

# PC1 : Théorie de l'explosion thermique selon Semenov et Frank-Kamenetskii

## 1 Introduction

La petite classe concerne la modélisation mathématique des phénomènes d'explosion. Lorsque l'on étudie l'évolution de la composition chimique et de la température d'un réservoir rempli de matériel énergétique fluide, afin de savoir s'il existe un risque d'emballement thermique puis d'explosion<sup>1</sup>, on peut attaquer le problème en étudiant le couplage de l'hydrodynamique et la chimie/thermique associée aux réactions qui se produisent dans le milieu [3]. Cependant, avant de se tourner vers un ordinateur pour faire de la simulation numérique, il s'agit de choisir au sein d'une hiérarchie de systèmes simplifiés qui prennent en compte divers phénomènes physiques ou chimiques; ce choix implique alors une gamme d'échelles caractéristiques et on doit en général avoir une idée sur la structure mathématique du système et apporter une compréhension précise sur la dynamique du système et son comportement qualitatif (on travaille en général dans une limite incompressible ou faiblement thermiquement compressible décrite par les équations de Oberbeck-Boussinesq), avant de pouvoir le simuler. Cependant, cette compréhension repose sur deux ingrédients clefs : 1- savoir identifier les bonnes hypothèses de modélisation permettant de conduire une analyse rapide et pertinente du comportement qualitatif et donc de travailler avec le bon niveau de modélisation, 2- connaître la théorie des systèmes dynamiques afin de comprendre les possibles comportements du système que l'on étudie.

Avant d'entrer dans le vif du sujet, il est important d'avoir quelques repères historiques afin de savoir comment et quand ce type de théorie a été introduit et les difficultés qu'ont dû vaincre les scientifiques pour y arriver. Les élèves intéressés pourront consulter [7] et [1].

### 1.1 Quelques repères historiques

La petite classe se focalise plus particulièrement sur les réactions explosives. Leurs principales caractéristiques ont été étudiées au milieu du XIXème siècle par Van't Hoff<sup>2</sup> et Bunsen<sup>3</sup>. Elles présentent la particularité d'avoir un taux de réaction qui dépend de manière non-linéaire et *forte* de la température (par opposition aux réactions lentes dont la dépendance est faible). Cette propriété de forte dépendance est due à une grande énergie d'activation de la réaction de combustion; elle se couple en général à une forte puissance thermique de la réaction. Dans ces conditions, un phénomène d'autocatalyse thermique peut se produire, provoquer l'emballement de la réaction et une très forte augmentation de la température; ce phénomène est appelé *explosion thermique*. Divers travaux expérimentaux ont alors conduit Nikolay N. Semenov<sup>4</sup> à développer la théorie de l'explosion thermique dans les années 1920 pour le cas d'un réacteur homogène [2]. Même s'il est chimiste, il a

---

1. Nous avons travaillé avec SME-SNPE il y a quelques années de cela pour étudier les limites d'explosion de ce type de réservoir a des fins de sécurité. En 2011, SME (et sa filiale Roxel) est racheté par Safran puis est fusionnée avec Snecma Propulsion Solide pour créer Herakles, qui sera ensuite absorbée dans ArianeGroup.

2. Jacobus Henricus van 't Hoff (1852-1911), est un chimiste néerlandais prix Nobel de chimie en 1901. Ses principaux travaux de recherche en chimie théorique et physique ont concerné l'écriture et la modélisation des réactions en prenant systématiquement en compte les données thermodynamiques, la caractérisation des équilibres chimiques et des vitesses de réaction. Il est un précurseur d'une chimie théorique rigoureuse et a contribué à la création de la chimie physique telle que nous la connaissons aujourd'hui.

3. Robert Wilhelm Bunsen (1811-1899) est un chimiste allemand, qui a donné son nom au bec Bunsen.

4. Savant russe (1896-1986), prix Nobel de chimie de 1956, partagé avec Cyril Norman Hinshelwood, lauréat de la médaille d'or Lomonosov de l'Académie des sciences d'URSS (1970).

travaillé aux interfaces des disciplines (mathématique, physique,...) dans la pure tradition russe de l'époque. Ses travaux couvrent principalement l'étude des mécanismes de transformation chimique et en particulier une étude exhaustive de la théorie des réactions en chaîne, avec des applications en particulier aux processus de combustion. David A. Frank-Kamenetskii<sup>5</sup> a ensuite repris cette théorie dans le cas non-homogène et proposé un traitement exhaustif dans un certain nombre de cas [4, 5]<sup>6</sup>. Invité par Semenov, à qui il avait envoyé une lettre sur la thermodynamique chimique, il a travaillé pendant sept ans de 1934 à 1941 à l'Institut de Chimie Physique de l'Académie des Sciences de Russie fondé par Semenov sur les problèmes d'explosion thermique et rencontré une autre figure de la communauté Russe de la combustion : Yakov Borisovich Zel'dovich<sup>7</sup>, avec qui il deviendra très ami.

Le but de la Petite Classe est d'introduire ces théories et de saisir les mécanismes de base de couplage entre le terme source thermique issu de la réaction chimique, la conduction thermique et les pertes thermiques au bord des domaines considérés. On cherche à obtenir les *conditions critiques d'explosion*, i.e. les valeurs limites de certains paramètres qui déterminent si le phénomène d'explosion a lieu ou non. Finalement, le dernier point que nous aborderons sera le couplage entre l'explosion thermique et la convection naturelle en présence du champ de gravitation. Ces études sont importantes et trouvent de nombreuses applications dans la détermination des conditions de sécurité pour le stockage de matières dangereuses, comme les matériaux énergétiques que l'on utilise en propulsion fusée par exemple. Le but de cette petite classe est aussi, dans le contexte d'un exemple typique, de comprendre les divers comportements associés à une hiérarchie de systèmes dynamiques modélisant un même phénomène physique, la structuration de sa dynamique autour de ses points critiques et l'influence des notions de stabilité/bifurcation sur le comportement du système.

Dans cette étude, nous nous contentons de considérer des phénomènes explosifs localisés au sein d'un réacteur dans une vision moyenne homogène, mais nous ne traitons pas leur propagation car il s'agit d'un problème essentiellement plus difficile qui nécessite de prendre en compte les effets de densité volumique de masse et de pression puisque des ondes de chocs ou de détonations peuvent se former. On s'intéressera plus tard dans le cours aux modèles de déflagration à pression constante qui décrivent la propagation d'une flamme à faible vitesse par rapport à la vitesse du son. L'étude fondatrice dans ce domaine date de 1928 avec les travaux de Zel'dovich [2, 7]. Pour la présentation, nous nous inspirons du livre [7].

**Notation :** On utilisera les notations suivantes pour les dérivées,  $d_t\phi(t)$  désigne la dérivée temporelle de la fonction  $\phi(t)$ .

## 2 Explosion dans un réacteur homogène

### 2.1 Modèle simplifié 1 - explosion adiabatique

Le but de cette partie est de faire apparaître, dans le cadre d'une modélisation minimale, l'échelle de temps du problème. On se place dans le cadre d'une chimie simple, c'est-à-dire, d'une chimie constituée d'une unique réaction globale irréversible "Combustible  $\rightarrow$  Produits". Le degré d'avancement de cette réaction est donné par la variable fraction massique de combustible mise à l'échelle :  $Y(t)$ ; elle vaut 1 à l'instant initial quand le fuel n'a pas encore commencé à réagir et 0 quand tout le fuel présent dans le réacteur a été consommé en produits et en source thermique. La température du réacteur à l'instant initial est notée  $T_0$  et évolue du fait de la réaction chimique : on note  $T(t)$  la température à l'instant  $t$ . L'évolution de la fraction massique  $Y(t)$  et de la température  $T(t)$  est décrite par un système de deux équations différentielles ordinaires. Elles font intervenir la vitesse de la réaction qui dépend de manière non-linéaire de la température. Ce modèle, donné pour décrire l'évolution du réacteur, est

5. Savant russe (1910-1970) dans les domaines de la physique et chimie théorique.

6. Les personnes souhaitant consulter le livre peuvent voir avec M. Massot

7. Savant russe (1914-1987), est un astrophysicien et physicien théoricien soviétique. Il développa la théorie des réactions en chaîne. Il joua un rôle important dans le développement de l'arme nucléaire et thermonucléaire soviétique. Il fit d'importantes contributions dans les champs de l'adsorption et de la catalyse, des ondes de chocs, de la physique nucléaire, de la physique des particules, de l'astrophysique, de la cosmologie et de la relativité générale.

valable pour  $Y \in [0, 1]$  et  $T \in [T_0, T_b]$ ; il s'écrit :

$$d_t Y = -B e^{-\frac{E}{RT}} Y, \quad (1)$$

$$d_t T = T_r B e^{-\frac{E}{RT}} Y. \quad (2)$$

$B$  est le facteur de fréquence (homogène à l'inverse d'un temps),  $E$  est l'énergie d'activation de la réaction,  $T_b$  la température du mélange lorsque tout le fuel est consommé; cette température est associée à une enthalpie de réaction, à la capacité thermique du milieu et à une quantité de fuel présente dans le réacteur. On suppose dans ce problème que la réaction est exothermique et donc que  $T_r = T_b - T_0 > 0$ . Par ailleurs  $B$ ,  $E$  et  $R$  sont des constantes strictement positives. On ne prend en compte, dans ce modèle, que le chauffage du milieu par la réaction et l'on suppose que le système est isolé thermiquement de l'extérieur; on parle alors d'explosion thermique adiabatique.

**2.2.1** Le but de cette question est d'obtenir des renseignements sur la structure qualitative de la solution du système (1-2).

**2.2.1.a** Montrer que, du système (1-2), on peut déduire une équation sur une quantité  $H$ , combinaison linéaire de  $Y$  et  $T$ , qui se conserve au cours du temps. Donner la valeur de  $H$  et en déduire une équation autonome sur la variable  $Y(t)$  :

$$d_t Y = \Phi(Y),$$

où l'on explicitera la fonction  $\Phi$ . Proposer une équation différentielle autonome décrivant l'évolution de la température  $T(t)$  ne faisant pas intervenir  $Y$  sous la forme  $d_t T = \Lambda(T)$  et donner une expression explicite pour la fonction  $\Lambda(T)$ .

**2.2.1.b** Montrer que  $T(t)$  est monotone croissante bornée supérieurement par  $T_b$  et en déduire que la limite de  $Y(t)$  en  $+\infty$  est 0.

**2.2.1.c** Représenter graphiquement le comportement qualitatif de la solution.

**Note :** On peut démontrer l'existence d'une unique solution maximale  $(Y, T)(t)$ ,  $t > 0$ , du système (1-2), de régularité  $C^\infty$  globale en temps (existence d'un compact invariant), mais ce n'est pas l'objet de cette PC. Un corollaire de ce théorème est que si deux solutions sont confondues en un instant, alors elles le sont pour tout temps et les solutions ne se "croisent" pas dans l'espace où vit le triplet  $(t, Y, T)$ .

La structure de la non-linéarité  $\Lambda(T)$  dans cette dernière équation sur la température ne permet pas une résolution analytique. Nous allons donc utiliser deux caractéristiques des réactions de combustion, introduites sous la forme de deux hypothèses, et préciser le comportement qualitatif du système.

[H1] La réaction satisfait l'hypothèse des grandes énergies d'activation si  $E/(RT_0)$  est très grand devant 1, ce qui implique :

$$\beta = \frac{E}{RT_0} \gg 1. \quad (3)$$

[H2] La réaction satisfait l'hypothèse d'une grande enthalpie de réaction si  $T_r = T_b - T_0$  et donc :

$$\bar{T}_r = \frac{T_r}{RT_0^2/E} = \beta \frac{T_r}{T_0} \gg 1, \quad (4)$$

où  $RT_0^2/E$  est appelée la température de Frank-Kamenetskii et est notée  $T_{FK}$ .

**2.2.1.g** On se place dans le cas où  $T_b = 3000\text{K}$ ,  $T_0 = 400\text{K}$ . Représenter sur deux graphiques les fonctions  $T \rightarrow \Lambda(T)$  pour  $\beta = 30$  et  $\beta = 100$ , et pour  $T \in [T_0, T_b]$ . (Afin de pouvoir comparer les deux non-linéarités, on divisera la fonction par sa valeur maximum  $\Lambda_{\max}$  sur l'intervalle  $[T_0, T_b]$ ). En comparant les valeurs de  $\Lambda(T)/\Lambda_{\max}$  pour  $T = 1000\text{K}$  et pour  $T = 2400\text{K}$ , dans les deux situations et en observant les graphiques, expliquer ce que signifie "une forte non-linéarité dépendant de l'énergie d'activation".

**2.2.2** Nous allons maintenant étudier un modèle approché pour le système (1-2).

**2.2.2.a** Adimensionner l'équation vérifiée par la température et écrire pour cela une équation sur la température réduite  $\Theta = (T - T_0)/T_{FK}$ . Cela revient à utiliser comme température de référence la température initiale et comme échelle de variation, la température de Frank-Kamenetskii.

**2.2.2.b** Montrer que, sous les hypothèses [H1] et [H2], et tant que  $\Theta \ll \beta$ ,  $\Theta$  peut être approchée par une fonction  $\tilde{\Theta}(t)$ , solution de l'équation différentielle :

$$d_t \tilde{\Theta} = \frac{1}{t_I} e^{\tilde{\Theta}}, \quad (5)$$

avec la condition initiale  $\tilde{\Theta}(0) = 0$ . Le paramètre  $t_I$  est appelé temps d'induction et l'on donnera son expression explicite en fonction de  $B$ ,  $R$ ,  $E$ ,  $T_b$  et  $T_0$ . Dans l'équation précédente, on a remplacé, sous l'hypothèse [H1], l'argument de l'exponentielle par  $\tilde{\Theta}$ . Reprendre cette approximation dans les variables dimensionnées et expliquer pourquoi on l'appelle "linéarisation de Frank-Kamenetskii".

**2.2.2.c** On pose  $\tau = t/t_I$ ; déduire de (5) l'équation différentielle sur  $\tilde{\theta}(\tau) = \tilde{\Theta}(t)$

$$d_\tau \tilde{\theta} = e^{\tilde{\theta}}, \quad (6)$$

Résoudre l'équation correspondante et donner une formule explicite pour  $\tilde{\theta}(\tau)$ .

**2.2.2.d** Décrire le comportement "explosif" de cette solution. Tracer l'évolution temporelle de la solution  $\tilde{\theta}(\tau)$ , pour  $\tau \in [0, 1[$ , et ceci selon deux échelles différentes pour l'axe des ordonnées : la première est telle que le maximum de l'axe des ordonnées est 5, et la seconde telle que le maximum est  $\beta$  (on prendra  $\beta$  égal à 30 pour l'exemple). Expliquer ces ordres de grandeur et décrire le comportement aux deux échelles. On appelle  $\tau_1$  le temps pour lequel  $\tilde{\theta}$  atteint la valeur de 5. Exprimer la différence relative entre  $\tau_1$  et 1. Commenter.

**2.2.3** Il s'agit de montrer que l'équation simplifiée (6) est un "bon modèle" et d'en déduire le comportement qualitatif général de la solution de (1-2)

**2.2.3.a** Si l'on travaille avec le modèle simplifié (6), montrer que la condition de validité  $\tilde{\theta} \ll \beta$  n'est par contraignante en utilisant la fin de la question 2.2.2. Que peut-on en déduire sur le comportement du système de départ sur l'intervalle  $[0, t_I[$ .

**2.2.3.b** Calculer la température correspondant au taux de réaction maximum, en valeur absolue, pour le système (1-2), sachant que le taux de réaction est le second membre de l'équation sur  $Y$  et vaut donc  $-B e^{-E/RT} Y$ . Comment se situe-t-elle par rapport à  $T_b$  ?

**2.2.3.c** Quel scénario peut-on déduire sur l'évolution du système (1-2) dans la mesure où le taux de réaction maximum est atteint dans un proche voisinage de  $t_I$  ?

**2.2.3.d** Caractériser l'évolution du système dans le plan des variables dimensionnées  $(Y, T)$ ,  $Y \in [0, 1]$  et  $T \in [T_0, T_b]$  (appelé aussi plan de phase). Tracer par ailleurs les fonctions  $Y(t)$  et  $T(t)$ . Décomposer l'évolution du système en trois étapes que l'on précisera. Que se passe-t-il pour la consommation de fuel (caractérisée par la fraction massique de fuel  $Y$ ) dans l'intervalle  $t \in [0, t_I[$  ? Interpréter l'hypothèse [H2].

**2.2.3.e** Que devient l'évolution du système quand l'énergie d'activation devient de plus en plus grande ?

**2.2.3.g** On choisit une application numérique avec  $T_0 = 400K$ ,  $T_b = 3000K$ ,  $\beta = 30^8$ . On donnera la valeur de la température de Frank-Kamenetskii et on referra les diagrammes de la question 2.2.3.d en marquant les points particuliers suivants tels que

-  $t$  tel que  $\Theta = 5$ ,

-  $t$  tel que le taux de réaction est à son maximum.

Commenter. (Remarque : les données numériques ne permettent pas de calculer  $t_I$  explicitement ; les temps seront donc exprimés en pourcentage de  $t_I$ )

---

8. La valeur de  $\beta$  peut être de l'ordre de 50 ou 100 pour certaines réaction de combustion mais on choisit ici une valeur de 30 pour des raisons de commodité afin de faire les simulations de manière plus simple.

## 2.2 Modèle simplifié 2 - explosion avec prise en compte des pertes thermiques

Dans la partie précédente, l'absence de perte thermique au bord du réacteur engendre systématiquement l'explosion thermique car la température ne peut qu'augmenter et atteindre  $T_b$  (température de l'ordre de 3000K pour les réactions de combustion). Dans ces conditions, le modèle cesse d'être valide quand on arrive à de fortes températures dans des délais courts, car d'autres phénomènes rentrent alors en jeu (création d'ondes de pression, etc...). Nous levons ici l'hypothèse d'adiabaticité, mais conservons l'homogénéité spatiale. Dans un modèle plus réaliste que dans la partie précédente, les pertes thermiques à la frontière peuvent empêcher l'explosion si elles compensent le terme source issu de la réaction chimique. Il s'agit de caractériser les conditions d'explosion, c'est-à-dire dans quels cas les pertes thermiques à la frontière empêchent l'explosion et dans quel cas elles ne suffisent pas à limiter la croissance de la température du système.

Un modèle simple de perte, dans le cas d'un réacteur fermé, est de fixer la température à la paroi à la température de référence  $T_0$ . Le réacteur peut alors être modélisé par le nouveau système, pour  $t > 0$ ,  $T \in [T_0/2, 2T_b]$ ,  $Y \in [0, 1]$  :

$$d_t Y = -B e^{-\frac{E}{RT}} Y, \quad (7)$$

$$d_t T = T_r B e^{-\frac{E}{RT}} Y - \frac{1}{t_p} (T - T_0), \quad (8)$$

où  $t_p$  est un temps de transfert à la paroi, où on prend les mêmes données initiales que dans la sous section précédente. On suppose que les deux hypothèses [H1] et [H2] sont vérifiées.

**2.3.1** Nous nous intéressons brièvement au comportement qualitatif général des solutions du système pour  $Y \in [0, 1]$  et  $T \in [T_0/2, 2T_b]$ .

**2.3.1.a** Montrer que  $T > T_0$  sur l'intervalle  $]0, t_{\max}[$ , que la quantité  $H$  introduite dans la partie précédente n'est plus conservée au cours du temps par (7-8) en présence de pertes thermiques. Montrer qu'elle est majorée par la valeur obtenue pour  $H$  dans le cas adiabatique de la partie 2.2 et montrer que  $T < T_b$ . Conjecturer le comportement du système en temps grand.

**2.3.1.b** Donner le comportement qualitatif du système. Tracer la forme de  $Y(t)$  et  $T(t)$ . Adimensionner les équations (7-8) en utilisant le même adimensionnement que dans la partie précédente, et en prenant comme temps adimensionné  $\tau = t/t_I$  (donner  $d_\tau \tilde{Y}$ ,  $d_\tau \tilde{\Theta}$  en fonction de  $\tilde{Y}$  et  $\tilde{\Theta}$ ).

**2.3.2** Comme la quantité  $H$  n'est plus conservée, on ne peut plus se ramener à une seule équation et il subsiste alors le problème de la présence de la fraction massique dans l'équation sur  $\theta$  qui décrit l'influence de la consommation de fuel sur la vitesse de la réaction chimique.

**2.3.2.a** Montrer que, sous les hypothèses [H1] et [H2], l'équation sur  $\tilde{\Theta}$  peut être approchée par :

$$d_\tau \tilde{\theta} = e^{\tilde{\theta}} - q^-(\tilde{\theta}), \quad (9)$$

où  $q^-(\tilde{\theta}) = \alpha_0 \tilde{\theta}$  et donner l'expression de  $\alpha_0$ . Sur quel intervalle de temps peut-on considérer que l'équation précédente est représentative de la physique du système (7-8)? Quelle hypothèse implique son utilisation sur la consommation de fuel dans cet intervalle?

**2.3.2.b** Représenter sur un diagramme les graphes des deux fonctions  $e^{\tilde{\theta}}$  et  $q^-(\tilde{\theta})$  en fonction de  $\tilde{\theta}$  pour diverses valeurs de  $\alpha_0$ . Etudier les points stationnaires de l'équation (9) définis par  $e^{\tilde{\theta}} = q^-(\tilde{\theta})$ , en fonction du rapport  $\alpha_0 = t_I/t_p$ . Proposer trois scénarios. On donnera en particulier la valeur critique  $\alpha_{cr}$  de  $\alpha_0$  ainsi que la température  $\tilde{\theta}_{cr}$  du point stationnaire correspondant. Interpréter physiquement les trois cas. Relier  $\tilde{\theta}_{cr}$ , en variables dimensionnées, à la température de Frank-Kamenetskii. Commenter l'ordre de grandeur.

**2.3.2.e** Classifier et caractériser les diverses dynamiques possibles pour l'équation (9) en fonction de  $\alpha_0$  et de la température initiale. On étudiera en particulier les limites  $\alpha_0 \rightarrow 0$  et  $\alpha_0 \rightarrow +\infty$ .

**2.3.2.f** Que dire de la stabilité des points stationnaires quand ils existent (un point stationnaire est dit stable pour l'équation différentielle (9) si l'évolution d'une solution, dont la donnée initiale est prise dans un voisinage du point, est la convergence vers cet état stationnaire et instable dans le cas contraire)? Que se passe-t-il lorsque la température initiale est suffisamment grande?

**La section 2.3.3 est facultative et proposée avec une orientation MAP**

**2.3.3** Parmi les divers scénarios proposés, certains correspondent au comportement du système (7-8) et d'autres non. Nous allons étudier ce point dans cette sous-partie.

**2.3.3.a** Montrer que cette correspondance est effective dans le cas  $\alpha_0 \rightarrow 0$  et faire le lien avec la partie 2.2.

**2.3.3.b** Pour  $\alpha_0 > \alpha_{cr}$ , montrer que l'existence d'un état stationnaire vers lequel converge la solution de (9) implique une borne sur la température réduite  $\Theta$  pour le système (7-8) et garantit la non-explosion si la donnée initiale n'est pas trop élevée.

**2.3.3.c** Dans le cas où il y a explosion pour l'équation (9), c'est-à-dire pour  $\alpha_0 < \alpha_{cr}$ , on estime  $\bar{\tau}_I$ , le temps d'induction non-adiabatique, par :

$$\bar{\tau}_I \approx \int_0^{+\infty} \frac{d\tilde{\theta}}{e^{\tilde{\theta}} - q^-(\tilde{\theta})}. \quad (10)$$

Justifier la borne d'intégration en utilisant les hypothèses.

**2.3.3.c** On cherche la limite de ce temps quand  $\alpha_0$  tend vers  $\alpha_{cr}$  par valeur inférieure. Pour cela on pose  $\tilde{\theta} = \tilde{\theta}_{cr} + \chi$  et  $\alpha_0 = \alpha_{cr}(1 - \xi)$  et l'on suppose  $\xi \ll 1$  et donc  $\chi \ll 1$  (cette dernière estimation, que l'on admettra, vient du fait que lorsque  $\xi \ll 1$ , la température s'établit en un temps de l'ordre de 1 autour de  $\theta = 1$  et reste dans ce voisinage pendant une grande partie de la dynamique). Donner une estimation de  $\bar{\tau}_I$  en fonction de  $\xi$ , pour  $\xi$  petit et montrer que  $\bar{\tau}_I$  tend vers l'infini quand  $\xi$  tend vers 0 (indication : on écrira l'intégrale en fonction de  $\chi$  et  $\xi$ , puis on remplacera  $e^\chi$  par  $1 + \chi + \chi^2/2$  puisque  $\chi$  supposé petit et enfin on utilisera l'égalité  $\xi + \chi\xi + \chi^2/2 \approx \xi + ((\chi + \xi)/\sqrt{2})^2$ ). En déduire la dynamique de l'explosion quand l'on s'approche des conditions critiques par valeur inférieure, et la représenter sur un diagramme  $(\tau, \tilde{\theta}(\tau))$ .

**2.3.3.d** Que conclure sur le modèle (9) au voisinage des conditions critiques en terme de l'hypothèse [H2] : "on néglige la consommation de fuel et l'on suppose  $Y(t) \approx 1$  sur  $t \in [0, t_I]$ " ?

**La section 2.3.4 est facultative et proposée avec une orientation MEC**

**2.3.4** Nous avons pour le moment étudié le second modèle (9) qui ne prend en compte que les pertes thermique et néglige la consommation. Nous revenons donc sur un troisième modèle impliquant les deux et qui se déduit de (7-8) uniquement par linéarisation de Frank-Kamenetskii :

$$d_\tau \bar{Y} = -\frac{1}{\bar{T}_r} e^{\bar{\theta}} \bar{Y}, \quad (11)$$

$$d_\tau \bar{\theta} = e^{\bar{\theta}} \bar{Y} - \alpha_0 \bar{\theta}, \quad (12)$$

En fait il s'agit de montrer que la restriction sur l'applicabilité du modèle quand on s'approche des conditions critiques n'a d'effet que dans un très petit voisinage inférieur de  $\alpha_{cr}$  et est de plus conservative, dans le sens où le modèle simplifié ne manquera jamais de prédire l'explosion quand le modèle complet la prédit.

**2.3.4.a** Dans le cas  $\alpha_0 = 0$ , étudier au moyen de simulation numériques la validité de la linéarisation de Frank-Kamenetskii en comparant les solutions de (7-8) et de (11-12). On, prendra comme paramètres numériques ceux fournis dans le notebook avec en particulier  $1/\bar{T}_r = 30$  et on fera varier  $\beta$ . Qu'observe-t-on ?

**2.3.4.b** En prenant  $1/\bar{T}_r = 30$ , représenter un diagramme des diverses évolutions temporelles possibles de la température et de la fraction massique de combustible dans le cas général du système (11-12) en fonction de  $\alpha_0$ .

**2.3.4.c** Donner l'évolution dans le plan de phase  $(Y, T)$  et faire le lien avec la partie 2.2, afin de synthétiser les scénarios possibles.

**2.3.4.d** Conclure cette étude en terme de validité des divers niveaux de modélisation.

## 2.3 Modèle simplifié 3 - explosion avec prise en compte de la convection

Dans la partie précédente, nous avons pris en compte les pertes thermique aux frontières du réacteur sous la forme d'un terme de puit proportionnel à la différence entre la température moyenne du réacteur, supposée homogène et la température ambiante restée à  $T_0$ . Frank-Kamenetskii avait levé cette hypothèse d'homogénéité et proposé un modèle sous la forme d'une équations aux dérivées partielles sur la température, pour laquelle on impose des conditions de Dirichlet au bord. Le flux de chaleur à la frontière est lié au gradient de température de la solution au bord du domaine et évolue au cours du temps en fonction de la solution. On reviendra dans le cours sur ce type de modèle dans le chapitre sur les systèmes spatialement étendus. Dans le cadre d'une couche de fluide d'épaisseur  $L$  et en présence de gravité, le fluide au centre s'échauffe du fait de la réaction exothermique et génère l'apparition de convection naturelle en présence d'un champ de gravitation, c'est-à-dire la mise en place de tourbillons de convection [3, 6]. Il s'avère que les flux de chaleur au bord dépendent de l'intensité de la convection dans le réacteur. Des simulations numériques directes des équations de Navier-Stokes ont montré [3] que l'explosion ne provient pas uniquement d'une absence de convection mais que certains régimes d'explosion se produisent à partir et à cause des régimes de convection.

On se propose ici de montrer l'influence de certains paramètres sur la dynamique du systèmes en introduisant une nouvelle variable au système que l'on a précédemment étudié, qui modélise l'intensité de la convection dans le réacteur, mais en restant dans l'hypothèse où l'on néglige l'influence de la consommation de combustible :

$$d_\tau \tilde{\theta} = e^{\tilde{\theta}} - \alpha(\Psi) \tilde{\theta} \quad (13)$$

$$d_\tau \Psi = -a \Psi (\Psi^2 + \tilde{\theta}_c - \tilde{\theta}) \quad (14)$$

où  $\Psi$  est un nombre positif qui caractérise l'intensité des phénomènes convectifs (le maximum de la fonction de courant par exemple) et où  $\tilde{\theta}_c$  est une température critique à partir de laquelle l'état d'équilibre  $\Psi = 0$  de la second équation devient instable et où un régime convectif se met en place. Cette température critique est associé à un nombre de Rayleigh critique comme dans le cas de la mise en place de la convection naturelle [3, 6]. Le paramètre  $a$  caractérise le taux de relaxation de la convection naturelle vers son état stable, que ce soit le repos ou le régime avec des tourbillons. Le taux de transfert de chaleur aux frontières du domaine dépend de l'intensité de la convection et prend la forme :

$$\alpha(\Psi) = \alpha_0(1 + \mu\Psi^2) \quad (15)$$

Pour la suite, un cas typique adimensionné sera étudié où l'on prend :  $a = 4.3$ ,  $\tilde{\theta}_c = 1.035$ ,  $\mu = 0.7$ ,  $\alpha_0 = 2.7$ . On peut montrer que cela correspond à un des modèles étudiés dans [3]. Comme conditions initiales, on considérera soit  $(1.0, 0.01)$ ,  $(1.0, 0.5)$  ou encore  $(1.0, 1.1)$ , mais cela n'est pas exhaustif pour avoir l'ensemble des régimes.

**2.3.1** Que dire du modèle quand on considère  $\Psi = 0$  par rapport à ce qui précède. Rappeler ce qui caractérise ce modèle.

**2.3.2** Dans le cas où  $\alpha_0$  est plus grand que  $\alpha_{cr}$ , et que l'on a donc deux équilibres pour la première équation quand  $\Psi = 0$ , donner une idée du comportement du système et de l'influence de la prise en compte de la convection à l'aide de simulation du système via le notebook.

On pourra prendre  $\alpha_0 = 3$ . et expliquer/justifier qualitativement le comportement en temps long du système par rapport à l'étude précédente. Etudier l'influence de  $\tilde{\theta}_c$  sur la dynamique du système. Le fait de prendre en compte l'influence de la convection est-il ici pertinent au sens où il apporte de nouvelles informations sur le comportement du système ?

**2.3.3** On se place maintenant dans un cas où  $\alpha_0 = 2.7$ ,  $\tilde{\theta}_c = 1.01$ .

Préciser dans quel contexte on se trouve si  $\Psi = 0$ . Observer la dynamique du système dans ce cas au cours du temps et la décrire. Expliquer ce qui se passe physiquement dans cas et la différence avec le cas sans convection.

**2.3.4** A l'aide du curseur, et pour les trois données initiales indiquées, décrire le changement de dynamique que vous observez par rapport au cas initial lorsque l'on augmente le paramètre de bifurcation  $\tilde{\theta}_c$ .

**2.3.5.a** En reprenant l'étude de l'influence de  $\tilde{\theta}_c$ , que se passe-t-il ? Caractériser l'ensemble des données initiales qui mènent à un comportement oscillant et les données initiales menant à

l'explosion. On observe plusieurs types de dynamique, les décrire et interpréter ce qui se passe physiquement.

**2.3.4.b** On voit, comme sur les simulations directe des équations de la dynamique des fluides que l'on peut initier un régime d'explosion à partir d'une solution oscillante, y compris dans des régimes réputés comme non-explosifs si l'on se base sur les études précédentes. Conclure cette étude.

## Références

- [1] H. Berestycki, C.M. Brauner, P. Clavin, and C. Schmidt-Lainé. *Modélisation de la Combustion*. Images des Mathématiques. CNRS, 1996.
- [2] A.A. Berlin, Y.V. Frolov, and Y.G. Isaevich. The contribution of the Semenov Institute of Chemical Physics to the Science of Combustion : A historical review. In *Chemical Rocket Propulsion*, pages 1055–1068. Springer, 2017. Springer Aerospace Technology book series, De Luca L., Shimada T., Sinditskii V., Calabro M. (Editors).
- [3] T. Dumont, S. Génieys, M. Massot, and V. A. Volpert. Interaction of thermal explosion and natural convection : critical conditions and new oscillating regimes. *SIAM J. Appl. Math.*, 63(1) :351–372, 2002.
- [4] D. A. Frank-Kamenetskii. Towards temperature distributions in a reaction vessel and the stationary theory of thermal explosion. *Doklady Akad. Nauk SSSR*, 18, 1938.
- [5] D. A. Frank-Kamenetskii and N. Thon. *Diffusion and Heat Exchange in Chemical Kinetics*. Princeton University Press, 1955.
- [6] A. V. Getling. *Rayleigh-Bénard convection*, volume 11 of *Advanced Series in Nonlinear Dynamics*. World Scientific Publishing Co., Inc., River Edge, NJ, 1998. Structures and dynamics.
- [7] Ya. B. Zel'dovich, G. I. Barenblatt, V. B. Librovich, and G. M. Makhviladze. *The mathematical theory of combustion and explosions*. Consultants Bureau [Plenum], New York, 1985. Translated from the Russian by Donald H. McNeill.