

TRANSFERTS THERMIQUES. — *Aspects mathématiques d'un modèle de flamme simple.*
Note (*) de **Vincent Giovangigli**, présentée par Georges Duvaut.

On étudie certains aspects mathématiques d'un modèle monodimensionnel de flamme laminaire, prémélangée, avec une réaction irréversible exothermique $rA \rightarrow B$, et éventuellement des pertes de chaleur.

THERMAL TRANSPORTS. — Some Mathematical Aspects of a Simple Flame Model.

We study from a mathematical point of view a one dimensional model of a premixed laminar flame, with a simple irreversible exothermic reaction $rA \rightarrow B$, and eventually heat losses.

I. ÉQUATIONS ET NOTATIONS. — On considère une flamme laminaire, prémélangée, stationnaire, se propageant dans un tube, idéalisée en un modèle unidimensionnel et s'appuyant sur un brûleur placé à l'origine.

On choisit une cinétique chimique simplifiée en une réaction $rA \rightarrow B$ d'ordre r , avec une loi de type Arrhenius.

On permet éventuellement aux gaz d'échanger de la chaleur avec les parois du tube en introduisant un terme de perte dans l'équation de conservation de l'énergie.

Dans le cas où les pertes de chaleur sont nulles, les deux inconnues température et concentration sont liées par une relation affine et l'étude du système se réduit à une équation.

On fait les hypothèses classiques pour l'étude des flammes laminaires (pression constante, pas de viscosité, pas de thermodiffusion) (cf. Margolis [2]).

On introduit les notations suivantes : la réaction est $rA \rightarrow B$:

u , concentration massique de A;

r , ordre de la réaction $r > 0$;

t , température réduite, $t = T - T_0 / T_1 - T_0$;

$\hat{g}(t)$, fonction de t : $\hat{g}(t) = CT^a \exp(-E/RT)$;

$g(v)$, $g(v) = \hat{g}(1-v)$;

$tf(t)$, fonction de perte d'énergie;

x , abscisse réduite.

Le domaine d'intérêt physique est $0 \leq t \leq 1$ et $0 \leq u \leq 1$.

On prolonge g , \hat{g} et f hors de ce domaine de façon à ce que :

$$0 < m' \leq g \leq M', \quad 0 < m'' \leq f \leq M''$$

et g , \hat{g} , f lipchitziennes.

On pose $s = \inf(1, r)$ et on introduit $M > 0$ tel que l'application $y \rightarrow g(y)y^r - My^s$ soit strictement décroissante sur $[0, 1]$.

Les dérivations par rapport à x sont notées « ' ». Les équations sont :

$$(P) \quad u'' - u' = g(u)u^r,$$

pour le problème sans perte de chaleur, et :

$$(S) \quad \begin{cases} t'' - t' = -\hat{g}(t)u^r + tf(t), \\ u'' - u' = \hat{g}(t)u^r \end{cases}$$

s'il y a des pertes (on a : $u^r = (u/|u|)|u|^r$ et $0^r = 0$).

L'intervalle d'étude peut être $[0, l]$ ou $[0, +\infty[$ avec les conditions aux limites :

$$\begin{array}{ll}
 (1) & -u'(0) = 1 - u(0), \quad u'(l) = 0, \\
 (2) & -u'(0) = 1 - u(0), \quad \lim_{+\infty} u = 0, \\
 (3) & \begin{cases} -u'(0) = 1 - u(0) \\ -t'(0) = -t(0) \end{cases} \quad \begin{cases} u'(l) = 0, \\ t'(l) = 0, \end{cases} \\
 (4) & \begin{cases} -u'(0) = 1 - u(0) \\ -t'(0) = -t(0) \end{cases} \quad \begin{cases} \lim_{+\infty} u = 0, \\ \lim_{+\infty} t = 0. \end{cases}
 \end{array}$$

Remarque 1. — On a supposé le nombre de Lewis du mélange égal à 1, mais ceci n'affecte pas les résultats obtenus pour (S) dans III.

Remarque 2. — Les conditions aux limites en $+\infty$ sont les seules possibles, car (P) n'a qu'un point singulier $(u, u') = (0, 0)$ et (S) n'en a qu'un $(u, t, u', t') = (0, 0, 0, 0)$.

Remarque 3. — Par solution d'un des problèmes (P) (1), P (2), S (3), (S) (4), entend les solutions classiques, c'est-à-dire de classe au moins 2.

Remarque 4. — On peut se donner d'autres conditions aux limites du type « mixte » :

$$a \frac{du}{dn} + b(u - c) = 0,$$

et en particulier :

$$\begin{cases} t(0) = 0 \\ t'(l) = 0 \end{cases} \quad \text{ou} \quad \begin{cases} t(0) = 0, \\ \lim_{+\infty} t = 0, \end{cases} \quad \text{cf. Margolis [2].}$$

II. LES PROBLÈMES (P) (1) ET (P) (2).

PROPOSITION 1. — Toute solution u de (P) (1) Resp. (P) (2) est telle que $0 \leq u < 1$ ($0 < u < 1$ si $r \geq 1$) et est décroissante, et strictement décroissante si $r \geq 1$.

THÉORÈME 1. — (P) (1) Resp. (P) (2) a une plus grande et une plus petite solution éventuellement confondues [Resp. une unique solution];

La suite définie par :

$$\begin{aligned}
 u_0 = 1 \quad \text{et} \quad & u''_{n+1} - u'_{n+1} - M u_{n+1}^s = g(u_n) u_n^r - M u_n^s, \\
 & -u'_{n+1}(0) = 1 - u_{n+1}(0), \\
 & u'_{n+1}(l) = 0 \quad [\text{Resp. } u_{n+1} \text{ bornée}],
 \end{aligned}$$

décroit vers la solution maximale de (P) (1) [Resp la solution de (P) (2)].

La suite définie par :

$$\begin{aligned}
 v_0 = 0 \quad \text{et} \quad & v''_{n+1} - v'_{n+1} - M v_{n+1}^s = g(v_n) v_n^r - M v_n^s, \\
 & -v'_{n+1}(0) = 1 - v_{n+1}(0), \\
 & v'_{n+1}(l) = 0 \quad [\text{Resp. } v_{n+1} \text{ bornée}],
 \end{aligned}$$

croit vers la solution minimale de (P) (1) [resp. vers la solution de (P) (2)].

Remarque 5. — On a en fait, pour (P) (2) :

$$\lim_{+\infty} u_n = l_n \quad \text{avec } l_0 = 1 \quad \text{et} \quad -M l_{n+1}^s = g(l_n) l_n^r - M l_n^s,$$

$$\lim_{+\infty} v_n = 0.$$

Pour (P) (1) il n'y a pas toujours unicité, cf. Amundson-Luss [9] (cas $r = 1$).

PROPOSITION 2. — Soit u la solution de (P) (2).

Si $0 < r < 1$:

$$x \geq \frac{2}{(1-r)g(1)(1-(g(1)(1+r)/2))^2} \Rightarrow u(x) = 0.$$

Si $r = 1$:

$$\forall x > 0, \quad u(x) > 0$$

et :

$$u(x) \sim (\text{Cte}) \exp\left(\frac{1 - \sqrt{1 + 4g(0)}}{2} x\right).$$

Si $r > 1$:

$$\forall x > 0, \quad u(x) > 0$$

et :

$$u(x) \sim \left(\frac{1}{g(0)(r-1)}\right)^{1/(r-1)} \frac{1}{x^{1/r-1}},$$

pour le cas $0 < r < 1$, on modifie une démonstration de [6] Diaz-Hernandez et pour $r > 1$, on utilise [5] Taliafero avec le changement de variable $y = e^x$.

Remarque 6. — La méthode du théorème 1 peut s'adapter aux modifications de la remarque 4.

III. LES PROBLÈMES (S) (3) ET (S) (4).

PROPOSITION 3. — Toute solution (u, t) de (S) (3) [Resp. (S) (4)] est telle que :

$$0 \leq u \leq 1 \quad \text{et} \quad 0 \leq t \leq 1,$$

$$0 \leq u + t \leq 1,$$

avec des inégalités strictes si $r \geq 1$, et u et $u + t$ sont décroissantes, strictement décroissantes si $r \geq 1$. On introduit alors $K : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ continue, bornée, impaire avec :

$$\forall y \in [0, 1], \quad K(y) = y^r.$$

On considère le problème variationnel suivant :

$$E = H^1(]0, 1[) \times H^1(]0, 1[),$$

$$A : E \rightarrow E'$$

dual, définie par :

$$\langle A(u, t), (a, b) \rangle = \int_0^1 (u' a' + t' b' + u' a + r' b) dx$$

$$+ \int_0^1 [\hat{g}(t) u^r a + \{-\hat{g}(t) K(u) + t f'(t)\} b] dx + (u(0) - 1) a(0) + t(0) b(0).$$

A est bien défini car $H^1(]0, l[)$ s'injecte dans $C^{1/2}(]0, l[)$ (cf. Necas [7] p. 72).

PROBLÈME VARIATIONNEL (V). — Trouver $(u, t) \in E$ tel que $\forall (a, b) \in E, \langle A(u, t), (a, b) - (u, t) \rangle \geq 0$.

THÉORÈME 2. — Les problèmes (S) (3) et (V) sont équivalents.

THÉORÈME 3. — Le problème (V) a au moins une solution (on utilise [1] Lions p. 247, et on montre que A est pseudo-monotone coercif).

Remarque 7. — Il peut y avoir plusieurs solutions (cf. [3] Heinemann-Poore).

Remarque 8. — La méthode variationnelle s'adapte aux modifications de la remarque 4.

Remarque 9. — Même si l'on change de variable dans (S) (3) en prenant $y = e^x$ comme nouvelle variable, la formulation variationnelle associée ne correspond pas à la stationnarité d'une fonctionnelle.

Remarque 10. — On peut utiliser également une méthode de point fixe, en utilisant [4] Schmidt p. 270-272.

THÉORÈME 4. — Le problème (S) (4) a au moins une solution (on utilise une suite de solutions (u_n, t_n) de (S) (3) sur $[0, n]$ dont on extrait une sous-suite qui converge dans $C^2[0, j]$ pour tout $j \in \mathbb{N}^*$).

Remarque 11. — La méthode s'adapte aux modifications de la remarque 4.

CONCLUSION. — (i) Les méthodes utilisées peuvent servir pour des calculs numériques;

(ii) pour une réaction irréversible d'ordre r , $rA \rightarrow B$, si $0 < r < 1$ il y a combustion totale au bout d'une abscisse finie, si $r = 1$ la concentration de A décroît exponentiellement, si $r > 1$ elle décroît algébriquement;

(iii) enfin, tous les paramètres de l'écoulement étant fixés, on peut obtenir plusieurs profils de concentration et température qui sont solutions des équations.

(*) Remise le 1^{er} mars 1982, acceptée le 29 mars 1982.

[1] J. L. LIONS, *Quelques méthodes de résolution des problèmes aux limites non linéaires*.

[2] MARGOLIS, *Theoretical Analysis of Steady non Adiabatic Premixed Laminar Flames*, [Quarterly of Applied Mathematics, p. 61, April 1980].

[3] HEINEMANN et POORE, *Numerical Hopf Bifurcation Techniques and the Dynamics of the Tubular Reactor model*, Technical summary report 2136, University of Wisconsin, 1980.

[4] K. SCHMIDT, *Non Linear Analysis Theory, Methods and Applications*, 2, (3), 1978, p. 263.

[5] TALIAFERRO, *Journal of Math. Analysis and Applications*, 66, 1978, p. 95.

[6] DIAZ et HERNANDEZ, *On the Existence of a Free Boundary for a Class of Reaction Diffusion Systems*, [M.R.C. technical summary report, 1982 (à paraître)].

[7] J. NECAS, *Les méthodes directes en théorie des équations elliptiques*, Masson.

[8] NOUSSAIR, *Journal of Differential Equations*, 41, 1980, p. 334.

[9] LUSS-AMUNDSON, *Quantitative and Qualitative Observations on the Tubular Reactor*, (Canadian Journal of Chem Eng., 46, 1968).

8, rue Cantagrel, 75013 Paris.