de  $\xi$ ) dans chaque maille est modifiée lors de la boucle de calcul en fonction de la vitesse de combustion, du pas de temps physique et de la mécanique des fluides. Afin de tenir compte du rendement de la réaction, il est possible d'arrêter la combustion une fois la valeur de  $\xi_{\max}$  atteinte.

### 1.4 Seuil d'inflammation $\varepsilon$

Dans le modèle CREBCOM, la propagation du front de flamme repose sur un critère « géométrique » qui conditionne le choix des mailles susceptibles de s'enflammer. Les codes type "propagation d'incendie" utilisent un seuil d'inflammation. Celui-ci appelé paramètre  $\varepsilon$  dans TONUS.

Lors de la procédure de calcul, un test détermine si la combustion a lieu dans chaque maille. Pour cela la valeur de  $\varepsilon$  est comparée avec la valeur du taux d'avancement de la cellule et des cellules voisines selon la relation :

$$\varepsilon^2 < \xi_{l+1,m,n}^2 + \xi_{l-1,m,n}^2 + \xi_{l,m+1,n}^2 + \xi_{l,m-1,n}^2 + \xi_{l,m,n+1}^2 + \xi_{l,m,n-1}^2 - 3\xi_{l,m,n}^2 \quad \text{Eq. 24}$$

Ce critère contrôle indirectement l'épaisseur de la flamme en utilisant un paramètre qui représente la quantité imbrûlée de combustible.  $\varepsilon$  étant sans dimension, il ne correspond pas directement à une énergie ou température d'activation. Dans le cas d'une propagation monodimensionnelle, il est possible de fixer le seuil d'avancement nécessaire à l'allumage de la maille suivante et donc indirectement une température d'activation. Toutefois l'utilisation de maillages 2D ou 3D implique un début de combustion avec plusieurs températures seuil selon que la cellule est en contact avec une ou plusieurs cellules en cours de combustion.

### 1.5 Taux numérique de combustion $K_0$

Le taux numérique de combustion  $K_0$  détermine la modification du taux d'avancement pendant un pas de temps donné :

$$\left( \frac{d\xi}{dt} \right)_{crebcom} = q = \frac{K_0}{DM} \cdot (\text{critère combustion}) \quad \text{Eq. 25}$$

Le critère de combustion étant égal à 1 si la combustion est permise par le test sur  $\varepsilon$ , et 0 dans le cas contraire. DM est la dimension caractéristique de la maille considérée.

L'utilisation d'une combustion selon une cinétique d'ordre zéro implique la prise en compte des phénomènes physiques dans la valeur de  $K_0$ . Le taux numérique de combustion

doit notamment être adapté aux conditions chimiques (concentrations locales avant combustion), physiques (température, pression initiales, champ de vitesse).

Diverses corrélations ont été établies pour l'estimation du taux numérique de combustion lors d'une propagation turbulente. Celles-ci sont présentées dans l'introduction des calculs sur le modèle d'ENACCEF, au paragraphe 3.2.

Dans une seconde version de CREBCOM, l'Institut Kurchatov a proposé un couplage avec le champ de vitesse en fonction du rotationnel de vitesse dans les gaz frais. La fonction tiendrait compte à la fois de la capacité de la turbulence à accélérer mais aussi à ralentir la propagation de la flamme. En effet, une turbulence modérée augmente par plissement la surface du front de flamme et par conséquent sa vitesse de propagation. Mais de fortes intensités de turbulence induisent des extinctions locales via une dispersion énergétique trop rapide (dilution thermique), ce qui ralentit fortement le taux de combustion global et donc la vitesse de propagation. Le maximum de cette fonction de couplage dépendrait également de la vitesse fondamentale de combustion et donc de la composition et de la pression et de la température initiales.

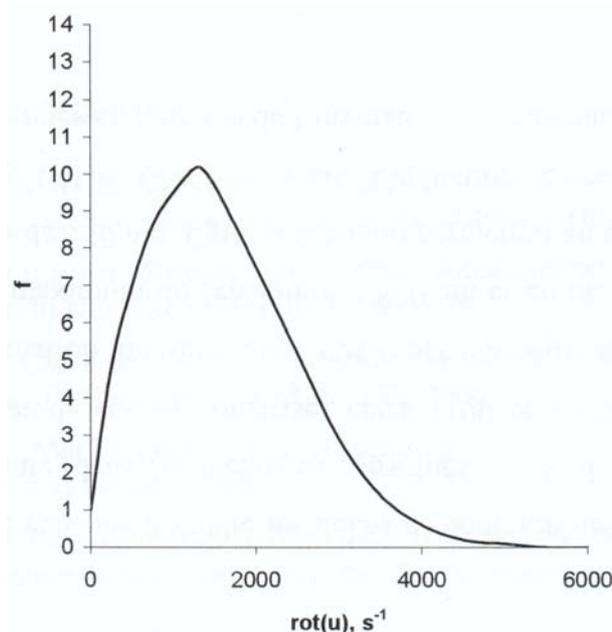


Figure 73 : Exemple d'une fonction de couplage entre la vitesse numérique de combustion et la turbulence représentée par le rotationnel de la vitesse des gaz frais :  $K_0 = f(\text{rot}(u)) * K_{0\text{laminaire}}$

## 1.6 Isotropie de maillage

Les maillages utilisés pendant cette thèse sont tous en trois dimensions à partir d'éléments cubiques. Il est en effet nécessaire de respecter l'isotropie du maillage de manière à conserver la forme de la flamme.

Le modèle de propagation de flamme CREBCOM ne tient pas compte des surfaces de contact entre éléments, ni du volume de chaque maille. La définition de  $K_0$  ( $q = K_0 / DM$ ) et le modèle très simple de transmission de la flamme sont en effet indépendants de la géométrie du maillage et donc des volumes et des surfaces de contact. La combustion ne peut pas par conséquent être traitée comme un flux mais reste adaptée à un maillage isotrope.

Un maillage non strictement homogène peut par conséquent accélérer la combustion dans une direction déterminée, en jouant sur deux paramètres :

- le volume des éléments, qui a un rôle sur le taux de combustion global. La mécanique des fluides se trouvera alors modifiée avec des conséquences sur l'effet piston. L'interaction entre la flamme et la structure ne sera alors plus fidèle aux attentes.
- L'étirement préférentiel du maillage selon une direction (par exemple en utilisant des parallélépipèdes non cubiques), qui va accélérer fortement la flamme dans la direction de plus grande dimension plutôt que dans les autres directions, proportionnellement aux distances impliquées.

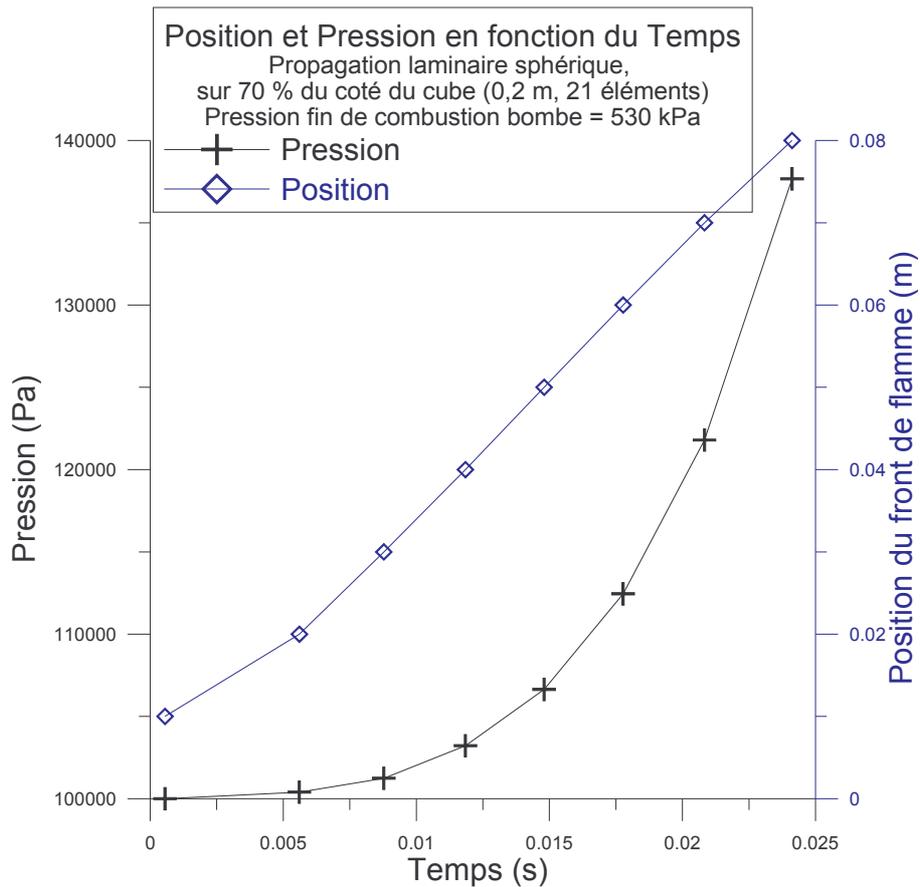
## **2 Modélisation de la Bombe Sphérique - Comparaison expérience/calcul.**

Les corrélations utilisées dans le modèle CREBCOM pour évaluer le paramètre  $K_0$  sont valides uniquement pour les cas de flammes turbulentes. Dans le présent paragraphe, on propose une extension de l'évaluation de  $K_0$  pour les flammes laminaires sur la base des essais réalisés en bombe sphérique.

### **2.1 Maillage, suivi de la position de flamme**

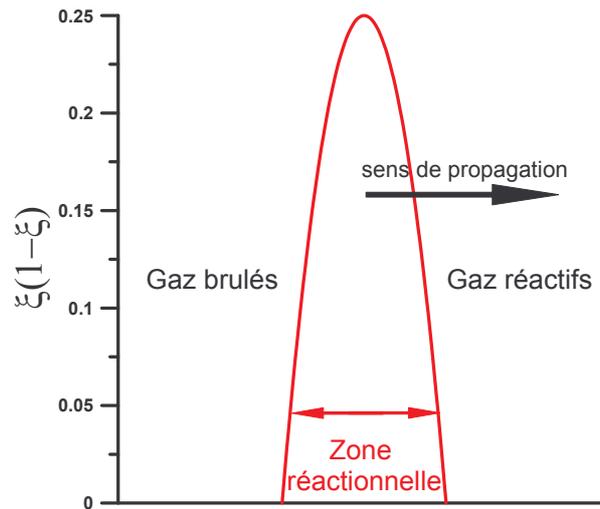
La bombe sphérique est modélisée avec le code TONUS par un cube englobant la sphère de l'enceinte expérimentale. Le maillage est à symétrie centrale, ce qui implique un découpage impair des côtés. Tout comme dans l'étude expérimentale, l'enregistrement porte uniquement sur les premiers instants de la propagation. Celle-ci peut alors être estimée sphérique et indépendante de la montée en pression.

La sphéricité a été vérifiée sur l'enregistrement de coupe du champ d'avancement de réaction : l'influence des parois est bien éliminée par la distance vis-à-vis de celle-ci et la faible vitesse de combustion comparativement à la vitesse du son dans les gaz frais. La pression a une influence mineure sur la plage de mesure retenue : un enregistrement de la position de flamme sur 70 % du côté du cube induit une surpression inférieure à 10 % de la pression de combustion adiabatique isochore obtenue en fin de combustion (Figure 74).



**Figure 74 : Modélisation TONUS bombe sphérique - Evolution de la position du front de flamme et de la pression dans l'enceinte au cours du temps, pendant les premiers instants de propagation.**

L'allumage (méthode exposée en 2.2) est initié au centre de la bombe et le suivi de la position est effectué sur une demi-droite partant du centre, via un traceur basé sur la valeur du taux d'avancement de la combustion. L'épaisseur de flamme est ici d'environ 3 mailles. A chaque pas de calcul, la position de la flamme est estimée égale au centre de la maille présentant le taux d'avancement le plus proche de  $\xi = 0,5$  (mi-réaction). La méthode numérique retenue est la détection du maximum du champ défini par  $[\xi(1-\xi)]$  : les valeurs sont égales à 0 dans les gaz frais et brûlés, et à 0,25 à mi-réaction (Figure 75).



**Figure 75 : Estimation du front de flamme basé sur  $\xi$**

Cette valeur de taux d'avancement n'est en pratique pas parfaitement atteinte à cause du découpage temporel. Toutefois, lors des calculs, nous avons pu vérifier la stabilité de la valeur de  $\xi$  déclenchant un changement de la position de la flamme, ce qui limite les fluctuations d'origine numérique.

D'autre part les premiers instants de propagation induisent une phase transitoire : la flamme est initialement concentrée dans une seule maille et n'a pas encore atteint l'épaisseur (environ 3 mailles) qu'elle aura en régime permanent. La courbe (Figure 74) rapportant la position du front de flamme en fonction du temps présente en effet un écart sur le premier point. Une étude de sensibilité a confirmé le choix d'une valeur de détection de position de flamme proche de  $\varepsilon$  afin de minimiser la phase transitoire. Ceci permet d'obtenir plus de points significatifs.

Les équations d'Euler s'adaptent bien à la modélisation des écoulements dont le nombre de Mach est élevé, comme c'est le cas pour les déflagrations rapides et les détonations. En revanche, le traitement des déflagrations lentes, caractérisées par de faibles nombres de Mach, pose des problèmes de stabilité aux schémas numériques classiquement utilisés pour résoudre les équations d'Euler. Aussi afin de préserver des temps de calcul acceptables, le maillage utilisé inclut moins d'éléments que pour modéliser des flammes rapides comme dans ENACCEF. Des optimisations mineures ont été nécessaires sur la version existante du code afin de permettre les calculs pour des vitesses de propagation de l'ordre de celles des flammes laminaires pauvres en hydrogène dans l'air. Le mode d'allumage a notamment été revu afin de permettre une propagation de la flamme.

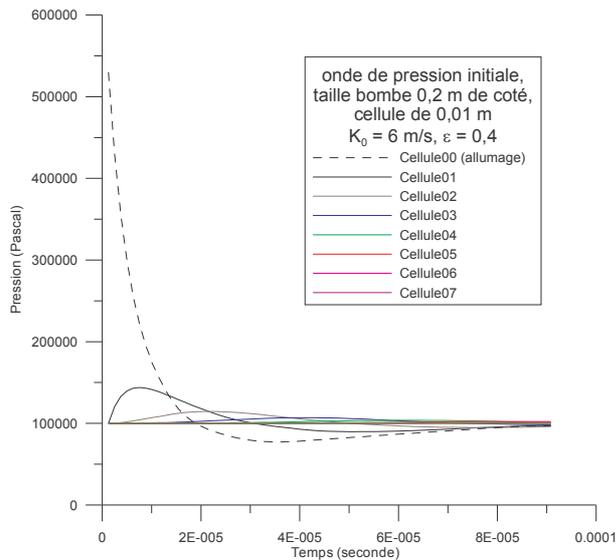
## **2.2 Modification du mode d'allumage**

La méthode utilisée avant ces travaux au sein de TONUS est utilisée par la plupart des codes : pendant une phase préliminaire de calcul, la combustion (isochore adiabatique) est forcée dans une zone isolée du reste du maillage puis le calcul de propagation de flamme dans l'enceinte est effectué à partir de cette simili étincelle.

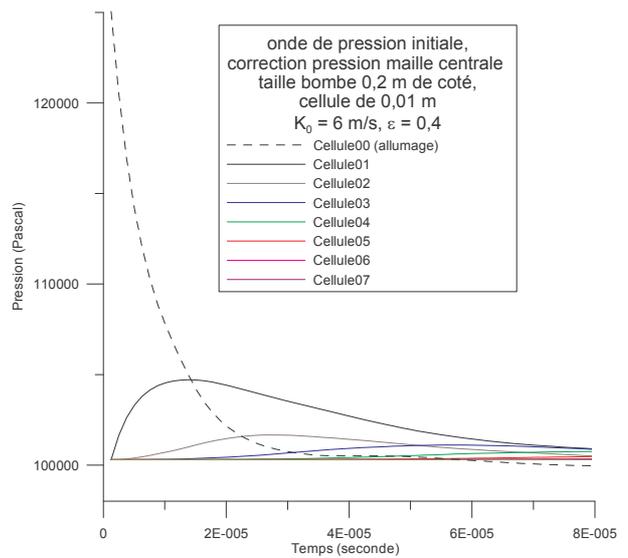
La zone d'allumage se doit d'être la plus ponctuelle possible et par conséquent souvent réduite à une seule maille. Le suivi des traceurs de température et de pression autour du point d'allumage montre que dans le cas d'un allumage classique de ce type on observe, pendant les premiers instants de propagation, une expansion rapide suivie d'une dépression. Cela est dû au fait que la création de l'étincelle implique un système isolé du reste de

l'enceinte : la pression dans la zone d'allumage est ainsi égale à la pression de combustion adiabatique à volume constant ( $P_{AICC}$  : adiabatic isochore combustion pressure). Lors de l'enchaînement sur la phase de propagation, il y a alors création d'une onde de pression (Figure 76). Ceci refroidit les mailles adjacentes à la maille d'allumage, éteignant la flamme. Dans le cas de flamme rapide, la combustion prend suffisamment vite le relais pour éviter l'extinction.

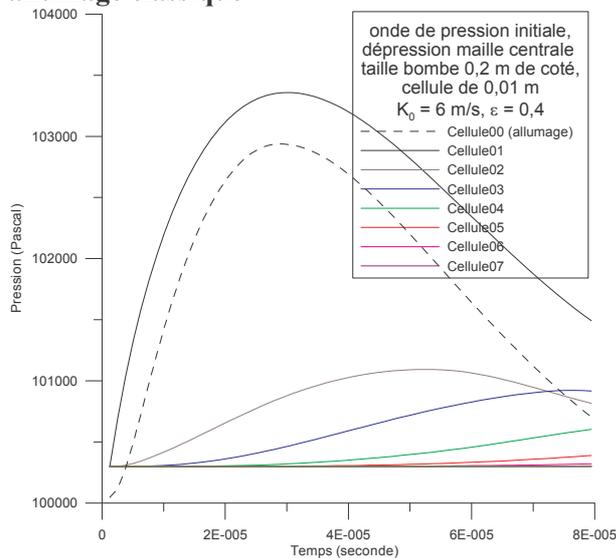
L'une des corrections possible consiste à mettre la zone d'allumage en dépression avant de forcer la combustion, de façon à obtenir au début du calcul de la propagation une pression homogène dans l'enceinte. Ceci a pu être tenté avec succès lors de la simulation de la bombe sphérique. La surpression que l'on constate dans les cellules adjacentes à la cellule d'allumage est cette fois due au démarrage de la combustion (Figure 77). En effet, si l'on surévalue la correction de pression initiale (de manière à créer une dépression lors de la propagation), nous observons quand même des augmentations de pression mais dont l'amplitude est nettement plus faible et le maximum décalé temporellement (Figure 78). Il ne peut alors s'agir que de la propagation de la combustion dans l'espace maillé.



**Figure 76 : Modélisation TONUS bombe sphérique - Capteurs de pression lors d'un allumage classique**

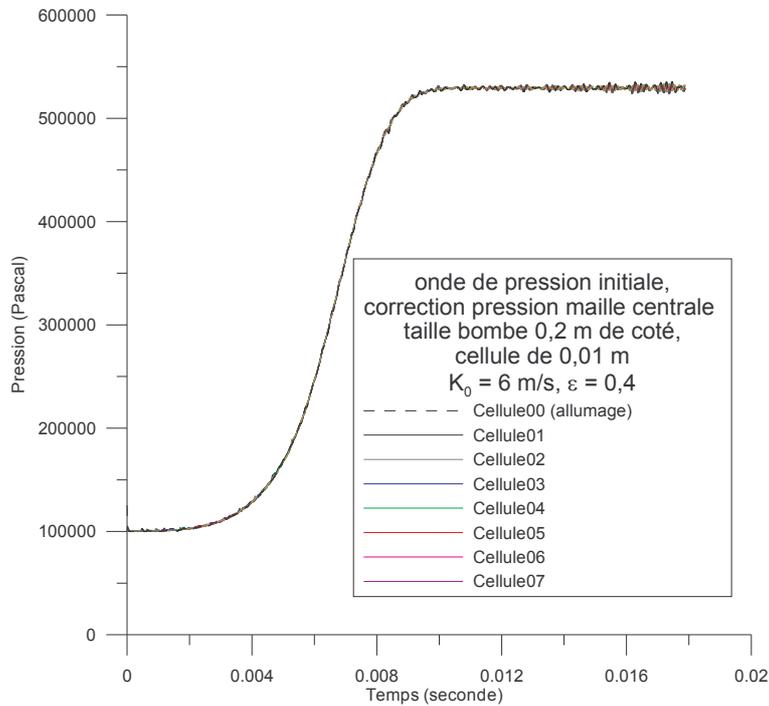


**Figure 77 : Modélisation TONUS bombe sphérique - Capteurs de pression lors d'une propagation sans surpression initiale**



**Figure 78 : Modélisation TONUS bombe sphérique - Capteurs de pression lors d'une propagation avec dépression dans la maille d'allumage.**

Il est à noter que, si le solveur est conçu pour résoudre des propagations de flamme rapides et des détonations, il reste toutefois stable pour la résolution de systèmes pour lesquels il n'a pas été conçu initialement (déflagrations laminaire et lente). Ainsi, les suivis de la pression en divers points du rayon de l'enceinte, sur la totalité de la combustion au sein de la bombe, montre une superposition des courbes (Figure 79). Il y a donc une excellente homogénéité dans l'espace à chaque instant. Ceci est en accord avec le fait que la vitesse de flamme est largement en dessous de la vitesse du son dans les gaz frais.



**Figure 79 : Modélisation TONUS bombe sphérique - Capteurs de pression, homogénéité spatiale pendant toute la simulation**

### 2.3 Détermination de la vitesse numérique de combustion

Le modèle CREBCOM est bâti de façon à reproduire assez simplement la vitesse de propagation d'un front de flamme. En effet, dans le cas d'un maillage infiniment fin, l'épaisseur de flamme est du même ordre de grandeur que celui estimé expérimentalement. Cela permet de retrouver la relation :

$$V_F = \sigma \cdot S_L \quad \text{Eq. 26}$$

Supposons le cas d'un front de flamme parfaitement plan se déplaçant des gaz brûlés vers les gaz frais. Dans le repère lié à la flamme, l'évolution de la fraction volumique d'hydrogène  $\chi_{H_2}$  au cours du temps, après l'instant d'allumage  $t_x$ , est donnée par :

$$\frac{\chi_{H_2}}{\chi_{H_2}^0} = 1 - q \cdot (t - t_x) \quad \text{Eq. 27}$$

$q$  étant le taux de réaction chimique du mélange combustible dans ses conditions initiales (cf 1.31.5).

La transmission à la maille voisine se fait d'après le critère  $\varepsilon$  (et pour une géométrie 1D comme définie auparavant) lorsque le rapport  $\frac{\chi_{H_2}}{\chi_{H_2}^0}$  devient inférieur ou égal à  $(1 - \varepsilon)$ . Si le maillage est infiniment fin, l'allumage se produit lorsque l'égalité suivante est modifiée :

$$1 - \varepsilon = 1 - q \cdot (t - t_x) \quad \text{Eq. 28}$$

soit

$$t_{x+\Delta x} = t_x + \frac{\varepsilon}{q} \quad \text{Eq. 29}$$

La vitesse fondamentale est égale à :  $S_L = \frac{\Delta x}{t_{x+\Delta x} - t_x} = \frac{q}{\varepsilon} \cdot \Delta x$  Eq. 30

Or  $q = \frac{K_0}{\Delta x}$  Eq. 31

ce qui amène  $S_L = \frac{K_0}{\varepsilon}$  Eq. 32

En pratique le maillage n'est pas infiniment fin et nous observons un écart. Les auteurs du modèle CREBCOM ont proposé une correction qui consiste à multiplier par une constante l'épaisseur de flamme.

L'épaisseur de flamme est un paramètre présentant déjà une forte déviation code/expérience. De plus, il a une influence directe sur le taux global de combustion et par conséquent sur les vitesses spatiales via l'effet piston. Il n'y a plus alors égalité entre  $V_F$  et  $\sigma \cdot S_L$ . Augmenter artificiellement encore sa valeur peut conduire à des simulations en désaccord avec l'expérience. Une alternative est de modifier le taux numérique de combustion  $K_0$  en le multipliant par une constante corrective.

Cette constante est alors fonction de la finesse de maillage. En théorie elle permet des calculs sur une autre géométrie, à condition de conserver la finesse de maillage et le même mélange combustible. Toutefois cette constante corrective dépend également de la valeur du coefficient d'expansion thermique, qui varie avec les conditions initiales, notamment celles de composition. Aussi, lors de notre simulation de la bombe sphérique, la nécessité de corriger avec une corrélation plus complète fut mise en évidence.

La méthode adoptée fut la suivante :

- réalisation d'une étude de sensibilité par dichotomie (rapprochements successifs) pour certaines expériences correspondant à des  $x_{H_2}$  mentionnés en gras dans le Tableau 13.

Etude Expérimentale				Etude Numérique		
$x_{H_2}$	Vs (m.s <sup>-1</sup> )	Phi	SI°- Eq-1 (m.s <sup>-1</sup> )	$K_0$ (m.s <sup>-1</sup> )	N° série Calcul	Vs fit linéaire (m.s <sup>-1</sup> )
<b>0,10</b>	<b>0,4664</b>	<b>0,265</b>	<b>0,094</b>	<b>0,197</b>	<b>57</b>	<b>0,477</b>
0,12	1,0588	0,325	0,209	0,4421	58	1,071
0,14	1,8406	0,388	0,341	0,7433	58	1,886
<b>0,16</b>	<b>2,8508</b>	<b>0,454</b>	<b>0,491</b>	<b>1,094</b>	<b>46</b>	<b>2,837</b>
<b>0,18</b>	<b>4,1113</b>	<b>0,523</b>	<b>0,663</b>	<b>1,5436</b>	<b>45</b>	<b>4,094</b>
<b>0,20</b>	<b>5,3173</b>	<b>0,595</b>	<b>0,857</b>	<b>1,9604</b>	<b>47</b>	<b>5,328</b>
0,22	6,9580	0,672	1,078	2,4921	58	6,928
0,24	8,7500	0,752	1,329	3,0653	58	8,693
<b>0,25</b>	<b>9,6870</b>	<b>0,791</b>	<b>1,456</b>	<b>3,3876</b>	<b>48</b>	<b>9,677</b>

Tableau 13 : Valeurs de  $K_0$  reproduisant les profils de vitesse en bombe sphérique, valeurs obtenues par dichotomie (en gras) et vérification d'une corrélation issue de cette étude.

Les valeurs de  $K_0$  ainsi déterminées permettent de reproduire fidèlement les vitesses spatiales expérimentales en bombe sphérique. Ces valeurs obtenues par dichotomie sont mentionnées en gras dans le Tableau 13.

- détermination d'une corrélation pour le domaine  $x_{h2}$  étudié, cette dernière donnant  $K_0$  en fonction de la richesse :

$$K_0 = 3,5064.\Phi^2 + 2,3774.\Phi - 0,6906 \quad \text{Eq. 33}$$

- Pour la corrélation ainsi établie, réalisation de calculs en aveugle. Ces points de validation sont reportés en rouge dans la Figure 80 et dans le Tableau 13 (caractères non gras et rouges).

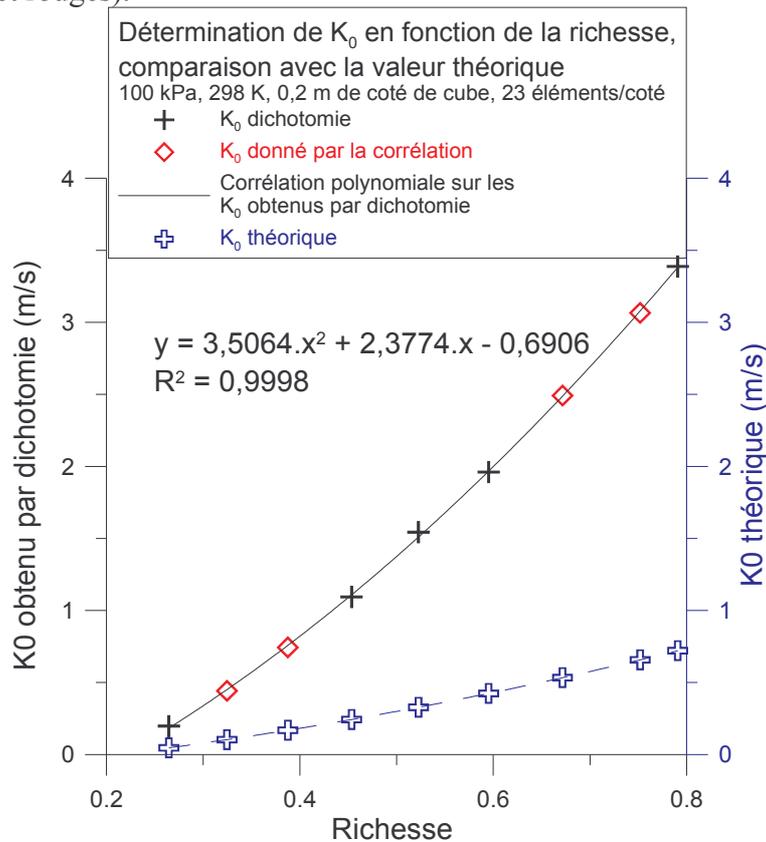


Figure 80 : Modélisation TONUS bombe sphérique – Corrélation entre les  $K_0$  obtenus par dichotomie et la richesse.

Les valeurs de vitesses spatiales obtenues pour ce maillage de la bombe sphérique sont en très bonne adéquation avec les valeurs expérimentales obtenues par la corrélation, comme le montre la Figure 81.

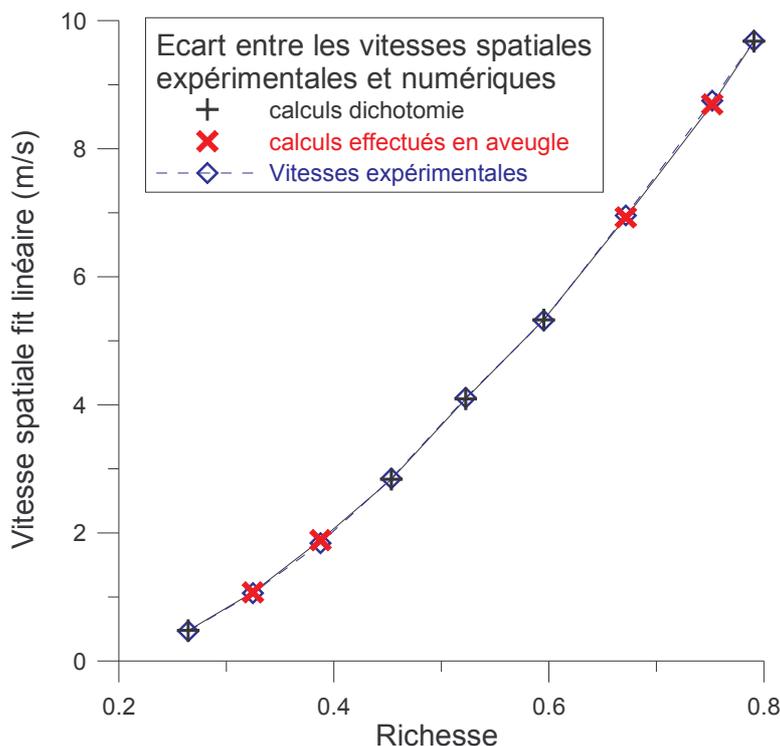


Figure 81 : Modélisation TONUS bombe sphérique – Vitesse spatiale en fonction de la richesse, validation code/expérience de la corrélation établie en 2.3 p. 112.

## 2.4 Conclusion de la simulation de la Bombe Sphérique

A l'aide de la corrélation expérimentale établie en 2.3, il est possible de déterminer une valeur de  $K_0$  pour les flammes laminaires dans les conditions suivantes :

- fraction molaire d'hydrogène comprise entre 0,1 et 0,25 ,
- pression de 100 kPa,
- température de 293 K,
- maillage comprenant 9 261 éléments.

L'extension de la corrélation à d'autres maillages est possible. Cette corrélation serait à réévaluer pour des locaux plus volumineux (cas d'installations nucléaires). Une étude complémentaire de sensibilité faisant varier la taille et le nombre des mailles serait alors nécessaire.

La simulation TONUS des propagations de flammes laminaires est similaire à celle des propagations accélérées car il n'existe pas d'étude expérimentale reliant la vitesse de combustion turbulente aux paramètres de turbulence.

## 3 Modélisation ENACCEF (Tube vertical) - Comparaison expérience/code.

Le but de ces simulations TONUS sur l'installation ENACCEF est de comparer et améliorer l'adéquation entre calculs et expérience pour des propagations accélérées. Pour cela l'influence du taux de blocage des obstacles, de la présence de pertes thermiques ou encore de la finesse du maillage ont été abordés.

### 3.1 Maillage

Le maillage de l'enceinte ENACCEF est élaboré à partir d'éléments cubiques et de manière à respecter parfaitement la symétrie autour de l'axe vertical. Certains détails comme les volumes morts derrière les hublots de visualisation ne sont pas pris en compte. En effet, ils représentent des volumes faibles, et surtout cela compliquerait notablement la modularité du maillage. Ce dernier est établi de manière à permettre un changement aisé de paramètres géométriques (nombre et taux de blocage des obstacles, finesse du maillage) qui sont uniquement nécessaires à la génération du maillage.

L'installation est pour cela découpée en zones, jointes ensuite de manière à former une seule structure :

- Allumage,
- Fond de tube,
- Accélération par obstacles,
- Tube lisse,
- Dôme.

Tout comme pour la bombe sphérique, un système de traceur est mis en place et permet d'enregistrer les valeurs des différents champs sur l'axe vertical de l'installation. La détection de la position du front de flamme se fait toujours à mi-réaction ( $\xi = 0,5$ ). La taille de maille la plus fine permettant une modélisation complète sur la station de calcul fournie par l'IRSN est de 0,0185 m.

Dans certaines simulations, cette limite a pu être dépassée à l'aide d'un maillage plus grossier dans le dôme, mais dans ce cas, en raison de ce maillage anisotrope, le profil de vitesse de la flamme dans le dôme devient inexploitable. Et seule l'évolution de la vitesse dans le tube est alors à prendre en considération.

Si l'on conserve les données géométriques exactes, la discrétisation de l'espace induit une variation du taux de blocage entre l'expérience et la simulation. De ce fait, au sein du modèle, la valeur du rayon interne des anneaux est déterminée par dichotomie afin que le taux de blocage soit le plus proche possible de la valeur expérimentale. Les valeurs du rayon interne sont rapportées dans le Tableau 14.

Dimension des mailles, DM (m)	Taux de blocage Expérimental	Rayon interne obstacles (m)	Taux de blocage numérique
0,02	0,63	0,0548	0,649
	0,40	0,059	0,432
0,0185	0,63	0,0548	0,649
	0,40	0,0508	0,432
0,01	0,63	0,048	0,637
	0,40	0,058	0,433

**Tableau 14 : Grille de paramètres de maillage lors des études de finesse de maillage et taux de blocage.**

Le maillage étant formé, la séquence d'allumage / propagation est identique à celle de la bombe sphérique et a donc bénéficié des améliorations mises en place pour l'étude des flammes laminaires. La valeur de  $\varepsilon$  est maintenue à 0,495 comme dans la modélisation de la bombe sphérique.

### 3.2 Estimation de la turbulence et simulation de propagation

Dans le cas de la propagation turbulente de flammes, le paramètre  $K_0$  peut être estimé via des corrélations expérimentales sur  $S_T$  (Efimenko et Dorofeev, 2001 [47]). Une analyse du modèle pour une géométrie limitée à une dimension donne la corrélation :

$$K_0 = S_T \frac{\sigma + 1}{4} = \frac{S_T}{S_L} \frac{\sigma + 1}{4} S_L \quad \text{Eq. 34}$$

avec :

$$\begin{cases} \frac{S_T}{S_L} = 0,5(\sigma - 1) \left( \frac{L}{\delta} \right)^{1/3} Le^{-2/3} & \text{forte turbulence } L/\delta > 500 \\ \frac{S_T}{S_L} = 0,0008(\sigma - 1)^3 \left( \frac{L}{\delta} \right) & \text{faible turbulence } L/\delta < 500 \end{cases} \quad \text{Eq. 35}$$

$L$  est ici l'échelle intégrale de turbulence,  $\sigma$  le taux d'expansion thermique et  $\delta$  l'épaisseur de flamme laminaire.  $L$  peut être estimée via la corrélation établie par Kuznetsov et coll. en 1999 [108] :

$$L = L_c \max(0,1 ; 0,5(1 - \sqrt{1 - Br})) \quad \text{Eq. 36}$$

où  $L_c$  est la taille caractéristique du compartiment situé derrière l'obstacle et  $Br$  le taux de blocage de l'obstacle.

En utilisant les données suivantes (Lamoureux et collaborateurs 2004), pour un mélange de 13%  $H_2$  dans l'air :

$$\begin{cases} Le = 0,59 & ; & \delta = 3,4810^{-4} \text{ m} & ; & \sigma = 4,21 \\ Br = 0,63 & ; & L_c = 5 \text{ m} & ; & S_L = 0,258 \text{ m/s} \end{cases}$$

En première approche,  $K_0$  a ainsi une valeur de 10,6 m/s. Par conséquent, trois valeurs (8 ; 10 ; 12,6 m/s) de  $K_0$  sont retenues. Les profils de vitesse sont rapportés dans la Figure 82.

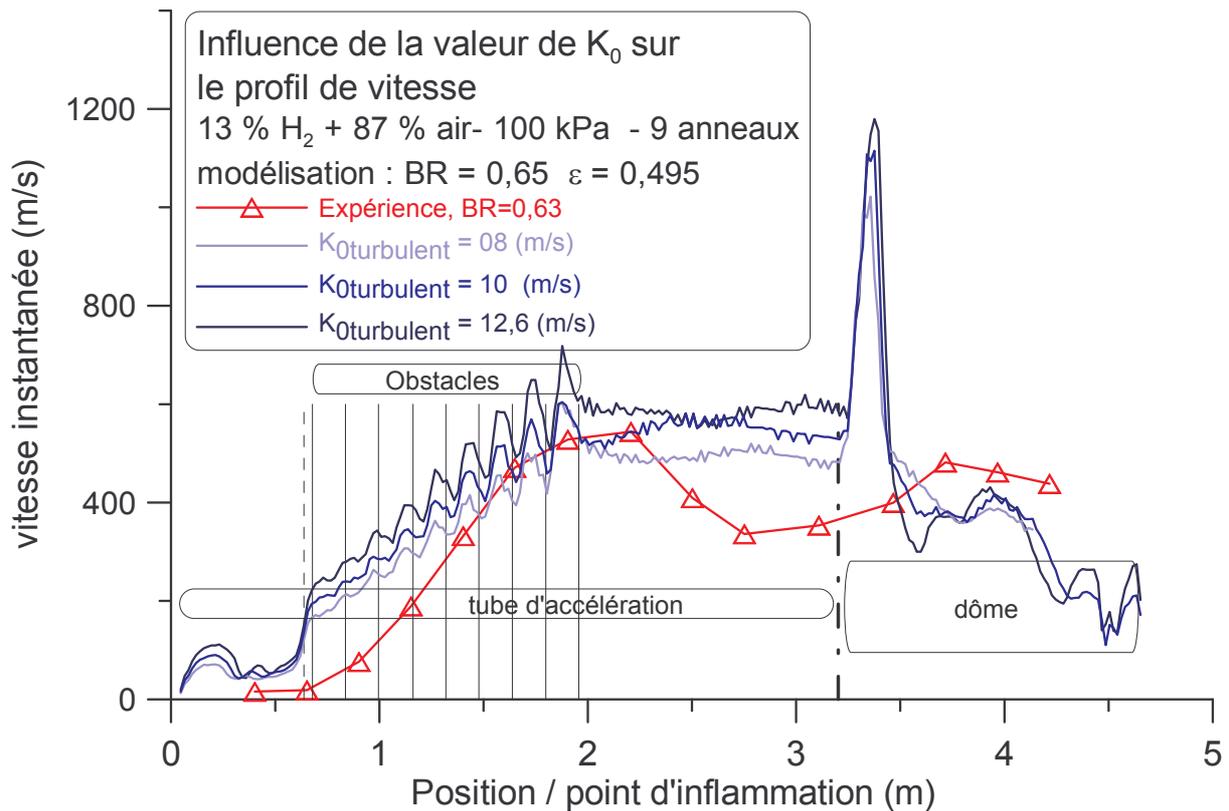


Figure 82 : Modélisation TONUS d'ENACCEF – Vitesse spatiale en fonction de la position, influence de la valeur de  $K_0$ , comparaison du code et de l'expérience.

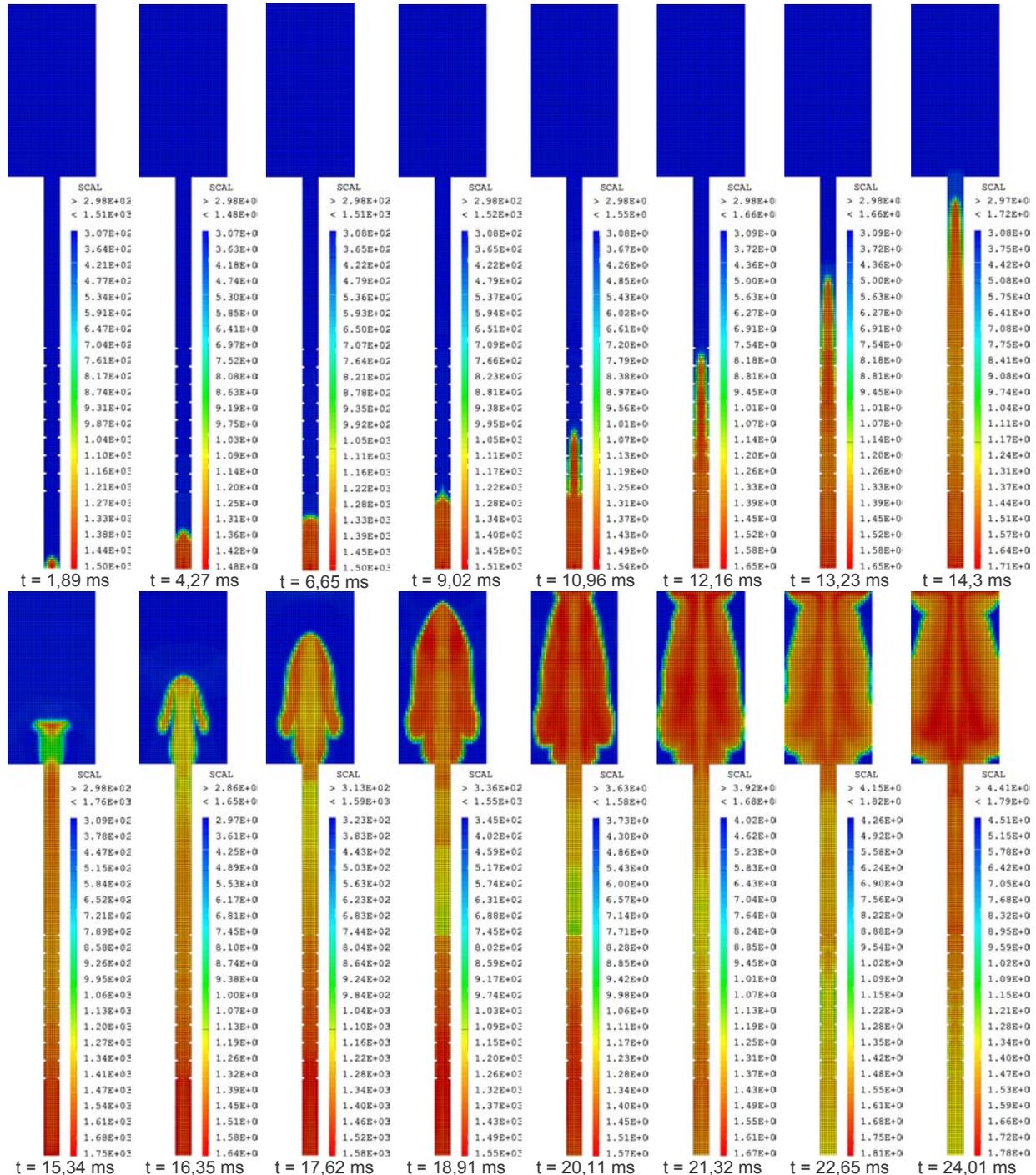
Le suivi fin de la position de flamme lors de la modélisation apporte de nombreux renseignements. La phase d'accélération dans le tube associe trois effets de la structure de confinement sur le front de flamme :

- Influence des obstacles sur la propagation de la flamme : les restrictions de section produisent des jets de flamme par amplification de l'écoulement provoqué par l'effet piston. Ceci induit un comportement pulsé dans la zone des obstacles.
- Augmentation importante de la surface de la flamme par l'effet des jets. D'où une augmentation du taux global de réaction. Ceci est illustré par la séquence de figures du Tableau 15 qui expose des coupes du champ de température au cours du temps.
- Création de poches de combustible dans les zones mortes derrière les obstacles, en dessous de la position du front de flamme (détecté sur l'axe vertical).

La courbe expérimentale se démarque toutefois des calculs car ces derniers voient la vitesse de combustion imposée constante pendant tout l'historique de la propagation de la flamme et ajustée sur la phase d'accélération. En effet on constate :

- Fond de tube : un écart est présent lors de la phase initiale où expérimentalement la flamme est laminaire alors que la vitesse numérique utilisée correspond à une propagation turbulente.
- Accélération par obstacles : la valeur de  $K_0$  prévue par les corrélations pour modéliser la propagation dans la zone d'obstacles, donne de bons résultats de vitesse maximale de flamme dans cette partie du tube.
- Tube lisse : la sortie de la zone obstruée conduit expérimentalement à une décélération de la flamme par diminution de la turbulence. Cette décélération n'est pas reproduite par les courbes de simulations en raison notamment de l'absence de modèle de turbulence.

- Dôme : La transition entre le tube d'accélération et le dôme montre qu'il y a une ré-accelération, que ce soit lors des calculs ou lors des l'expérience, avec toutefois une hauteur et un position du pic de vitesse très différentes, tout au moins au début du dôme. Ceci peut s'expliquer par l'historique de la propagation de la flamme. La séquence d'images (Tableau 15) montre la complexité de la transition tube/dôme.



**Tableau 15 : Iso-contours de profils longitudinaux de température pendant la propagation. Mélange combustible de 13 % d'hydrogène dans l'air. Température et pression initiales égales à 298 K et 100 kPa respectivement.**

En effet, si l'on compare de manière équivalente l'expérience avec le code de calcul (Figure 83), nous obtenons une série de courbes qui semble renforcer l'hypothèse d'un effet de

l'historique sur le pic de vitesse : ce dernier est alors modifié à la fois en amplitude et en position.

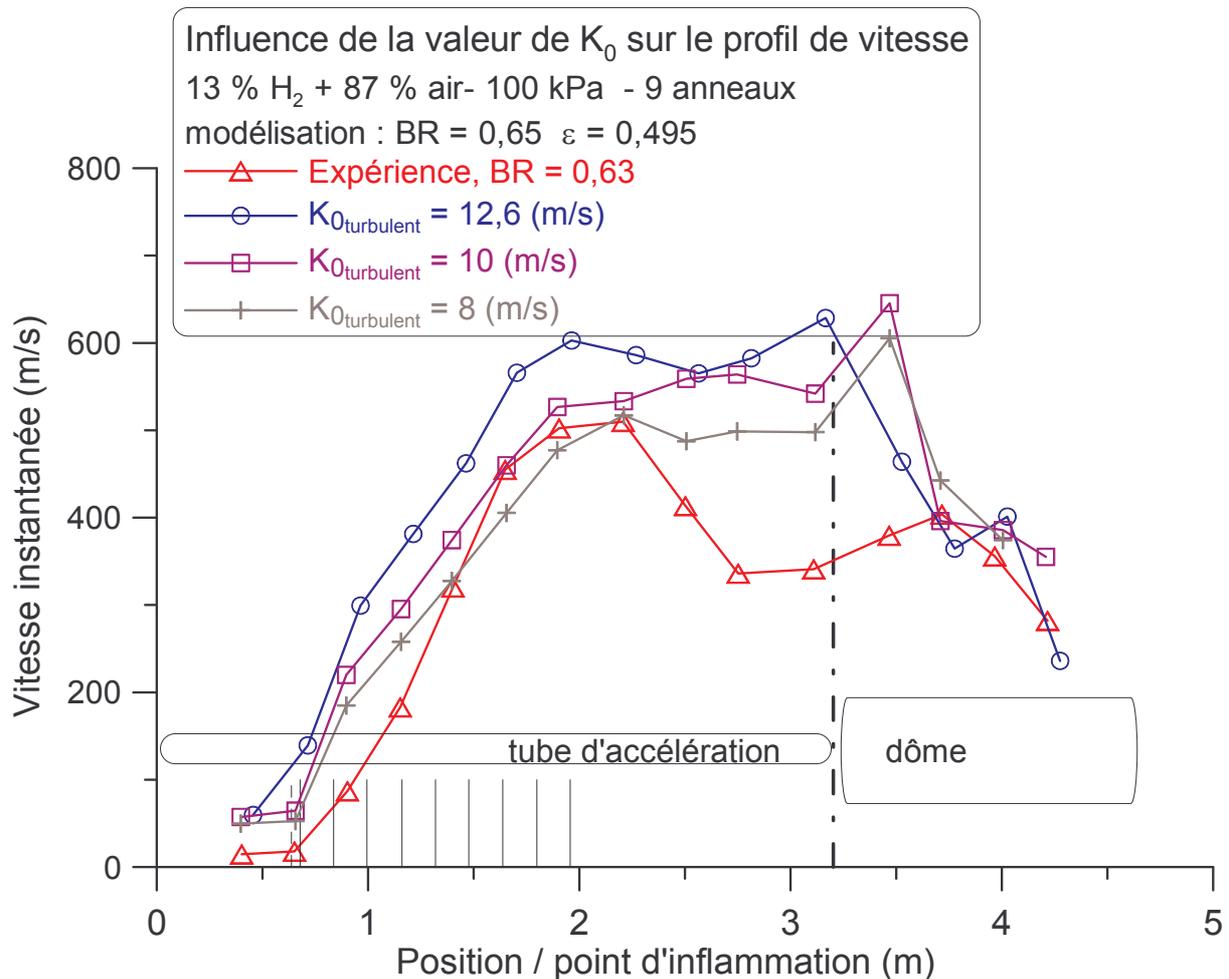


Figure 83 : Modélisation TONUS d'ENACCEF – Vitesse spatiale en fonction de la position, influence de la valeur de  $K_0$ , comparaison point à point du code et de l'expérience.

Cet historique explique l'interaction (accélération ou ralentissement) de la flamme avec l'écoulement et les éventuelles ondes sonores se propageant dans l'enceinte. Il est dépendant entre autres :

- du taux de blocage dans la zone obstruée,
- des pertes thermiques,
- de la finesse de maillage au sein du code.

Ces paramètres sont étudiés ci-après.

### 3.3 Influence du taux de blocage : 0,65, 0,43 et 0

Dans la zone obstruée, l'accélération de la flamme est en adéquation avec le taux de blocage des obstacles (Figure 84).

Pour la propagation en tube lisse, l'utilisation d'une valeur de  $K_0$  pour reproduire un régime accéléré n'est pas adaptée comme le montrent les courbes à taux de blocage nul (BR = 0,00). Ceci montre que l'ajout d'un couplage de  $K_0$  avec la turbulence permettra de mieux décrire les changements de géométrie.

L'étude de l'influence du taux de blocage confirme bien le fait que l'historique de la propagation de la flamme joue un rôle dans la singularité observée numériquement en débouché du tube.

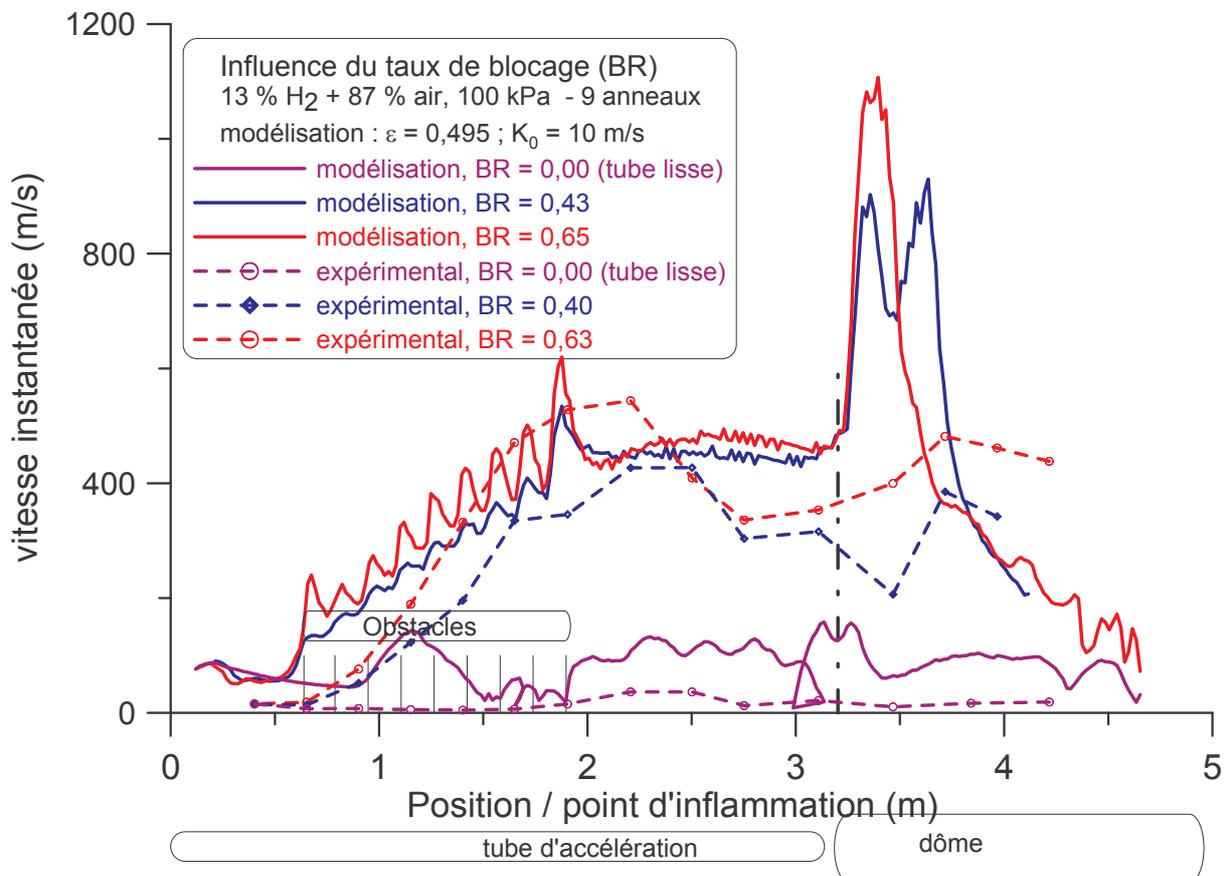


Figure 84 : Modélisation TONUS d'ENACCEF – Vitesse spatiale en fonction de la position, influence du taux de blocage.

### 3.4 Influences des pertes thermiques

Il est nécessaire de prendre en compte les pertes thermiques au sein des gaz chauds. En effet, dans le cas de tube lisse avec des vitesses de propagation assez faibles, les pertes thermiques sont responsables de refroidissement et de contre-effet piston. Ceci est particulièrement connu sous le nom d'effet tulipe : une ré-aspiration au bout d'un certain temps donne des vitesses négatives ou nulles. Le front de flamme forme alors temporairement une parabole inverse de celui d'une flamme en propagation normale.

Tenir compte à la fois du refroidissement aux parois et de la combustion est possible au sein de TONUS mais augmenterait beaucoup les temps de calculs. On peut alors, comme décrit dans la section sur la mécanique des fluides, employer la méthode de puits énergétique. Elle ne représente pas physiquement un transfert aux parois mais plutôt une condensation de vapeur d'eau dans les gaz brûlés. Elle présente l'avantage d'être peu coûteuse en temps de calcul et d'être utilisable immédiatement.

Dans la version du code TONUS retenue pour cette étude, le modèle de puits thermique est décrit avec les équations de mécanique des fluides. Il consiste à soustraire artificiellement de l'énergie au sein de chaque maille en fonction du différentiel de température avec la température de référence. Un coefficient  $H$  ( $J \cdot s^{-1} \cdot m^{-3} \cdot K^{-1}$ ) règle la vitesse

de cette perte d'énergie (qui va directement affecter la température et la pression). La température de référence peut être :

- la température initiale si l'on considère les échanges avec la masse de la structure,
- une température spécifique si l'on désire une condensation (et si l'échelle temporelle du phénomène le permet).

Lors des calculs, nous avons testé dans un premier temps une valeur de  $H$  (0,05) supérieure à celle ( $0,008 \text{ W/m}^3\text{K}$ ) précédemment utilisée par Pailhories dans le cadre des études sur le cas HYCOM. En effet, Pailhories mentionnait que, si la valeur utilisée reflétait bien les transferts post-combustion, elle sous-évaluait fortement les pertes thermiques pendant la combustion. Pour les propagations de flamme nous intéressant, qui sont des régimes transitoires, les publications d'études expérimentales se contredisent quant au mode de perte de chaleur, et surtout quant aux temps et intensités associés à cette perte de chaleur. Il est alors difficile de partir sur une valeur déterminée comme celle reprise par Pailhories pour ses calculs.

Comme le montre la Figure 85, l'effet des pertes thermiques est faible pour le premier coefficient choisi. Toutefois pour le coefficient de  $0,2 \text{ J.s}^{-1}.\text{m}^{-3}.\text{K}^{-1}$  testé dans un second temps, la courbe est plus proche des résultats expérimentaux, que ce soit au niveau de la phase d'accélération, lors de la légère décélération en sortie de la zone obstruée, ou encore dans la zone de transition tube/dôme. Ainsi les pertes thermiques ne peuvent représenter à elles seules la décélération constatée en sortie de la zone obstruée mais y contribuent certainement.

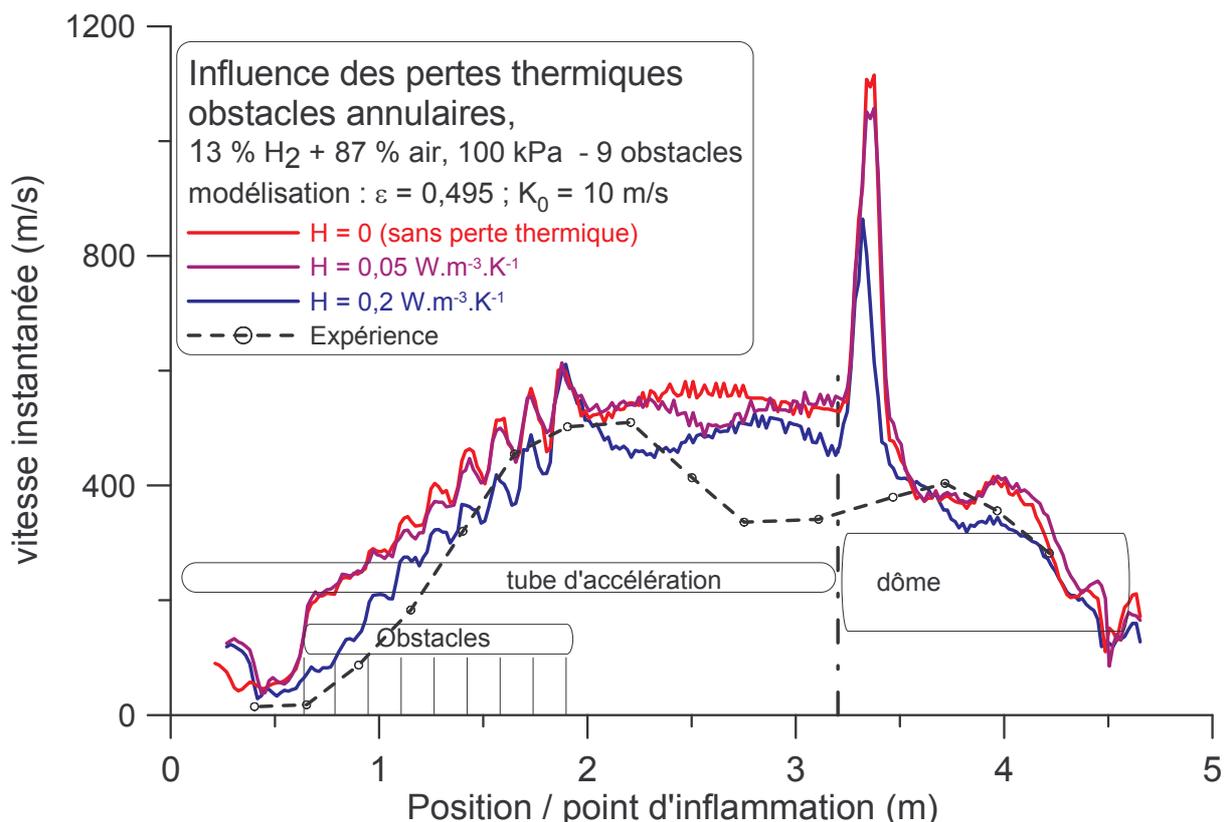
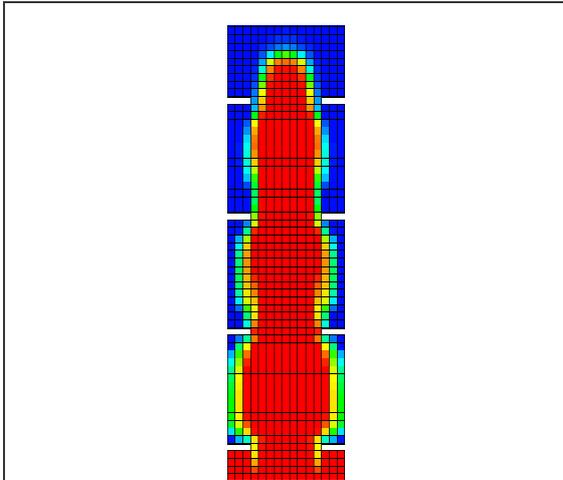


Figure 85 : Modélisation TONUS d'ENACCEF - Vitesse spatiale en fonction de la position, influence des pertes thermiques (puits énergétique).

### 3.5 Influence de la finesse de maillage sur l'accélération de la flamme



**Figure 86** : modélisation TONUS d'ENACCEF – Coupe du champ d'avancement de réaction, zone d'accélération par obstruction, pour un maillage très fin (DM = 0,005 m).

La taille de la maille a un rôle important sur les résultats renvoyés par TONUS car elle joue directement sur la vitesse spatiale de combustion. En effet le taux de combustion est dépendant de  $K_0$  et de DM comme exposé ci-avant

$$\left( \frac{d\xi}{dt} \right)_{crebcom} = q = \frac{K_0}{DM} \cdot (\text{critère combustion})$$

Eq. 25).

La taille de maille a également une influence sur l'épaisseur de la flamme. En effet celle-ci est régie par la valeur de  $\varepsilon$ . La valeur utilisée ici induit une épaisseur de front de flamme de 2-3 mailles environ, comme le montre la Figure 86.

D'autre part, le volume derrière les obstacles est mieux décrit avec un maillage fin, ce qui a tendance à prolonger l'amplification de l'effet piston par combustion en dessous du front de flamme. Ceci contrebalance l'effet des deux précédents.

Aussi trois séries de calculs sont effectuées avec des mailles de 0,02, 0,0185 et 0,015 m. Les maillages plus fins, comme par exemple 0,005 m montré en Figure 86, ne sont pas adaptés à la station de calcul mais sont néanmoins possibles avec TONUS. Les maillages plus grossiers ( $> 0,02$  m) sont peu représentatifs car le crénelage modifie beaucoup trop le choix du taux de blocage possible et rend les courbes non comparables.

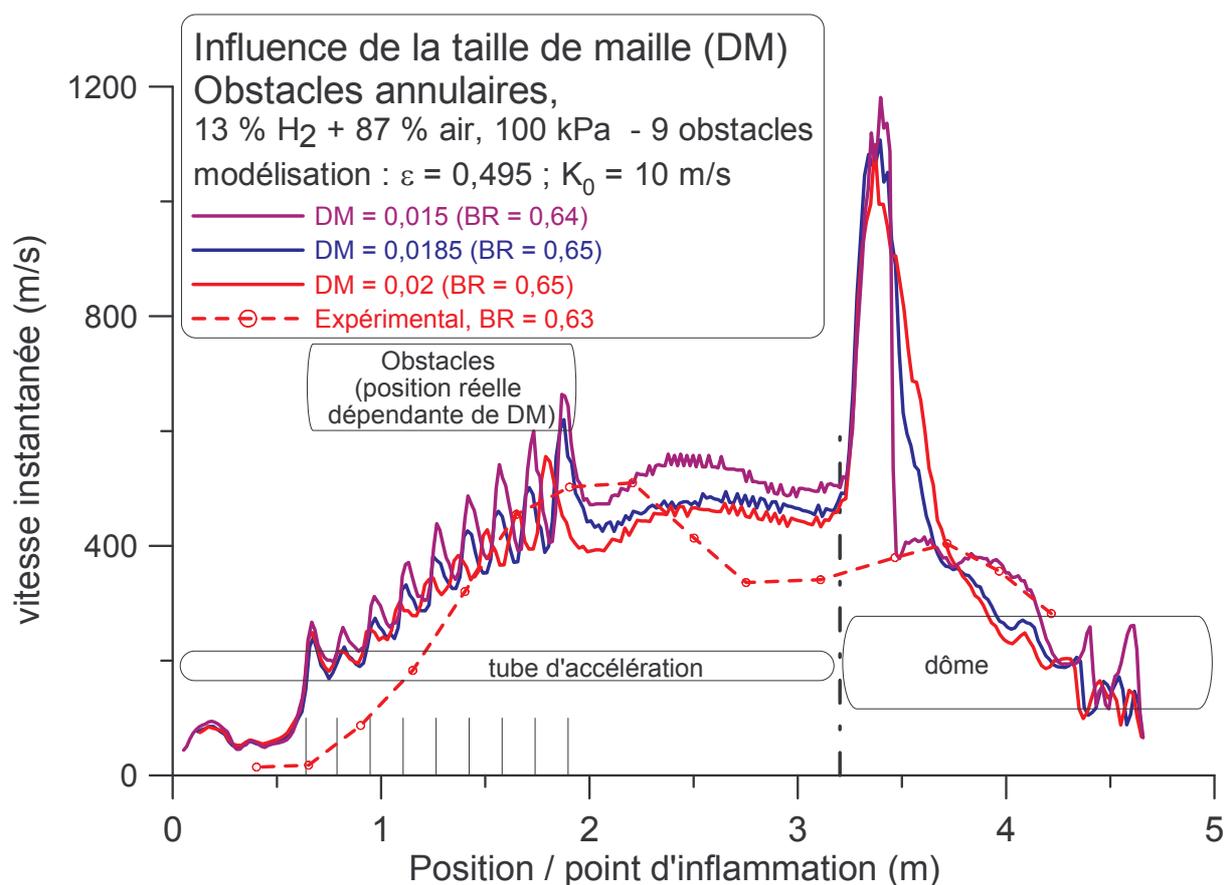


Figure 87 : Modélisation TONUS d'ENACCEF – Vitesse spatiale en fonction de la position, influence de la taille des mailles.

Lorsque l'on compare les simulations (Figure 87), l'effet global semble être légèrement en faveur d'un ralentissement de la vitesse spatiale lorsque la finesse de maillage augmente. L'influence sur l'historique de la propagation est relativement faible avec les valeurs utilisables ici, et donc les profils sont proches. Théoriquement la simulation se rapproche de l'idéalité lorsque le maillage devient plus fin. La représentativité d'effets de turbulence potentiellement ajoutés dans le futur de TONUS dépend également de la finesse du maillage.

## 4 Conclusion

Les études de simulation ont porté sur les deux volets suivants :

- propagation de flammes laminares en bombe sphérique.

Les simulations de la bombe sphérique ont nécessité des améliorations du code. Un suivi fin de la position de la flamme a été introduit. Une première série de calculs a mis en évidence l'effet de la non-idéalité du maillage sur le modèle CREBCOM. Ensuite, une étude par dichotomie a établi les valeurs de vitesse de combustion reproduisant les profils expérimentaux observés.

Une corrélation a ainsi été obtenue, puis validée pour des mélanges de richesses différentes.

Cette fonction ayant été qualifiée à l'aide d'un maillage spécifique, une étude de sensibilité faisant varier la taille et le nombre de mailles serait nécessaire pour une application à des installations nucléaires faisant intervenir des volumes de locaux différents.

- propagation accélérée par interaction avec la géométrie de la structure, dans l'installation ENACCEF.

Pour cette étude, la séquence d'allumage/propagation retenue est identique au cas de la bombe sphérique. Les améliorations du code mises en place pour l'étude des flammes laminaires et la simulation en bombe sphérique ont permis de valider les hypothèses de calcul dans l'enceinte ENACCEF. Les résultats des calculs ont conduit à l'évaluation de la vitesse de la flamme selon le mode de combustion et la géométrie de l'enceinte. Les calculs apportant des renseignements complémentaires aux valeurs ponctuelles déterminées expérimentalement, il a été ainsi possible de mettre en évidence :

1. l'influence des obstacles sur la propagation de la flamme,
2. l'augmentation importante de la surface de la flamme par les effets de jets,
3. la création de poches de combustibles en dessous de la position du front de flamme.

Les valeurs de  $K_0$  prévues par les corrélations pour modéliser la propagation dans la zone d'obstacles donnent de bons résultats de vitesse maximale de flamme. Par contre, la décélération de la flamme observée expérimentalement en sortie de la zone obstruée est mal reproduite par les courbes de simulation en raison de l'absence dans le code de modèle de turbulence. Un couplage avec la turbulence devrait améliorer la comparaison calcul / expérience.

La transition entre le tube d'accélération et le dôme montre qu'il y a une ré-accélération, que ce soit d'après les calculs ou lors des expériences, avec toutefois une hauteur et position du pic différentes. Ce phénomène pourrait s'expliquer par les historiques de propagation différents. Ceci a induit des études de sensibilité supplémentaires :

- Tout d'abord des calculs portant sur des taux de blocage ont confirmé cette hypothèse.
- Ensuite l'ajout de pertes thermiques (puits énergétique) a permis de reproduire encore plus fidèlement la propagation de la flamme.
- Enfin l'influence de la finesse de la maille a confirmé la dépendance des valeurs de  $\varepsilon$  et de  $K_0$ .

Le modèle pourrait maintenant être encore amélioré de deux façons, avec l'ajout :

- de pertes thermiques par transfert aux parois (avec combustion),
- d'un couplage avec la turbulence, soit avec l'utilisation de fonctions relatives au modèle K- $\varepsilon$  récemment implémenté dans CASTEM, soit par une fonction du rotationnel de vitesse dans les gaz frais. A ce titre il est nécessaire de disposer de données expérimentales relatives à l'influence de la turbulence sur la vitesse de propagation de flamme. Cette étude pourrait être entreprise sur l'installation de la bombe sphérique modifiée pour l'ajout et la caractérisation d'une turbulence isotrope.

## CONCLUSION

Dans ce mémoire, nous avons présenté les résultats d'un travail consacré à l'étude expérimentale et numérique de la propagation de flammes prémélangées turbulentes, dans une atmosphère humide et pauvre en hydrogène. Elle avait pour objectifs d'établir des critères d'accélération de flammes, et d'évaluer plus finement le risque hydrogène dans les réacteurs nucléaires à eau pressurisée.

Les travaux expérimentaux ont concerné d'une part la détermination de paramètres fondamentaux caractérisant les flammes laminaires de mélanges à base d'hydrogène et, d'autre part, l'étude des accélérations de flamme en présence d'obstacles. Ils ont été complétés par une étude de simulation numérique portant sur ces deux points.

La première phase visait à obtenir des données sur les vitesses normales de combustion de l'hydrogène en tenant compte des dernières avancées récentes de la théorie de propagation de flammes. Cette étude a été effectuée par la méthode de la bombe sphérique équipée d'une visualisation par ombroscopie. L'influence de la pression sur les paramètres fondamentaux de la vitesse de flamme a été étudiée pour des pressions de 100, 200 et 500 kPa, sur toute la gamme d'inflammabilité des mélanges hydrogène-air. Il a pu être constaté que la montée en pression rendait les flammes plus instables. Les instabilités thermo-diffusives ont limité l'étude de la branche pauvre particulièrement intéressante pour cette étude. Pour remédier à ces instabilités qui plissaient précocement le front de flamme, une étude complémentaire a été nécessaire. Elle a fait intervenir des mélanges hydrogène – oxygène – hélium pour lesquels la flamme est moins perturbée par la compétition des diffusions thermiques et massiques qu'elle ne l'est avec les mélanges hydrogène-air. L'obtention de ces données sur les flammes laminaires a permis la validation du modèle de cinétique chimique de Marinov dans un large domaine de richesses et de pressions. Avec ce mécanisme chimique, la simulation des propagations dans les mélanges pour lesquels la vitesse normale de combustion ne peut être déterminée a permis d'obtenir des données fondamentales recherchées. L'influence de la pression sur la vitesse fondamentale à étirement nul, sur l'énergie globale d'activation, sur le nombre de Zeldovich et sur la longueur de Markstein a ainsi pu être déterminée.

La présence d'un diluant de propriétés thermodynamiques proches de la vapeur d'eau renforce les instabilités de flammes. L'augmentation du taux de dilution diminue la vitesse de la flamme et augmente la longueur de Markstein.

Une corrélation déterminant la vitesse fondamentale de flamme en fonction de la richesse, du taux de diluant, de la température et de la pression a été établie et validée sur les plages :  $P$  [100 à 500 kPa],  $\Phi$  richesse [0,24 à 0,7],  $T$  (K) [298 à 353K],  $\Psi$  (fraction de diluant) [0 à 0,4] :

$$S_1^0(\Phi, \Psi, T, P) = (1,44 * \Phi^2 + 1,07 * \Phi - 0,29) * (1 - \Psi)^4 * (T / T_{ref})^{2,2} * (P / P_{ref})^{-0,5}$$

avec :  $P_{ref} = 100$  kPa,  $T_{ref} = 298$  K.

Les objectifs fixés initialement ont été atteints, fournissant une source fiable de données fondamentales pour le paramétrage des codes de calculs.

La deuxième phase a été l'acquisition de données expérimentales sur la propagation de flammes accélérées, dans des conditions représentatives de cas d'accidents graves en centrale nucléaire à eau pressurisée. Cette étude a porté sur des déflagrations de mélanges très pauvres qui ne peuvent transiter vers la détonation, peu étudiées jusqu'à présent dans la littérature. L'influence du taux de blocage des obstacles sur les profils de vitesse de la flamme a été étudiée en suivant sa propagation dans la totalité de l'enceinte. L'impact de divers taux de blocage sur cette propagation a été évalué avec des mélanges différents et des obstacles annulaires. Les anneaux présentant une obstruction de 63 % de la section du tube conduisent à la plus grande vitesse de flamme observée.

Pour l'étude de l'influence de la forme des obstacles, nous avons comparé des obstacles annulaires avec ceux en forme de grilles. Le taux de blocage était constant, voisin de 0,6, mais trois compositions de mélange combustible ont été utilisées. Selon la forme des obstacles, la flamme a un comportement différent. Les obstacles annulaires ont tendance à fortement accélérer la flamme dans la zone obstruée, par amplification de l'effet piston induit par la combustion. Une zone de décélération de la flamme a été observée en sortie des anneaux, avant l'arrivée dans le dôme de l'installation ENACCEF. Les grilles induisent une accélération de la flamme moins importante dans la zone obstruée, voire une extinction de celle-ci pour le mélange le plus pauvre étudié. Contrairement aux cas des anneaux, la flamme continue son accélération en sortie des grilles, pour atteindre finalement une vitesse de propagation maximale similaire à celle obtenue avec les anneaux.

Pour l'étude de l'influence de la composition des mélanges sur l'accélération de la flamme, nous avons utilisé des mélanges dilués ou non par un gaz thermodynamiquement semblable à la vapeur d'eau. La géométrie des obstacles annulaires était alors constante avec un taux de blocage de 0,63. L'augmentation de la richesse pour des mélanges hydrogène-air a conduit à une augmentation des vitesses de la flamme. La substitution d'une partie de l'air par de la pseudo-vapeur d'eau a tendance à ralentir la flamme. Toutefois, dans cette étude, la richesse du mélange variait simultanément avec le taux d'expansion thermique. Lorsque le taux de pseudo-vapeur d'eau augmente au dépens de la fraction d'air, la richesse croît par diminution de la concentration en hydrogène et le taux d'expansion thermique diminue. Une meilleure appréciation de l'influence de la dilution par de la vapeur d'eau a été apportée par une étude complémentaire où le coefficient d'expansion thermique était gardé constant. Un ralentissement de la vitesse de flamme est encore constaté lorsque le taux de dilution augmente, indépendamment de l'effet piston.

Enfin, l'étude de gradients de concentration a fait intervenir des gradients discontinus et continus. Les gradients discontinus ont été peu étudiés dans ces travaux car la présence nécessaire d'une membrane séparant le tube et le dôme rend impossible la comparaison avec les configurations sans membrane. En effet, la membrane présente au moment de l'inflammation induit une montée en pression préliminaire dans le tube et ceci perturbe l'historique de la flamme. Le procédé d'obtention d'un gradient continu a été mis au point en rompant la membrane avant combustion. Cette rupture est obtenue au cours de la phase d'introduction des gaz dans l'enceinte, grâce à une différence de pression suffisante entre le tube et le dôme. Un jet de gaz se forme alors en direction de la zone de basse pression et accélère la formation du gradient. Les profils de concentration sont vérifiés par prélèvement et analyse en chromatographie gazeuse. L'influence des gradients de concentration se révèle faible comparativement aux propagations en mélange homogène. Ceci est potentiellement dû, d'une part, aux faibles variations de concentration pour les gradients étudiés et, d'autre part, au fait que le gradient n'est pas établi jusqu'au point d'inflammation. L'effet d'un gradient de

concentration plus important (8 à 18 % H<sub>2</sub>) a pu être analysé dans une configuration sans obstacle. Il a donné lieu à une propagation pulsée de la flamme qui semble due à des condensations derrière la flamme et donc à des déformations du front de flamme qui prend l'apparence d'une tulipe comme cela a déjà été cité dans la littérature.

L'ensemble des données expérimentales et de la caractérisation de la cinétique globale de ces flammes à base d'hydrogène constitue une base de données pour l'évaluation de critères d'accélération de ces flammes. Ce critère permet de caractériser la capacité d'un mélange à donner naissance à une flamme fortement accélérée si les conditions géométriques sont favorables à cette accélération.

Dans une configuration particulière d'encombrement (obstacles annulaires de rapport de blocage égal à 0,63) a permis d'établir une relation simple du critère  $\sigma^*$  en fonction du paramètre  $\beta(Le-1)$  :

$$\sigma^* = 0,075 \beta(Le-1) + 4,38$$

Les objectifs de cette étude ont été atteints en grande partie. L'établissement du gradient de concentration était initialement un point très incertain et a montré sa faisabilité mais doit faire l'objet d'amélioration afin de créer des gradients jusqu'au point d'inflammation comme prévu initialement.

La troisième phase a consisté en l'amélioration du code numérique de combustion TONUS, développé par l'IRSN, et sa validation sur la base des données obtenues avec les deux installations du LCSR au CNRS d'Orléans : la bombe sphérique et "ENACCEF" (ENceinte d'ACCElération de Flamme). Lors de ces travaux de thèse, une modélisation en trois dimensions des enceintes a été utilisée. Ce code, utilisé avec des maillages cubiques, permet une résolution des équations d'Euler et de la combustion, par volumes finis, selon un schéma explicite.

Les simulations des flammes laminaires en bombe sphérique ont nécessité des améliorations du code afin de permettre la propagation de la flamme. Le mode d'allumage a été revu à cette occasion. En outre, un suivi fin de la position de la flamme a été mis en place. Une première série de calculs a montré l'effet de la non idéalité du maillage sur le modèle de combustion CREBCOM. Ensuite, une étude par dichotomie a établi les valeurs de vitesse de combustion reproduisant les profils expérimentaux observés. Une corrélation a ainsi été obtenue puis validée pour des mélanges de richesses différentes.

Les résultats des calculs sur la structure ENACCEF ont conduit à l'évaluation de la vitesse de la flamme selon le mode de combustion et la géométrie de l'enceinte. Il a été ainsi possible de mettre en évidence :

- l'influence des obstacles sur la propagation de la flamme,
- l'augmentation importante de la surface de la flamme par les effets de jets successifs,
- l'amplification de l'effet piston par création de poches de combustibles en dessous de la position du front de flamme.

Les valeurs du paramètre  $K_0$  prévues par les corrélations pour modéliser la propagation dans la zone d'obstacles donnent de bons résultats de vitesse maximale de flamme. Par contre, la décélération de la flamme observée expérimentalement en sortie de la zone obstruée est mal reproduite par les courbes de simulation en raison de l'absence, dans le code, de modèle de turbulence. La transition entre le tube d'accélération et le dôme montre

qu'il y a une ré-accélération, que ce soit d'après les calculs ou lors des expériences, avec toutefois une hauteur et position du pic différentes.

L'évolution de la flamme dans le milieu encombré d'obstacles avec des taux de blocage différents s'accorde avec les observations expérimentales. La prise en compte, dans le code, des pertes thermiques (puits énergétique) a permis de reproduire encore plus fidèlement la propagation de la flamme. Enfin, les profils de vitesse de flamme sont sensibles à la finesse du maillage.

Ces travaux pourraient éventuellement se poursuivre par des études portant sur :

- (1) l'approfondissement des critères d'accélération par exploitation des résultats acquis
- (2) l'analyse plus poussée de l'effet de gradient de concentration de l'hydrogène après modification du protocole expérimental
- (3) le rôle d'un brouillard d'eau sur la propagation de la flamme en régime laminaire et en régime turbulent.

Le code TONUS pourrait être éventuellement amélioré de deux façons, avec l'ajout :

- de pertes thermiques par transfert de chaleur aux parois
- d'un couplage avec la turbulence, soit en utilisant des fonctions relatives au modèle  $K-\varepsilon$  récemment implémenté dans CASTEM, soit par une fonction du rotationnel de vitesse dans les gaz frais. Pour cela, il serait nécessaire de disposer de données expérimentales relatives à l'influence de la turbulence sur la vitesse de propagation de flamme. Cette étude pourrait être entreprise sur l'installation de la bombe sphérique modifiée en conséquence, en y ajoutant un système d'agitation et de caractérisation d'une turbulence isotrope.

## Références

- ---

1 OECD SOAR, Flame Acceleration and Deflagration to Detonation Transition in Nuclear Safety, State-of-the-Art Report by a Group of Experts, OECD, Nuclear Energy Agency, NEA/CSNI/R(2000)7, <http://www.galcit.caltech.edu/~jeshep/SOAR/>, August 2000.
- 2 Brailovsky I, Sivashinsky G, Effects of momentum and heat losses on the multiplicity of detonation regimes, *Combustion and flame*, vol. 128, N° 1-2, p 191–196, 2002.
- 3 De-Charentenay,-J.; Ern,-A., Multi component transport impact on turbulent premixed H<sub>2</sub>/O<sub>2</sub> flames, *Combustion Theory and Modeling*, Sept. 2002, vol. 6(3), p 439-62
- 4 Poinsot T, Veynante D, *Theoretical and Numerical Combustion*, R. T. Edwards, 2001, ISBN : 1930217056.
- 5 Marinov N, Westbrook C.K, Pitz W.J, in *transport phenomena in combustion*, volume 1, ed. S.H. Chan, Taylor and Francis, Washington DC, 1996. (UCRL-JC-120677).
- 6 Smith G, Golden D, Frenklach M, Moriarty N, Eiteneer B, Goldenberg M, Bowman C, Hanson R, Song S, Gardiner W Jr, Lissianski V, Qin Z, [http://www.me.berkeley.edu/gri\\_mech/](http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/)
- 7 Iki N, Furutani H, Hama J, Takahashi S, Kurata O, Liu F, Laminar burning velocity of stoichiometric hydrogen-oxygen-steam mixture under high pressure, *Proceedings of the 4th Hydrogen Energy symposium*, 29 August 1997, Yokohama, Japan.
- 8 Zsely I.G, Turanyi T, The influence of thermal coupling and diffusion on the importance of reactions: The case study of hydrogen-air combustion, *PCCP Physical chemistry chemical physics Print*, 2003, vol. 5 (17), p 3622-3631
- 9 Aung K.T, Hassan M.I, Faeth G.M, Effects of pressure and nitrogen dilution on flame/stretch interaction of laminar premixed H<sub>2</sub>/O<sub>2</sub>/N<sub>2</sub> flames, *Combustion and flame*, 1998, vol.112, p. 1-15.
- 10 Lamoureux N, Djebaili-Chaumeix N, Paillard C-E, Mesures de vitesses fondamentales de combustion par la méthode de la bombe sphérique. Mélanges H<sub>2</sub>-air-CO<sub>2</sub>-He à température ambiante et H<sub>2</sub>-air-vapeur d'eau à 353 K, Rapport intermédiaire de contrat CNRS/4070 9B5870, Octobre 2001.
- 11 Kwon S, Tseng L.-K, Faeth M, Laminar burning velocities and transition to unstable flames in H<sub>2</sub>/O<sub>2</sub>/N<sub>2</sub> and C<sub>3</sub>H<sub>8</sub> / O<sub>2</sub> /N<sub>2</sub> mixtures, *combustion and flame*, 1992, vol 90, p 230-246
- 12 Karpov V, Lipatnikov A, Wolanski P, Finding the Markstein number using the measurement of expanding spherical flames, *combustion and flames*, 1997, vol 109, pp 436-448
- 13 Bradley D, Cresswell T.M, Puttock J.S, Flame acceleration due to flame-induced instabilities in large-scale explosions, *combustion and flame*, 1997, vol. 124, p 551-559
- 14 Bradley D, Gaskell P.H, Gu X.J., Burning velocities, Markstein length and flame quenching for spherical methane-air flames : a computational study. *Combustion and Flame*, 1996, vol. 104, p176-198.

- \_\_\_\_\_
- 15 Koroll G.W., Kumar R.K., Bowles E.M., Burning velocities of hydrogen-air mixtures, combustion and flame, 1993, vol. 94, p330-340
  - 16 Landau L, Acta physicochim, URSS, vol. 19, 1979, p 77
  - 17 Markstein G. H., Non-Steady Flame Propagation, Pergamon, New York, p 22, 1964.
  - 18 Karlovitz B, Denniston D.W., Knapschaefer D.H., Wells F.H., Studies on turbulent flames, Fourth (International) Symposium on Combustion, 1953, Baltimore, William and Wilkins, 613.
  - 19 Williams F.A, A review of some theoretical considerations of turbulent flame structure, AGARD conference Proceedings, 1975, No 164.
  - 20 Sivashinsky G.I, On a distorted flame front as a hydrodynamical discontinuity, Acta Astronautica, 1976, vol3, p 889.
  - 21 Buckmaster J.D., The quenching of two dimensional premixed flames, Acta Astronautica, 1979, vol. 6, p 741.
  - 22 Clavin P, Williams F.A, Effects of molecular diffusion and of thermal expansion on the structure and dynamics of premixed flames in turbulent flows of large scales and low intensity, J. Fluid Mech, 1982, vol. 116, p 251.
  - 23 Matalon M, Matkowsky B.J, Flames as gas dynamic discontinuities, J. Fluid Mech, 1982, vol. 124, p 239.
  - 24 Clavin P, Joulin G, Lecture Notes in Engineering 40, 1989, p213.
  - 25 Bradley D, Hicks R.A, Lawes M, Sheppard C.G.W, Wooley R, The measurement of laminar burning velocities and Markstein numbers for iso-octane-air and iso-octane-nHeptane-air mixtures at elevated temperatures and pressures in an explosion bomb, Combustion and Flame, 1998, vol. 115, p126-144.
  - 26 Markstein, G. H., Non-Steady Flame Propagation, Pergamon, New York, 1964, [22].
  - 27 Clavin P., Dynamic behavior of premixed flame front in laminar and turbulent flows, Progress in Energy and Combustion Science, 1985, vol. 11, [01-59].
  - 28 Lannoy A, Analyse des caractéristiques de la combustion de mélanges ternaires hydrogène-air-vapeur d'eau, 44p, Octobre 84
  - 29 Koroll G.W, Mulpuru S.R, The effect of dilution with steam on the burning velocity and structure of premixed hydrogen flames, 21<sup>st</sup> Symp. (International) on Combustion, The Combustion Institute, Pittsburgh, 1986, p 1811-1819.
  - 30 Bechtold-J.K, Matalon-M, The dependence of the Markstein length on stoichiometry, Combustion and flame, 2001, vol. 127, N°1-2, [1906-1913]
  - 31 Tse-SE-S.D., Zhu-D.L., Law-K Princeton USA, Morphology and burning rates of expanding spherical flames in H<sub>2</sub>/O<sub>2</sub>/Inert mixtures up to 60 atmospheres, proceedings of the Combustion Institute, 2000, Vol.28, [1783-1800]
  - 32 Borghi R, Destriau, La combustion et les flammes, Editions Technip, 1995
  - 33 Damköhler G., Zeitschrift für Elektrochemie und Angewandte Physikalische Chemie, vol. 46, p 601, 1940, Trans NACA TM 1112, 1947.
  - 34 Schelkin K.I., NACA TM 1110, 1947.
  - 35 Chomiak J., Fluid Dynamic Transactions, vol. 5, p. 47, 1971.

- \_\_\_\_\_
- 36 Chomiak J., *Combust. Flame*, vol. 15, p. 319, 1970.
- 37 Summerfield M., Reiter S.H., Kebely V., Muscolo R.W., *Jet Propulsion*, vol. 25, p. 377-384, 1955.
- 38 Summerfield M., *Jet Propulsion*, vol. 26, p. 485-487, 1956.
- 39 Renou B, Boukhalfa A, An experimental study of freely propagating premixed flames at various Lewis numbers, *Combustion science and technology*, 2001, vol. 162, p 347-370
- 40 Abdel-Gayed R.G, Bradley D, Dependence of turbulent burning velocity on turbulent Reynolds number and ratio of laminar burning velocity to R.M.S turbulent velocity, 16<sup>th</sup> Symposium (International) on Combustion, 1976, p 1725-1735.
- 41 Khislali K.J, Bradley D, Lawes M, turbulent combustion of near-limit hydrogen-air mixtures, *Combustion and flame*, 1983, vol. 54, p 61-70.
- 42 Kozachenko L.S, Kuznetsov I.L, Burning velocity in a turbulent stream of a homogeneous mixture, *Combustion, Explosion and shock waves*, 1965, vol. 1, p 22-30.
- 43 Abdel-Gayed R.G, Bradley D, Hamid M.N, Lawes M, Lewis Number Effects on turbulent burning velocity, 20<sup>th</sup> Symposium (international) on combustion, 1984, p 505-512
- 44 Gülder O.L, Turbulent premixed flame propagation models for different combustion regimes, 23<sup>rd</sup> Symposium (international) on combustion, 1990, p 743-750.
- 45 Bradley D, Lau A.K.C, Lawes M, Flame stretch rate as a determinant of turbulent burning velocity, *Phil. Trans. Roy. Soc. Lond.*, 1992, A338, p 359-387.
- 46 Madja A.J, Souganidis P.E, Large scale front dynamics for turbulent reaction-diffusion equations with separated velocity scales, *Nonlinearity*, vol. 7, p1-30.
- 47 Dorofeev-SB, Kutznetsov-MS, Alekseev-VI, Efimenko-AA, Breitung-W, Evaluation of limits for effective flame acceleration in hydrogen mixtures, *Journal of loss prevention in the process industries*, Nov 2001, 14(6), [583-589]
- 48 Fiechtner G.J, Renard P.H, Gord J.R, Grinstead K.D, Carter C.D, Rolon J.C, Application of imaging techniques to the study of vortex-flame interactions, *Proceedings of the SPIE, The International Society for Optical Engineering*, 1999, 3783, p 23-34
- 49 Montgomery-C.J, Khokhlov-A.M, Oran-E.S, The effect of mixing irregularities on mixed-region critical length for deflagration-to-detonation transition, *Combustion and flame*, 115(1-2) , 1998, p. 38-50.
- 50 Vaezi-V, Aldredge-R.C, Influences of acoustic instabilities on turbulent-flame propagation, *Experimental thermal and fluid science*, vol. 20, N°3-4 , [162-169], 2000.
- 51 Thomas-G.O, Jones-A, Some observations of the jet initiation of detonation, *Combustion and flame*, vol. 120, N°3, [392-398], 2000.
- 52 Shapiro Z.M., Mofette T.R., *Hydrogen flammability data and application to PWR LOCA*, WAPD-SC-545, 1957
- 53 Tieszen S.R., Sherman M.P., Benedick W.B., Sheperd J.E., Knystautas R., Lee J.H.S., *Prog. Astronaut. Aeronaut.*, 1986, vol. 106, p 205-219.
- 54 Stamps D.W., *Detonation cells widths in hydrogen-air-diluent mixtures*, 1990, The Western States Section of the Combustion Institute, San Diego, California.

- 
- 55 Belles F.E., Drell I.L., Survey of hydrogen combustion properties – Lewis Flight Propulsion Laboratory – Cleveland – Report 1383, 1958
- 56 Berman M., Cummings J.C., Hydrogen behavior in light-water reactors – Nuclear Safety, vol. 25, N°1, 1984
- 57 Lewis B., von Elbe G., Combustion, Flames and Explosions of Gases. Second Edition Academic Press Inc., 1961
- 58 Liu Y, Rogg B, Prediction of radiative heat transfer in laminar flames, Combustion science and technology, 1996, vol. 118 (1-3), p127-145.
- 59 Boin J.P, Turbulence, cours 2eme année de l'ENSIB
- 60 El-Gamal M, Gutheil E, Warnatz J, The structure of laminar premixed H<sub>2</sub>-air flames at elevated pressures, Zeitschrift für Physikalische Chemie, 2000, vol. 214(4), p 419-35.
- 61 Birkby P, Cant R-S, Savill A-M, The application of a laminar flamelet model to confined explosion hazards, Flow-turbulence-and-combustion. 1999, vol. 63 (1-4), p 361-377.
- 62 Bray K, Champion M, Libby P, The Interaction between Turbulence and Chemistry in Premixed Turbulent Flames, Turbulent Reacting Flows. (R. Borghi and S. Murphy, (editors)), Lecture Notes in Engineering, Vol. 40. Springer, Heidelberg, 1989.
- 63 Wu M.S, Kwon S, Driscoll J.F, Faeth G.M, Turbulent premixed hydrogen/air flames at high Reynolds numbers, Combustion science and technology, 1990, vol. 73 (1-3) : 327-350
- 64 Faix-Gantier A., Phénoménologie et calculs numériques de la propagation d'une flamme prémélangée hydrogène-air pauvre dans un milieu turbulent, Thèse de doctorat, 2001, Poitiers, France.
- 65 Meneveau C. and Poinso T., Stretching and quenching of flamelets in premixed turbulent combustion, , Combustion and Flame 86, 311–332, 1991.
- 66 Arntzen Bjørn Johan, Modeling of turbulence and combustion for simulation of gas explosions in complex geometries, thesis for the dr. ing. degree, mai 1998
- 67 Barrero D, Paulin M, Caubet R, A Physics Based Multi-Resolution Model for the Simulation of Turbulent Gases and Combustion, IRIT, <http://members.tripod.com/dbarrero/turbed/publis/cas99cr.pdf>
- 68 Tabor G, Weller H.G, Large Eddy Simulation of Premixed Turbulent Combustion Using Flame Surface Wrinkling Model, Flow Turbulence and Combustion, Vol. 72, p 1–28, 2004.
- 69 Patel S., Ibrahim S.S., Yehia M.A., Hargrave G.K., Investigation of premixed turbulent combustion in a semi-conned explosion chamber, Experimental Thermal and Fluid Science 27, 355–361, 2003.
- 70 Celalettin C, Ahimet A and Osman F.G, Modeling of turbulent reacting flows with gaseous fuels in a combustion chamber, Fuel Vol. 15 No. 4, p 431-436, 1996.
- 71 Kozelev M. V., Vinberg A. A., Zaichik L. I., Pershukov V. A., Modeling of Dynamics, Heat Transfer, and Combustion in Two-Phase Turbulent Flows: 1. Isothermal Flows, 2. Flows with Heat Transfer and Combustion, , Experimental Thermal and Fluid Science, Volume 15, Number 4, pp. 291-310(20) and pp. 311-322(12), 1997.
- 72 Barrero D, Paulin M, Caubet R, Simulating Turbulent Combustion, Institut de Recherche en Informatique de Toulouse (IRIT), Toulouse, France, <http://danybu.tripod.com/publis/graphicon2000.pdf>

○

- 73 Kirkpatrick M.P., Armfield S.W., Masri A.R., Ibrahim S.S., Large Eddy Simulation of a Propagating Turbulent Premixed Flame, *Flow, Turbulence and Combustion*, Vol. 70 p 1–19, 2003.
- 74 Chakravarthy V.K., Menon S., Subgrid Modeling of Turbulent Premixed Flames in the Flamelet Regime, *Flow, Turbulence and Combustion*, Vol. 65, p 133–161, 2000.
- 75 Xiangyang Z., Mahalingam S, A Flame Surface Density based model for large eddy simulation of turbulent non premixed combustion, *Physics of fluids*, Vol. 14, no 11, 2002.
- 76 Li G, Naud B, Roekaerts D, Numerical Investigation of a Bluff-Body Stabilized Nonpremixed Flame with Differential Reynolds-Stress Models, *Flow, Turbulence and Combustion*, Vol. 70, p 211–240, 2003.
- 77 Chiba N., Ohkawa S, Muraoka K, Miura M, Two-dimensional Simulation of Flames, Smoke and the Spread of Fire, *J. of Vis. And Comp. Animation*, 5, p.37-54, 1994.
- 78 Heinz S, On Fokker-Planck Equations for Turbulent Reacting Flows. Part 1. Probability Density Function for Reynolds-Averaged Navier–Stokes Equations, *Flow, Turbulence and Combustion*, vol. 70, 115–152, 2003.
- 79 Heinz S, On Fokker–Planck Equations for Turbulent Reacting Flows. Part 2. Filter Density Function for Large Eddy Simulation, *Flow Turbulence and Combustion*, vol. 70, 153–181, 2003.
- 80 Butler T, Cloutman J, Dukowich J, Ramshaw, Multidimensional numerical simulation of reactive flow in internal combustion engines, *J.R, Prog. Energy Combust. Sci.*, vol. 7, p 293-315.
- 81 Benim A.C, Syed K.J, Laminar flamelet modelling of turbulent premixed combustion, *Applied-Mathematical-Modelling*, 1998, vol. 22 (1-2), p. 113-136
- 82 Law C, Sung C, Structure, aerodynamics and geometry of premixed flamelets, *Prog. Energy Combust. Sci.*, vol. 26, 2000, p. 459-505.
- 83 Rogg, B., and Wang, W., 1978-2002. RUN-1DL. The Laminar Flame and Flamelet Code. Lehrstuhl für Stromungsmechanik, Institut für Thermo- und Fluidodynamik, Ruhr-Universität Bochum, D44780 Bochum, Germany.
- 84 Rogg, B., 1993 "RUN-1DL: The Cambridge Universal Laminar Flamelet Computer Code," *Reduced Kinetic Mechanisms for Applications in Combustion Systems*, C. N. Peters and B. Rogg, Eds., Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg. p 350
- 85 Lamoureux N., Djebaili-Chaumeix N., Paillard C., Mesures par la méthode de la bombe sphérique de vitesses normales de combustion des mélanges pauvres hydrogène-air dilués. Influence de la vapeur d'eau. Recherche d'un diluant substitutif, rapport d'avancement du 17 juillet 2000, contrat CEA. IPSN 40.709B 056970SM
- 86 Bird R, Stewart W, Lightfoot E, *Transport Phenomena*, John Wiley & Sons, Inc., 1960
- 87 Dowdy D, Smith D, Taylor S, Williams A, *Proc. Combust. Inst.*, vol. 23, 1990, p. 325-332.
- 88 Brown M.J, McLean I.C, Smith D.B, Taylor S.C, Markstein lengths of CO/H<sub>2</sub>/air flames using expanding spherical flames, *Twenty-Third Symposium (International) on Combustion*, *Proc. Combust. Inst.*, vol. 26, p 875-881, 1996.

- \_\_\_\_\_
- 89 Lamoureux N, Djebaili-Chaumeix N, Paillard C.E, Laminar flame velocity determination for H<sub>2</sub>-air-He-CO<sub>2</sub> mixtures using the spherical bomb method, *Exp. Therm. Fluid Sci.*, Vol. 27, N°4, p 385-393, 2003.
- 90 Lamoureux N, Djebaili-Chaumeix N, Paillard C.E, *J. Loss Prevention* (2003) in press
- 91 Liu D., MacFarlane R, *Combust. Flame*, vol. 49, p. 59-71 (1983).
- 92 Koroll G, Kumar R, Bowles E, *Combust. Flame*, vol. 94, p. 330-340 (1993).
- 93 Egolfopoulos F, Law C, in *Proceedings of the Twenty-Third Symposium (International) on Combustion*, The Combustion Institute, Pittsburgh, PA, p. 333-340 (1990).
- 94 Raman K, *Laminar Burning Velocities of Lean Hydrogen-Air Mixtures*, Explosion Dynamics Laboratory Report FM97-15 (1998).
- 95 Aung K, Hassan M, Faeth G, *Combust. Flame*, vol. 109, p.1-24, 1997.
- 96 Kee R, Rupley F, Miller J, *Chemkin-II : A Fortran Chemical Kinetics Package for the Analysis of Gas Phase Chemical Kinetics*, SAND89-8009B
- 97 Kee R, Grcar J, Smooke M, Miller J, *A FORTRAN program for modeling steady laminar one-dimensional premixed flames*, Sandia report, SAND85-8240, September 1993
- 98 Kee R, Dixon-Lewis G, Warnatz J, Coltrin M, Miller J, *A FORTRAN computer code package for the evaluation of gas-phase multicomponent transport properties*, sandia report, SAND86-8246, May 1993
- 99 Sun C, He L, Law C.K, *Dynamics of weakly stretched flames: quantitative description and extraction of global flame parameters*, *Combust. Flame*, vol. 118, p 108-128, 1999.
- 100 Kim T, Yetter R, Dryer F, *Proc. Combust. Inst*, vol. 25, 1990, p. 471-478.
- 101 Gavrikov A, Bezmelnitsyn A, Leliakin A, Dorofeev S, *Proc. of The International Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems*, July 2001, Seattle
- 102 Bowman, Hanson, Davidson, Gardiner, Lissianski, Smith, Golden, Frenklach, Goldenberg, [http://www.me.berkeley.edu/gri\\_mech/](http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/) .
- 103 Gavrikov A, Bezmelnitsyn A, Leliakin A, Dorofeev S, *Proc. of The International Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems*, July 2001, Seattle
- 104 Poinot T, *Combust. Flame*, vol. 113, 1998, p. 279-281.
- 105 Aung K, Hassan M, Faeth G, *Combust. Flame*, vol. 109, 1997, p. 1-24.
- 106 Davis S, Searby G, *The Use of Counterflow Flames for the Evaluation of Burning Velocities and Stretch Effects in Hydrogen/Air Mixtures*, *Proceedings of The Second Mediterranean Combustion Symposium*, 6-11 January 2002, Sharm El-Sheikh, Egypt, p. 645-654
- 107 Searby G, Quinard J, *Combust. Flame*, vol. 82, 1990, p. 298-311.
- 108 Dorofeev S, Kuznetsov M, Alekseev V, Efimenko A, Bezmelnitsyn A, Yankin Y, Breitung W., *Effect of scale and mixture properties on behavior of turbulent flames in obstructed areas*, FZKA-6268, IAE-6127/3, 1999
- 109 Yankin Y, Breitung W, *Effect of scale and mixture properties on behaviour of turbulent flames in obstructed areas*, Report FZKA-6268. Karlsruhe: Forschungszentrum Karlsruhe [preprint IAE-6127/3, RRC Kurchatov Institute, Moscow], 1-26 (1999).

- ---

110 Dorofeev S, Efimenko A, CREBCOM code system for description of gaseous combustion, 1998, Russian Research Center "Kurchatov Institute", Moscow, 123182, Russia.