



Contribution à l'extension d'un schéma incompressible pour les flammes à bas nombre de Froude - Pré-requis à la modélisation de l'incendie

Bertrand Sapa

► To cite this version:

Bertrand Sapa. Contribution à l'extension d'un schéma incompressible pour les flammes à bas nombre de Froude - Pré-requis à la modélisation de l'incendie. Sciences de l'ingénieur [physics]. ISAE-ENSMA Ecole Nationale Supérieure de Mécanique et d'Aérotechnique - Poitiers, 2011. Français. NNT : . tel-00605172

HAL Id: tel-00605172

<https://theses.hal.science/tel-00605172>

Submitted on 30 Jun 2011

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

THESE

Pour l'obtention du Grade de
DOCTEUR DE L'ECOLE NATIONALE SUPERIEURE DE MECANIQUE ET
D'AEROTECHNIQUE
(Diplôme National - Arrêté du 7 août 2006)

Ecole Doctorale :
Sciences et Ingénierie en Matériaux, Mécanique, Energétique et Aéronautique

Secteur de Recherche : Energétique, Thermique, Combustion

Présentée par :
Bertrand SAPA

Contribution à l'extension d'un schéma incompressible pour les flammes à bas nombre de Froude - Pré-requis à la modélisation de l'incendie

Directeur de thèse : **Hui-Ying WANG**

Soutenue le 8 Avril 2011
devant la Commission d'Examen

- Jury -

M.	P.A. SANTONI	Professeur à l'Université de Corse Pascal Paoli	Président
M.	D. MORVAN	Professeur à l'Université de la Méditerranée	Rapporteur
M.	L. VERVISCH	Professeur au CORIA, Rouen	Rapporteur
M.	J.P. GARO	Maître de Conférence à l'Université de Poitiers	Examineur
M.	L. GAY	Ingénieur Chercheur, EDF	Examineur
M.	D. LEMONNIER	Directeur de Recherche au CNRS, Poitiers	Examineur
M.	P. PLION	Ingénieur Chercheur, EDF	Examineur
M.	H.Y. WANG	Directeur de Recherche au CNRS, Poitiers	Examineur

AVANT-PROPOS

Ce travail de recherche a été effectué dans le cadre d'une collaboration entre la Branche Combustion de l'Institut P' et le département Mécanique des Fluides, Energie et Environnement d'EDF R&D.

Je remercie Henri-Noël Presles, directeur de l'Institut P', Isabelle FLour, chef du groupe Ecoulements Industriels Réactifs et Multiphasiques et Pascal Mialon, chef du département MFEE, pour m'avoir intégré à leur équipe de recherche. Je remercie également Jean-Pierre Vantelon à l'origine de cette collaboration et Gérard Labadie pour avoir accordé le financement de la thèse.

Je remercie Hui-Ying Wang d'avoir accepté de diriger cette thèse et pour le regard critique qu'il a su poser sur mes travaux.

Je remercie chaleureusement Laurent Gay et Pierre Plion, le premier, pour m'avoir fait confiance sur ce projet et pour ses conseils avisés, le second pour m'avoir suivi et guidé avec intérêt et enthousiasme pendant ces trois années.

Je remercie également chaleureusement Fatiha Nmira, arrivée au cours de ma thèse, qui m'a permis de porter une vision critique et constructive sur mes travaux à un moment où le doute embrumait la voie à suivre.

Je remercie Paul-Antoine Santoni qui a présidé la soutenance, Dominique Morvan et Luc Vervisch pour l'attention qu'ils ont portée à mon travail en acceptant d'en être rapporteur ainsi que les autres membres du jury Denis Lemonnier et Jean-Pierre Garo, qui ont accepté de juger mon travail.

Enfin, je remercie tous ceux qui m'ont aidé pendant ces trois années : les membres des équipes d'EDF qui m'ont aidé, en particulier Namane Méchitoua, les chercheurs du laboratoire avec qui j'ai pu échanger au cours de la thèse, les doctorants du laboratoire et d'EDF, en particulier Mathieu Guingo, Laëtitia Girault, Arnaud Foissac, Boris Arcen et Sana Khelifi, qui ont partagé mon bureau et supporté mes questions existentielles scientifiques et non scientifiques quotidiennes, Jocelyne Bardeau et Marie-Line Cazalon pour avoir fait avec mes demandes toujours tardives.

Résumé

Une première approche de la simulation des incendies est menée à l'aide du code CFD d'EDF R&D *Code_Saturne*. Une extension de son schéma incompressible et une adaptation des conditions limites libres sont développées afin de traiter des flammes à bas nombre de Froude instationnaires et dominées par la convection naturelle grâce à une modélisation URANS. La turbulence est traitée à l'aide d'un modèle $k - \varepsilon$ tenant compte de la gravité. La combustion est traitée à l'aide d'une réaction globale infiniment rapide et l'interaction avec la turbulence par une approche statistique présumant une fonction densité de probabilité. L'équation des transferts radiatifs est résolue à l'aide de la méthode des ordonnées discrètes. Les propriétés radiatives du milieu sont estimées à l'aide d'un modèle à larges bandes. Le modèle semi-empirique utilisé pour les suies tient compte des processus de nucléation, croissance, agglomération et oxydation. Le modèle est appliqué à des panaches thermiques et d'hélium, configurations proches des feux. Le gain minime apporté par les fermetures testées sur le modèle de turbulence suggère que le calcul des flux turbulents scalaires est plus important. En revanche, le gain lié au schéma faiblement compressible est considérable. Le modèle est ensuite appliqué à deux types de feu. Sur le feu de nappe, un maillage fin est nécessaire pour pallier un défaut de turbulence et obtenir une bonne prédiction sur les grandeurs caractéristiques. Cette conclusion est modérée par les résultats obtenus sur le feu de compartiment pour lequel les prédictions sont raisonnables malgré les maillages grossiers utilisés, le rayonnement des fumées et des parois ayant une forte influence.

Mots clés : modélisation numérique, dynamique des fluides, fluide dilatable, écoulement instationnaire, combustion, turbulence, rayonnement, suies

Abstract

As a first step for fire simulation, an extension of the incompressible scheme and adaptations for the free boundary limits have been developed in *Code_Saturne*, EDF R&D's fluid mechanic software. This numerical approach is aimed to handle unsteady low Froude number flames dominated by natural convection. The turbulence model is a $k - \varepsilon$ with gravity effects. The combustion model uses an infinitely fast one-step reaction with a presumed probability density function. The radiative transfer equation is solved with the discrete ordinates method. The radiative properties are computed thanks to a wide band model. Nucleation, growth, agglomeration and oxidation of soot are treated with a semi-empirical model. The model was applied to steady thermal plumes and a helium plume, configurations closed to fire. Benefits from tested closures on buoyant production term are negligible and suggest that closure of turbulent fluxes is more important. However, benefits from the weakly compressible scheme is significant, in particular on unsteady behaviour. The computed, time-averaged velocity and temperature profiles are compared with experimental data, and a relatively good agreement is attained. Then the model was applied to a pool fire and a compartment fire. With the pool fire, using a fine mesh is needed to balance a lack of turbulence production and get a good prediction on fire characteristics. This conclusion is moderate for the compartment fire. Although the mesh used is coarse, the predictions are reasonable, due to the strong influence of radiation from smoke and walls.

Key words : numerical simulation, fluid dynamics, weakly compressible fluid, unsteady flow, combustion, turbulence, radiative transfer, soot

Table des matières

Nomenclature	x
Table des figures	xv
Liste des tableaux	xix
Introduction	1
1 Phénoménologie du feu	7
1.1 Flamme de prémélange	7
1.2 Flamme de diffusion	8
1.3 Feux de nappe	10
1.4 Dégradation des combustibles	15
1.5 Feux de compartiment	17
1.5.1 L’allumage	18
1.5.2 La croissance ou pré-flashover	18
1.5.3 L’embrasement généralisé ou flashover	19
1.5.4 Le feu pleinement développé ou post-flashover	20
1.5.5 L’extinction	20
1.6 Influence de la ventilation	21
1.6.1 Feux bien ventilés	21
1.6.2 Feux sous-ventilés	22
2 Etat des connaissances relatives à la modélisation des flammes turbu- lentes de diffusion	25
2.1 Mécanique des fluides	26
2.2 Approches de modélisation de la turbulence	28
2.2.1 Direct Numerical Simulation	29
2.2.2 Large Eddy Simulation	30
2.2.3 Reynolds Average Navier-Stokes simulation	31
2.2.4 Ecoulements à masse volumique variable	32
2.3 Modélisation des flux turbulents	33
2.3.1 Modèles au second ordre	34

2.3.2	Modèles au premier ordre	35
2.3.3	Variances et dissipations scalaires	37
2.3.4	Modélisation de la turbulence dans l'incendie	38
2.4	Flammes laminaires de diffusion	41
2.4.1	Chimie de la combustion	41
2.4.2	Approximation de Schvab-Zeldovich	43
2.4.3	Types de cinétique chimique	44
2.5	Flammes turbulentes de diffusion	47
2.5.1	Interaction entre la combustion et la turbulence	47
2.5.2	Approches de modélisation	48
2.5.3	Synthèse de la combustion turbulente dans l'incendie	54
2.5.4	Estimation de la puissance libérée par une flamme	55
3	Modélisation du rayonnement	69
3.1	Equation des Transferts Radiatifs	70
3.2	Propriétés radiatives du milieu	73
3.2.1	Propriétés radiatives de la phase gazeuse	74
3.2.2	Propriétés radiatives des suies	76
3.3	Formation des suies	77
3.4	Interaction avec les autres phénomènes physiques	81
3.4.1	Interaction entre la combustion et le rayonnement	81
3.4.2	Interaction entre la turbulence et le rayonnement	82
3.4.3	Interaction entre la turbulence et les suies	83
3.5	Modélisation du rayonnement et des suies dans l'incendie	84
4	Extension d'un schéma incompressible pour les flammes turbulentes de diffusion à bas nombre de Froude	85
4.1	Présentation de <i>Code_Saturne</i>	85
4.1.1	Discrétisation spatiale	86
4.1.2	Discrétisation temporelle	87
4.1.3	Algorithmes de résolution	88
4.1.4	Conditions limites standard	89
4.2	Adaptation de <i>Code_Saturne</i> à la simulation de l'incendie	90
4.2.1	Conditions limites libres	90
4.2.2	Dilatation	91
4.3	Synthèse du modèle	93
5	Application aux panaches en milieu libre	95
5.1	Panache thermique stationnaire	96
5.1.1	Description du cas	97
5.1.2	Modélisation du terme de flottabilité G	99
5.1.3	Discussions	102
5.1.4	Effet de la dilatation thermique	111

5.1.5	Conclusions sur l'étude d'un panache thermique stationnaire	114
5.2	Panache thermique à bas nombre de Froude	115
5.2.1	Conditions de calcul	115
5.2.2	Sensibilité au maillage	116
5.2.3	Discussions	118
5.2.4	Conclusions sur l'étude d'un panache thermique à bas nombre de Froude	121
5.3	Panache d'hélium instationnaire	123
5.3.1	Description du cas	123
5.3.2	Sensibilité au maillage	125
5.3.3	Effet de la dilatation sur les grandeurs moyennes	128
5.3.4	Discussions	130
5.3.5	Conclusions sur l'étude d'un panache d'hélium instationnaire	139
6	Application aux flammes turbulentes de diffusion à bas nombre de Froude	141
6.1	Feu de nappe en milieu ouvert	142
6.1.1	Conditions de calculs	142
6.1.2	Sensibilité au maillage	144
6.1.3	Effet de la dilatation sur les grandeurs moyennes	150
6.1.4	Influence du terme de flottabilité	152
6.1.5	Influence du rayonnement	156
6.1.6	Critiques du modèle	159
6.1.7	Caractéristiques d'un feu	163
6.1.8	Conclusions sur l'étude d'un feu de nappe en milieu ouvert	166
6.2	Feu de compartiment	168
6.2.1	Conditions de calculs	168
6.2.2	Discussions	169
6.2.3	Conclusions sur l'étude d'un feu de compartiment	173
	Conclusion générale	175
	Perspectives	179
	Bibliographie	181
	Appendices	191
A	Détermination des paramètres de fonction densité de probabilité rectangle - pics de Dirac	193
B	Relations entre le taux de réaction pour $\tilde{Y}_P$ et le taux de dissipation scalaire	197
B.1	Cas d'une chimie quadratique	197
B.2	Cas général	200

C	Expression du taux de réaction obtenue par dérivation pour une chimie infiniment rapide	205
C.1	Distribution de Curl	205
C.2	Pdf Rectangle - Pics de Dirac	206
C.3	Fonction β	207
D	Lois d'état pour la masse volumique	209
D.1	Loi de gaz parfaits pour l'air	209
D.2	Loi de gaz parfaits pour un mélange hélium-air	209
D.3	Lois d'état pour le modèle de flammelles à chimie infiniment rapide	209
E	Termes sources instationnaires	211
E.1	Loi de gaz parfaits dépendant de la température	211
E.2	Loi de gaz parfaits dépendant d'une fraction massique	211
E.3	Loi de gaz parfaits pour le modèle de combustion	212
E.3.1	Dérivées par rapport aux paramètres	212
E.3.2	Dérivées des paramètres par rapport aux variables transportées . . .	213

Nomenclature

Lettres Romaines

a	Rayon
A	Coefficient pré-exponentiel, Surface
b	Rayon de panache
c	Variable d'avancement, Célérité de la lumière
$C_?$	Constante de modélisation
C_p	Capacité calorifique massique
d	Distance
D	Diamètre, Coefficient de diffusion Amplitude de pic de Dirac
e	Energie interne
e_c	Energie cinétique
E	Energie turbulente
E_a	Energie d'activation
f	Fréquence
f_v	Fraction volumique de suies
F	Facteur de forme
g	Gravité
G	Production de turbulence par la gravité
h	Enthalpie, Hauteur, Coefficient d'échange
h_f	Enthalpie de formation
H	Hauteur
$\mathcal{H}$	Fonction de Heaviside
$\hbar$	Constante de Planck
I	Intensité lumineuse
J	Flux de diffusion
k	Energie cinétique turbulente
k_b	Constante de Boltzmann
l	Longueur
L	Longueur
L_v	Chaleur latente de vaporisation
m	Masse

$\mathcal{M}$	Masse molaire
n	densité de précurseurs
$\mathcal{N}_0$	Nombre d'Avogadro
p	Pression dynamique
P	Pression thermodynamique, partielle Fonction densité de probabilité
q	Energie radiative, Taux de réaction élémentaire
Q	Energie
r	Coordonnée radiale
R	Constante des gaz parfaits, Rayon
R_{ij}	Tension de Reynolds
s	Coefficient stoechiométrique massique
S	Terme source, Tenseur des deformations, Surface
S_L	Vitesse de flamme
t	Temps
T	Température
u	Vitesse horizontale
U	Vitesse caractéristique
w	Vitesse verticale
x, y, z	Coordonnées cartésiennes
X	Fraction molaire
Y	Fraction massique
z	Fraction de mélange, Altitude
z_c	Longueur caractéristique de flamme
Z	Variable de Schvab-Zeldovich
Z_f	Hauteur de flamme

Lettres Grecques

α	Absorptivité, Constante de moodélisation
β	Coefficient de dilatation, Constante de modélisation
γ	Constante de modélisation
Γ	Source de masse
δ	Epaisseur, Distribution de Dirac Symbole de Kronecker
Δ	Ecart
ε	Dissipation, coefficient d'émission
ζ	Grandeur adimensionnée
η	viscosité dynamique
θ	Constante de modélisation
κ	Coefficient d'absorption, Viscosité de volume
λ	Conductivité thermique

μ	Viscosité dynamique
ν	Viscosité cinématique
ρ	Masse volumique
σ	Constante de Stephan, Nombre de Prandtl ou de Schmidt
ς	Constante de modélisation
τ	Longueur ou temps caractéristique, Contrainte visqueuse
ϕ, φ	Variable
χ	Taux de dissipation scalaire
χ_r	Pertes radiatives
Ψ	Variable
$\dot{\omega}$	Taux de réaction
Ω	Angle solide

Indices et exposants

b	Relatif au corps noir
c	Grandeur caractéristique
D	Relatif au diamètre
e	Relatif à l'air entraîné
f	Relatif à la flamme ou au foyer
F	Relatif au combustible
i, j, k, l	Indices de numérotation
m	Valeur maximale
O	Relatif à l'oxydant
P	Relatif aux produits de combustion
st	Relatif à la stœchiométrie
t	Relatif à un état turbulent
z	Relatif à une hauteur
λ	Grandeur spectrale
0	Relatif à un état de référence
∞	Relatif à un état au repos
$*$	Grandeur adimensionnée

Notations mathématiques

$\langle \phi \rangle$	Moyenne temporelle
$\tilde{\phi}$	Moyenne de Reynolds
$\bar{\phi}$	Moyenne de Favre
ϕ'	Fluctuations au sens de Reynolds
ϕ''	Fluctuations au sens de Favre
ϕ''^2	Variance

$\underline{\phi}$	Vecteur
$\underline{\underline{\phi}}$	Tenseur
$\underline{\underline{\nabla}}.$	Opérateur divergence
∇	Opérateur gradient
$\otimes$	Produit vectoriel
$\frac{\partial}{\partial t}$	Dérivée partielle
$\frac{d}{dt}$	Dérivée totale
$\frac{D}{Dt}$	Dérivée particulaire
$\dot{\phi}$	Variation temporelle

Nombres adimensionnels

Da	Nombre de Damköhler
Fr	Nombre de Froude
Gr	Nombre de Grashof
Le	Nombre de Lewis
Re	Nombre de Reynolds
Ri	Nombre de Richardson

Table des figures

1.1	Structure interne d'une flamme de prémélange	8
1.2	Flamme de diffusion	9
1.3	Différentes flammes de diffusion	10
1.4	Flamme de convection naturelle	12
1.5	Caractérisation d'un panache thermique	14
1.6	Bilan d'énergie sur la flamme	16
1.7	Les différentes phases d'un incendie	18
1.8	Conditions et caractéristiques d'un embrasement généralisé	19
1.9	Influence de différents paramètres sur le post-flashover [33]	20
1.10	Influence de la ventilation naturelle (P_0 : pression extérieure, P_i : pression interne)	22
2.1	Comparaison des approches RANS, LES et DNS dans l'espace spectral et dans l'espace temporel	29
2.2	Diagramme d'existence du couple (z, Y_F)	45
2.3	Lois d'état pour les fractions massiques dans le cas d'une chimie complète infiniment rapide	46
2.4	Régimes de combustion d'une flamme de diffusion	48
2.5	Trois types d'analyses de flammes turbulentes, d'après [119]	49
2.6	Fractions massiques instantanées pour une chimie quadratique.	59
2.7	Fractions massiques instantanées pour une chimie infiniment rapide.	60
2.8	Evolution de la fraction massique de produits pour les trois types de pdf pour trois fractions de mélange moyenne en fonction de la variance adimensionnée $\widetilde{z}''^2/[\widetilde{z}(1 - \widetilde{z})]$	61
2.9	Evolution des fractions massiques de produits (à gauche) et des dérivées pour les deux formulations (à droite) en fonction de la variance adimensionnée $\widetilde{z}''^2/[\widetilde{z}(1 - \widetilde{z})]$ pour $\widetilde{z} = z_{st}/3$	63
2.10	Evolution des fractions massiques de produits (à gauche) et des dérivées pour les deux formulations (à droite) en fonction de la variance adimensionnée $\widetilde{z}''^2/[\widetilde{z}(1 - \widetilde{z})]$ pour $\widetilde{z} = z_{st}$	64

2.11	Evolution des fractions massiques de produits (à gauche) et des dérivées pour les deux formulations (à droite) en fonction de la variance adimensionnée $\tilde{z}''^2/[\tilde{z}(1-\tilde{z})]$ pour $\tilde{z} = 2z_{st}$	65
2.12	Rapport de la dissipation conditionnée sur la dissipation moyenne $\chi_{st}/\tilde{\chi}$ en fonction de la variance adimensionnée $\tilde{z}''^2/[\tilde{z}(1-\tilde{z})]$ pour les trois types de pdfs et pour trois fractions de mélange moyenne.	66
2.13	Rapport de la dissipation conditionnée par l'amplitude de la pdf à la stœchiométrie sur la dissipation moyenne $\chi_{st}\tilde{P}(z_{st})/\tilde{\chi}$ en fonction de la variance adimensionnée $\tilde{z}''^2/[\tilde{z}(1-\tilde{z})]$ pour les trois types de pdfs et pour trois fractions de mélange moyenne.	67
3.1	Spectre d'absorption de la vapeur d'eau et du dioxyde de carbone à pression atmosphérique	70
3.2	Exemple de formation du premier cycle benzénique	77
3.3	Exemple de mécanisme de formation des hydrocarbures aromatiques polycycliques (Hydrogen Abstraction - Carbon Addition)	78
3.4	Prise en compte des pertes radiatives à travers l'enthalpie	82
4.1	Définition des différentes entités géométriques pour les faces internes (gauche) et de bord (droite)	86
4.2	Entraînement d'air ($\longrightarrow$) et conditions limites libres ($- - -$)	90
5.1	Conditions limites utilisés pour l'expérience de George et al.	98
5.2	Effet de l'approximation de Boussinesq pour SGDH et GGDH à $z = 0.75, 1.75$ et 2.75 m	101
5.3	Profils de vitesse axiale et température moyennes normalisées à $z = 0.75, 1.75$ et 2.75 m	102
5.4	Distribution moyenne radiale de la vitesse axiale et de la température à $z = 1.75$ m pour les quatre maillages	103
5.5	Profils de vitesse axiale et température moyennes normalisées pour les fermetures SGDH et GGDH	104
5.6	Production de l'énergie cinétique turbulente : contribution des forces de flottabilité $G/(P+G)$ et production totale $P+G$	105
5.7	Distribution radiale des grandeurs turbulentes normalisées à $z = 1.75$ m.	106
5.8	Comparaison de la distribution radiale de la vitesse et la flottabilité normalisées avec d'autres modèles de la littérature	108
5.9	Influence de la constante $C_{\varepsilon 3}$ avec SGDH et GGDH	110
5.10	Comparaisons des différentes approches du traitement du terme de dilatation. A1 : Euler sous la forme conservative, A2 : Dérivation de la loi d'état, A3 : Euler sous la forme non conservative.	112
5.11	Champs instantanés de température comparant les trois approches du traitement de la dilatation.	113
5.12	Conditions limites pour l'expérience de Yokoi	116

5.13	Distribution radiale de la vitesse et de la température à $z = 10, 20, 40, 60 r_0$ pour les quatre maillages	117
5.14	Distribution radiale de la vitesse à $z = 10, 20, 40, 60 r_0$	118
5.15	Distribution radiale de la température à $z = 10, 20, 40, 60 r_0$	119
5.16	Distribution de l'énergie turbulente k et son taux de dissipation ε le long de l'axe du panache	120
5.17	Comparaison des simulations avec les corrélations de Quintiere [98] : (a) Distribution axiale de la vitesse, (b) Distribution axiale de la température, (c) Entraînement d'air adimensionné du champ lointain en fonction de la hauteur adimensionnée.	122
5.18	Schéma de l'installation FLAME de Sandia.	123
5.19	Conditions limites pour l'expérience de O'Hern et al.	124
5.20	Sensibilité au maillage sur la dynamique de l'écoulement : champ de fraction massique d'hélium.	126
5.21	Sensibilité au maillage sur les profils radiaux de la vitesse verticale w et sur la fraction massique d'hélium Y à $z = 0.2, 0.4$ et 0.6 m.	127
5.22	Comparaison entre l'approche incompressible, dilatable Euler conservative A1 et dilatable non conservative A2 : profils radiaux des vitesses radiales u , axiales w , de la fraction massique Y et de l'énergie cinétique turbulente k à $z = 0.4$ m.	128
5.23	Effet de la dilatation sur la dynamique de l'écoulement : champ de fraction massique d'hélium.	129
5.24	Effet de $C_{\varepsilon 3}$: champ instantané de fraction massique d'hélium	130
5.25	Effet de $C_{\varepsilon 3}$ sur les profils radiaux des vitesses radiale u , verticale w , de la fraction massique d'hélium Y et de l'énergie turbulente k à $z = 0.4$ m.	131
5.26	Production d'énergie cinétique turbulente à $z = 0.4$ m : contribution de la flottabilité $G/(P + G)$ et production totale $P + G$	132
5.27	Production d'énergie cinétique turbulente le long de l'axe : contribution de la flottabilité $G/(P + G)$ et production totale $P + G$	133
5.28	Comparaison entre l'approche du gradient simple et l'approche du gradient généralisé : profils radiaux des vitesses radiales u et axiales w à différentes hauteurs.	135
5.29	Comparaison entre l'approche du gradient simple et l'approche du gradient généralisé : profils radiaux de la fraction massique d'hélium Y et de l'énergie cinétique turbulente k	136
5.30	Vitesse verticale le long de l'axe.	137
5.31	Variance de la fraction massique d'hélium le long de l'axe.	138
6.1	Conditions limites pour l'expérience de Gengembre et al.	142
6.2	Profils moyens axiaux de température, de vitesse et de fluctuations pour les quatre maillages ($\dot{Q} = 22.9$ kW)	144
6.3	Production d'énergie cinétique turbulente le long de l'axe pour les maillages M2 et M3 : contribution de la flottabilité $G/(P+G)$ et production totale $P+G$	145

6.4	Champs instantanés et moyens (dernière image) de température pour les maillages M2 de 2 cm et M3 de 1 cm ($\dot{Q} = 22.9 kW$).	146
6.5	Les deux modes d'oscillations d'une flamme turbulente de diffusion	147
6.6	Fluctuations totales de vitesse le long de l'axe pour les maillages M2 et M3 ($\dot{Q} = 22.9 kW$).	148
6.7	Champs instantanés et moyens (dernière image) de température pour les schémas incompressible et dilatable ($\dot{Q} = 22.9 kW$).	150
6.8	Effet de la dilatation sur les grandeurs moyennes : profils de vitesse et température le long de l'axe ($\dot{Q} = 22.9 kW$).	151
6.9	Effet de la dilatation sur les grandeurs turbulentes : Fluctuations totales de vitesse le long de l'axe ($\dot{Q} = 22.9 kW$).	151
6.10	Sensibilité à la constante $C_{\varepsilon 3}$: profils de vitesse et température le long de l'axe ($\dot{Q} = 22.9 kW$).	152
6.11	Sensibilité à la constante $C_{\varepsilon 3}$: Production d'énergie cinétique turbulente le long de l'axe : production totale P+G et contribution de la flottabilité G/(P+G) ($\dot{Q} = 22.9 kW$).	153
6.12	Sensibilité à la constante $C_{\varepsilon 3}$: Fluctuations de vitesse verticale le long de l'axe : fluctuations totales et contribution turbulente ($\dot{Q} = 22.9 kW$). . . .	153
6.13	Sensibilité à la constante $C_{\varepsilon 3}$: champs instantanés de température ($\dot{Q} = 22.9 kW$).	155
6.14	Contributions du gaz et des suies dans l'effet du rayonnement de la flamme : température moyenne le long de l'axe ($\dot{Q} = 22.9 kW$).	156
6.15	Champ moyen de fraction massique de suies ($\dot{Q} = 22.9 kW$).	157
6.16	Positions des fluxmètres dans l'expérience de Gengembre et al. (D = 0.3 m, d = 0.25 m).	158
6.17	Contributions du gaz et des suies dans le rayonnement de la flamme : flux radiatifs ($\dot{Q} = 22.9 kW$).	158
6.18	Fraction molaire de combustible, d'oxygène et de dioxyde de carbone le long de l'axe pour les trois flammes de Gengembre et al.	161
6.19	Profils de température et de vitesse le long de l'axe pour les trois flammes de Gengembre et al.	162
6.20	Débit d'air entraîné pour différentes puissances.	163
6.21	Signal de température et fréquence du battement de la flamme à z = 0.3 et 0.6 m sur l'axe ($\dot{Q} = 22.9 kW$).	164
6.22	Hauteur de flamme en fonction de la puissance.	166
6.23	Montage expérimental de Steckler et al.	169
6.24	Champ moyen de la température dans le plan de symétrie pour $\dot{Q} = 62.9 kW$	170
6.25	Champ moyen de vitesse coloré par la norme de la vitesse dans le plan de symétrie pour $\dot{Q} = 62.9 kW$	171
6.26	Distribution verticale de vitesse horizontale et de température au milieu de la porte pour $\dot{Q} = 62.9 kW$	172
6.27	Distribution verticale de la température au coin de la pièce pour $\dot{Q} = 62.9 kW$	173

A.1	Pdfs rectangle-Dirac	194
B.1	Evolution de $\frac{\partial \tilde{Y}_P}{\partial z''_2}$, $\frac{\partial^2 \tilde{Y}_P}{\partial \tilde{z}^2}$, $\frac{\partial^2 \tilde{Y}_P}{\partial \tilde{z} z''_2}$ et $\frac{\partial^2 \tilde{Y}_P}{\partial z''_2} \times \tilde{z}''^2$ pour la pdf rectangle-Dirac pour trois fractions de mélange moyenne en fonction de la variance adimensionnée $\tilde{z}''^2/[\tilde{z}(1 - \tilde{z})]$	203

Liste des tableaux

1.1	Corrélations de McCaffrey [72], vitesse et température le long de l'axe vertical d'une flamme de diffusion de méthane	13
2.1	Constantes du modèle $k - \varepsilon$	37
3.1	Constantes pour le modèle de suies [80, 115]	80
4.1	Equations de transport résolues	94
5.1	Discrétisation pour l'expérience de George et al.	98
5.2	Conditions de calcul pour l'expérience de George et al.	99
5.3	Sensibilité au maillage : valeurs maximales sur l'axe, ouverture du panache et temps de calcul	103
5.4	Valeurs maximales de la vitesse et de la flottabilité sur l'axe et ouverture du panache	105
5.5	Conditions de calcul pour l'expérience de Yokoi	116
5.6	Conditions de calcul pour l'expérience de O'Hern et al.	125
5.7	Discrétisation pour l'expérience de O'Hern et al.	125
5.8	Valeurs maximales des grandeurs caractéristiques et de demi-largeur du panache de O'Hern et al.	134
6.1	Conditions de calcul pour l'expérience de Gengembre et al.	143
6.2	Discrétisation pour l'expérience de Gengembre et al.	143
6.3	Conditions de calcul pour l'expérience de Steckler et al.	168
6.4	Grandeurs caractéristiques de la configuration Steckler et al.	172

Introduction

L'incendie est un des risques majeurs de notre société en termes de dommages humains et matériels, en particulier à cause de la concentration des populations et matériaux combustibles dans les villes, sites industriels ou forêts. Bien que les réglementations, procédures de sécurité et retours d'expérience permettent de prévenir et lutter plus efficacement contre l'incendie, l'histoire fourmille d'exemples attestant le caractère dramatique de l'incendie :

- l'incendie du Bazar de la Charité à Paris le 4 Mai 1897 a fait 129 morts,
- la catastrophe de Los Alfaques en Espagne le 11 Novembre 1978 fit 217 morts et de nombreux blessés,
- l'incendie de la station de métro King Cross à Londres le 18 Novembre 1987 a fait 31 morts,
- l'incendie du tunnel du Mont Blanc le 24 Mars 1999 a duré 2 jours et causé 39 morts,
- l'accident de l'usine de feux d'artifices d'Enschede aux Pays-Bas le 13 Mai 2000 a fait 22 morts et 1 000 blessés,
- l'attentat du World Trade Center à New York le 11 Septembre 2001 a provoqué l'effondrement de 3 bâtiments et fait 2750 morts,
- l'incendie de l'hôtel Paris-Opéra à Paris le 15 Avril 2005 a fait 22 morts.

Electricité De France, en tant qu'exploitant, est responsable de la sûreté des centrales nucléaires et définit les moyens et l'organisation mis en place, conformément aux textes réglementaires, pour s'assurer que ses installations ne présentent pas de risques ou d'inconvénients pour le public et l'environnement. Ces règles sont soumises à l'ASN (Autorité de Sûreté Nucléaire) qui contrôle les activités de l'exploitant en vérifiant la mise en application de la réglementation, notamment lors d'inspections in situ.

L'incendie dans une centrale nucléaire est le risque potentiel d'agression interne le plus élevé. Outre la sécurité de son personnel et le bon fonctionnement de ses installations, EDF possède un intérêt économique (lié à la perte de matériels et à l'immobilisation du moyen de production) à diminuer le risque incendie en assurant un niveau de sûreté élevé sans recourir à des moyens de défense contre l'incendie sur-dimensionnés, parfois imposés par des règles prescriptives censées couvrir le maximum de situations.

La démonstration de l'efficacité de la sûreté incendie à l'aide d'outils numériques, rendue possible par l'amélioration des connaissances, des capacités de calcul et l'évolution réglementaire, est en croissance puisqu'elle permet de défendre certaines dispositions plus

adaptées aux situations de terrain.

Les outils de simulation numérique développés par EDF R&D participent depuis plusieurs années aux réponses apportées par EDF. Aujourd’hui, le code de référence incendie à EDF est le code MAGIC, code bi-zones reposant sur l’hypothèse de stratification des gaz chauds au-dessus d’une couche de gaz frais. Ce type de modélisation présente l’avantage d’un coût de calcul faible et répond à la majorité des besoins industriels. Cependant, dans le cas de grands volumes, de géométries complexes ou étirées (tunnels, galeries, etc.), l’hypothèse de stratification est alors critiquable, d’où la nécessité d’une modélisation plus détaillée. Pour ce faire, EDF R&D s’est appuyé sur *Code_Saturne*, code de mécanique des fluides développé par le département Mécanique des Fluides, Energies et Environnement (MFEE). Les codes à champs, en résolvant les bilans de masse, de quantité de mouvement et d’énergie à l’échelle de la maille, permettent une modélisation plus fine de la physique. A travers ce travail novateur, EDF R&D a ambitionné d’améliorer ses connaissances et ses capacités de simulation 3D de l’incendie.

L’incendie est à la convergence de nombreux phénomènes physiques tels que la mécanique des fluides, la combustion, les transferts thermiques, la chimie, la résistance des matériaux et fait intervenir des couplages entre tous ces phénomènes. *Code_Saturne*, dans sa version standard, répond en partie à ce cahier des charges. En effet, le code résout les équations de Navier-Stokes pour des écoulements incompressibles instationnaires suivant une hypothèse de faible nombre de Mach sur tout type de maillage, structuré ou non, ainsi que les équations de tout scalaire. La méthode de résolution utilise la méthode des volumes finis sur un maillage colocalisé. Il intègre des modélisations LES (Large Eddy Simulation), limitée aux écoulements non réactifs et RANS (Reynolds Average Navier Stokes) avec les modèles de turbulence $k - \varepsilon$, $k - \omega - SST$, $R_{ij} - \varepsilon$ *LRR* et *SSG* où les effets de la gravité sont pris en compte. Il intègre trois modèles de combustion turbulente pour les hydrocarbures gazeux : le modèle de flammelettes associé à une hypothèse de chimie infiniment rapide pour les flammes de diffusion, le modèle Eddy-Break-Up pour les flammes de prémélange parfait et le modèle Libby-Williams-Poitiers pour les flammes de prémélange partiel où un temps chimique est considéré. *Code_Saturne* intègre également un module pour la combustion du charbon pulvérisé. Enfin, il intègre deux méthodes de résolution de l’équation des transferts radiatifs : la méthode des ordonnées discrètes et l’approche P-1. Les propriétés radiatives du mélange gazeux sont soit spécifiées par l’utilisateur à l’aide d’un coefficient d’absorption constant, soit calculées à l’aide d’un modèle à larges bandes.

Objectifs de la thèse

Le code n’ayant jamais été utilisé pour la simulation d’incendies, cette thèse avait pour objectif de sélectionner les modèles adéquats du code pour la modélisation des incendies, de détecter les limites des modélisations et algorithmes actuellement mis en œuvre, et dans le cas d’une mise en défaut, de les améliorer.

Notre choix s'est porté sur une modélisation de type URANS avec le modèle $k - \varepsilon$ classique. La combustion est traitée à l'aide d'un modèle de flammelettes, associé à une hypothèse de chimie infiniment rapide. Le rayonnement est traité à l'aide de la méthode des ordonnées discrètes, un modèle à larges bandes pour les propriétés radiatives du mélange gaz et suies et un modèle semi-empirique pour le calcul de la concentration en suies.

Les limites atteintes ont été le traitement des conditions limites pour les frontières libres, essentielles dans la modélisation des écoulements dominés par la gravité en milieu ouvert ou semi-confinés, ainsi que la prise en compte de la dilatation des gaz de combustion, essentielle pour une bonne prédiction de la dynamique de ces écoulements fondamentalement instationnaires. Ces deux points ont fait l'objet de développements qui sont la base de cette thèse.

Originalité de la thèse

L'originalité principale de cette thèse réside dans la méthode employée pour le traitement de la dilatation du mélange gazeux. Pour les gaz de combustion, celle-ci est due à la variation de la température ainsi qu'à la variation de la masse molaire et son effet d'un pas de temps à l'autre peut être très important et donc source d'instabilité fatale pour le calcul numérique. Dans le cas d'écoulement à bas nombre de Mach où la densité ne dépend pas de la pression, le schéma classiquement utilisé est un schéma d'Euler. Ce schéma a été utilisé dans ce travail donnant de bons résultats sur les configurations non réactives. En revanche, des difficultés ont été rencontrées sur les cas traitant des écoulements réactifs. Nous proposons alors l'utilisation d'un schéma plus original utilisant la dérivation de la loi d'état utilisée pour la densité afin d'évaluer sa dérivée particulière. L'équation de continuité est donc traitée sous sa forme non-conservative. Bien que cette méthode demande un travail préliminaire pour chaque loi d'état, elle nous paraît plus précise car l'évaluation de la dilatation ne se fait pas entre deux pas de temps, mais elle utilise l'évolution de la loi d'état avec les termes sources utilisés pour les variables dont dépend la densité.

Comme nous le verrons, le traitement de la dilatation permet de capturer un certain nombre de phénomènes instationnaires à basse fréquence, si bien que, plutôt de parler de modélisation RANS, on peut envisager d'utiliser la dénomination URANS pour Unsteady Reynolds Average Navier Stokes.

Plan du mémoire

Le mémoire est construit comme suit. Les trois premiers chapitres ont une portée générale sur la modélisation des différents phénomènes physiques impliqués dans un incendie. Les trois derniers chapitres sont plus spécifiques à *Code_Saturne* puisqu'ils présentent les développements et configurations étudiées pendant cette thèse.

Le premier chapitre concerne la phénoménologie du feu, à travers les différents types

de flamme, la dégradation des combustibles et ses interactions avec le milieu ambiant lors d'un incendie confiné. L'idée est de rappeler les différents phénomènes présents dans un incendie ainsi que leur rôle sur le développement d'un feu.

Le second chapitre est une synthèse non-exhaustive de la modélisation des écoulements réactifs turbulents. Ici, l'idée est de rappeler les efforts de modélisation réalisés par nos prédécesseurs sur la mécanique des fluides, la turbulence et la combustion turbulente. Le premier thème est indispensable à toutes descriptions numériques d'un écoulement. La turbulence est naturellement présente dans les écoulements dominés par la convection naturelle car en plus d'être le moteur de l'écoulement, la gravité tend naturellement à rendre l'écoulement turbulent. Enfin, la modélisation de la combustion turbulente vise à traduire l'effet de la réaction chimique sur l'écoulement turbulent. Au fil de cette étude bibliographique, les choix communément faits dans la communauté incendie sont présentés ainsi que ceux retenus pour ce travail. Nous proposons également une réflexion théorique sur l'estimation des taux de réactions dans le cadre du modèle de combustion utilisé.

Le troisième chapitre reprend l'idée du chapitre précédent pour l'appliquer au rayonnement du milieu dans lequel se déroule l'incendie. En effet, le rayonnement est un des vecteurs d'énergie prépondérant dans les feux de compartiment. Ceci est dû à la forte concentration en produits de combustion (gaz et suies) piégés dans la pièce ainsi qu'aux parois échauffées par la flamme et les fumées.

Le quatrième chapitre concerne les développements fondamentaux réalisés au cours de cette thèse. S'appuyer sur un outil existant a nécessité une phase d'enrichissement du code, à travers le traitement de la dilatation pour les écoulements réactifs instationnaires et les conditions d'entrée-sortie libres typiques d'un feu en milieu ouvert. Si ce dernier point est traité d'une manière relativement classique, le traitement de la dilatation a également fait l'objet d'un développement plus original que ceux classiquement rencontrés dans la littérature. Bien que plus difficile à mettre en œuvre car spécifique à chaque loi d'état utilisée pour la densité, la méthode semi-analytique présentée nous semble plus intéressante car elle s'appuie justement sur la loi d'état pour la densité. Ces développements sont présentés dans ce chapitre ainsi qu'une synthèse du modèle utilisé suite aux conclusions tirées de l'étude bibliographique.

Le cinquième chapitre concerne l'application et la validation des développements de panaches non réactifs en milieu libre dominés par la gravité. L'étude de ces écoulements est essentielle car ils sont très représentatifs des écoulements rencontrés dans les feux. Ils permettent de vérifier le bon comportement du modèle dans le champ lointain des panaches. Le traitement de la dilatation et des conditions limites, qui influent sur la dynamique de l'écoulement, est satisfaisant. En revanche, une sous-prédiction du mélange près des sources de flottabilité persiste. L'adaptation du modèle de turbulence en accord avec la littérature (constantes et fermeture pour le terme de flottabilité) a permis d'améliorer sensiblement les prédictions au regard des résultats expérimentaux. Ces résultats sont très intéressants car

ils soulignent l'importance du couplage entre la masse volumique, le mélange et la convection naturelle, et expliquent partiellement le comportement du modèle sur les flammes à bas nombre de Froude.

Le sixième et dernier chapitre concerne l'application du modèle aux flammes à bas nombre de Froude, d'abord en s'intéressant à une flamme de moyenne puissance en milieu ouvert puis à un feu compartimenté. Ces deux types d'études sont couramment traités dans la littérature car elles représentent des cas simples de feu mais néanmoins caractéristiques de tout autre incendie. En plus de la dynamique et du modèle de turbulence, elles permettent d'étudier le comportement du modèle de rayonnement et du modèle de suies.

Le premier cas a confirmé le défaut de mélange constaté sur les cas non réactifs, montrant que ce paramètre est essentiel pour une bonne prédiction de l'incendie. La sensibilité au maillage constatée sur les grandeurs moyennes mais également sur les grandeurs turbulentes met également en valeur les difficultés de convergence apportées par le couplage supplémentaire entre la masse volumique et la turbulence. Une sous-estimation du rayonnement dans la flamme a également été notée et fera l'objet d'une investigation future approfondie.

Ensuite, l'étude d'un feu compartimenté de moyenne puissance est abordée. Les difficultés de convergence, la sous-estimation du mélange et du rayonnement ont un impact sur les niveaux de température et de vitesse. Néanmoins, les tendances sont reproduites correctement, en lien avec un comportement du feu lié étroitement au confinement et en particulier à l'inertie thermique des parois.

Après une conclusion générale sur ce travail, nous proposons quelques perspectives de travail concernant la modélisation des flux scalaires turbulents ainsi que des pistes d'améliorations du modèle de combustion pour les cas de réentraînement de fumées dans la flamme ou les cas d'extinction partielle ou temporaire due à une raréfaction de l'oxygène.

Chapitre 1

Phénoménologie du feu

Le feu est un phénomène instable par nature d'où le danger qu'il représente alors que les concentrations de populations et d'énergie accroissent le besoin de prévisions des risques. Cette instabilité provient des couplages entre les différents phénomènes physiques impliqués, par exemple, le dégagement de combustible gazeux sous l'effet de l'énergie produite par la combustion de ce combustible avec l'air ambiant. Les trois éléments mis en jeu dans ces couplages constituent le triangle du feu : le combustible, le comburant et l'énergie.

Prenons l'exemple de la bougie. Une fois la mèche de la bougie allumée, la cire fond, se vaporise et diffuse jusque dans une zone où se trouve suffisamment d'oxygène pour y être oxydée par une série complexe de réactions chimiques. La chaleur dégagée vaporise la cire fondue qui a migré par capillarité dans la mèche, puis ce combustible sera brûlé à son tour.

La science du feu présente un caractère pluridisciplinaire, mettant en jeu des phénomènes tels que la combustion (qui détermine la libération de l'énergie), l'effet des forces de flottabilité (qui influe sur la convection et donc le mélange combustible/comburant), les transferts thermiques (qui influent sur le transfert de l'énergie) ou la turbulence (qui influe sur la libération de l'énergie, ainsi que le mélange). L'interaction entre ces phénomènes couplés complique le problème physique, d'où la difficulté de compréhension et de prévision des feux.

Dans un premier temps, à travers ce chapitre, nous allons aborder succinctement les principaux phénomènes physiques présents dans un incendie ainsi que le rôle dans le développement d'un feu.

1.1 Flamme de prémélange

On observe une flamme de prémélange lorsque le combustible et l'oxydant sont intimement mélangés avant la réaction de combustion. La structure interne de la flamme de prémélange laminaire se décrit en deux zones (Fig. 1.1), une zone de préchauffage d'épaisseur δ_P qui est une zone de diffusion et de convection de la chaleur, et une zone de réaction d'épaisseur δ_R qui est une zone de diffusion et de réaction des espèces en présence où le

taux de radicaux est plus important qu'à l'équilibre atteint en aval du front de flamme. Les forts gradients existants entre ces zones de préchauffage et de réaction entraînent des forts flux de diffusion de chaleur et d'espèces qui tendent à favoriser l'alimentation de la zone de réaction en énergie, réactants et à l'appauvrir en produits et en radicaux.

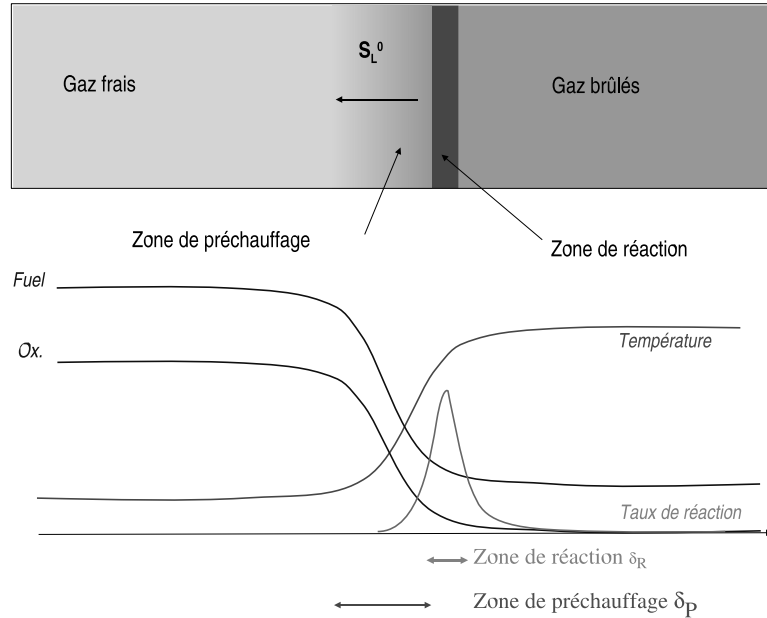


FIG. 1.1 – Structure interne d'une flamme de prémélange

Les forts gradients de température et de concentrations qui s'établissent à travers le front de flamme sont responsables de la propagation de la flamme de prémélange à la vitesse S_L^0 .

Les flammes de prémélange sont des flammes utilisées dans les moteurs à combustion interne essence et le foyer primaire des turbines à gaz, et sont les flammes des déflagrations et détonations. Elles sont rarement rencontrées dans les incendies, mais certains auteurs [14, 33] ont remarqués qu'il existait une zone de prémélange au-dessus de la source combustible, la taille de cette zone augmentant avec la puissance de la flamme, car le débit de combustible est alors trop important pour que celui-ci puisse être mélangé avec l'air entraîné.

1.2 Flamme de diffusion

Contrairement à la flamme de prémélange, on observe une flamme de diffusion lorsque le combustible et l'oxydant sont séparés avant la réaction ; c'est la flamme la plus naturelle, de la bougie au feu de forêt. Les réactifs étant séparés, ils doivent diffuser l'un vers l'autre pour réagir. Le combustible est à l'état gazeux. Ainsi, pour les flammes de diffusion pouvant mettre en jeu des combustibles non gazeux, cela implique une étape de pyrolyse (dégradation en gaz légers) pour les solides et les liquides lourds ou d'évaporation pour les

liquides légers.

Physiquement, la flamme s'établit grâce aux réactions chimiques, à la diffusion de la chaleur des produits vers les réactifs et des espèces les unes vers les autres. A l'aide d'une flamme emprisonnée dans un tube conduisant le flux d'air (Fig. 1.2.b), Burke et Schumann [17] montrent que celle-ci se forme dans une zone entre les réactifs où s'effectue le mélange combustible/oxydant. La flamme se stabilise là où les réactifs respectent le rapport stoechiométrique défini par l'équation-bilan de combustion. L'obtention de deux formes de flammes en ne changeant que le débit d'air suggère que la réaction est beaucoup plus rapide que les processus de diffusion et convection, et qu'elle est contrôlée par la convection et diffusion des espèces et de la chaleur plus que la cinétique chimique. Par analogie à la flamme de prémélange, on retrouve une zone de réaction et une zone de préchauffage des réactifs de chaque côté de la flamme (Fig. 1.2.c). Les réactifs se détruisent réciproquement et ne peuvent coexister longtemps à haute température. Lorsque la zone de réaction est considérée comme infiniment mince (c'est-à-dire de mesure nulle) la coexistence des réactifs est impossible.

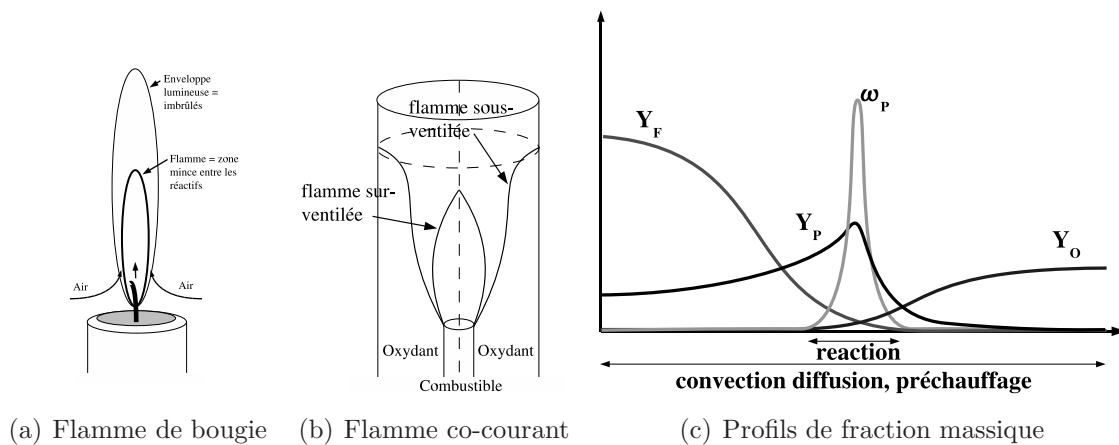


FIG. 1.2 – Flamme de diffusion

Si la flamme de diffusion est souvent le type de flamme rencontrée dans les incendies, son étude est soumise à de nombreux paramètres liés à l'entraînement libre de l'air. Ainsi pour des études plus précises sur la flamme de diffusion, les efforts se sont portés vers des configurations de type co-courant, le combustible et l'oxydant sont injectés parallèlement (Fig. 1.3.a), permettant également la détermination des concentrations d'intermédiaires réactionnels. Plus les vitesses d'injection sont élevées, plus on augmente la turbulence et le micro-mélange dans la flamme, la flamme pouvant se décrocher (flamme liftée (Fig. 1.3.b)) voire être soufflée si les débits sont trop importants. Afin de mieux connaître l'influence des micro-échelles de mélange mettant en contact intime les réactifs, les études sur les flammes à contre-courant se sont également multipliées, constituant l'autre configuration de flamme de diffusion (Fig. 1.3.c).

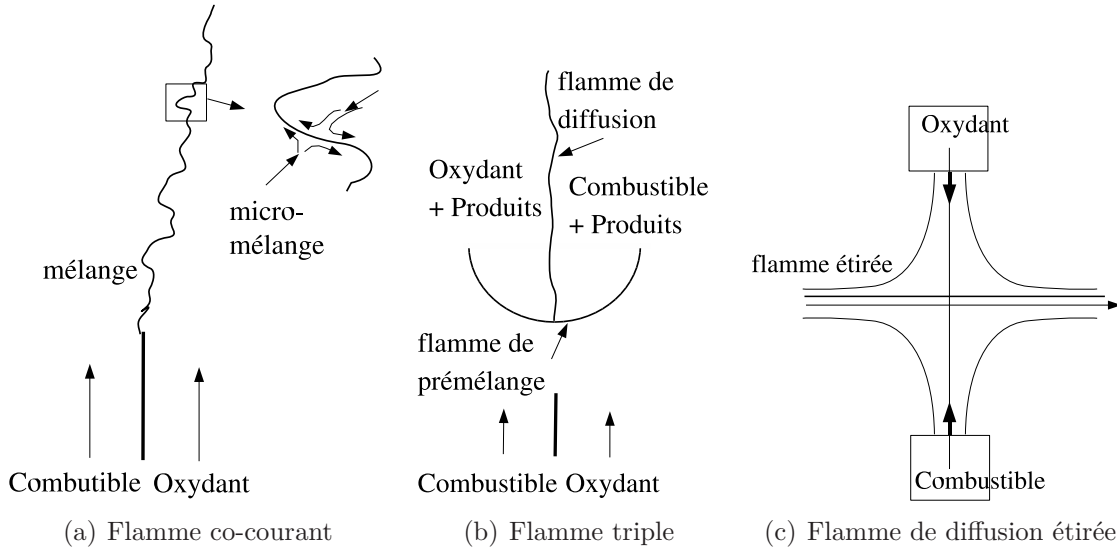


FIG. 1.3 – Différentes flammes de diffusion

1.3 Feux de nappe

Les flammes rencontrées dans les incendies sont soit issues de feux de combustibles solides soit issues de feux de combustibles liquides que l'on appelle communément feux de nappe, dont les caractéristiques sont similaires. Les feux de nappe produisent une flamme de diffusion soumise à la convection naturelle. A l'inverse des flammes soufflées et à contre-courant qui sont des flammes jets fortement dominées par la convection forcée en raison de la vitesse d'injection, toutes les flammes soumises à la convection naturelle sont dominées par les forces de flottabilité. Le nombre de Grashof Gr , qui compare ces dernières aux forces de viscosité permet de caractériser leur effet sur l'écoulement :

$$Gr = \frac{gL^3\beta\Delta T}{\nu^2} \quad (1.1)$$

avec g l'accélération gravitationnelle, L la longueur sur laquelle est obtenue la différence de température (ou densité), β le coefficient d'expansion thermique (égal à $1/T$ pour un gaz parfait) et ν la viscosité du fluide. Dans le cadre des écoulements dominés par la convection naturelle, le nombre de Froude, qui compare les forces d'inertie et les forces de flottabilité, est également utilisé :

$$Fr = \frac{U}{\sqrt{gD\frac{\Delta\rho}{\rho}}} \quad (1.2)$$

où U est la vitesse du fluide. Ces deux nombres peuvent être reliés à l'aide du nombre de Reynolds Re en faisant l'hypothèse que la longueur L est de l'ordre de grandeur du diamètre D du brûleur ($L = D$), que l'écoulement est isobare et que le fluide suit une loi

des gaz parfaits ($\rho T = cste$) :

$$\sqrt{Gr}Fr = \sqrt{\frac{gD^3 \frac{\Delta T}{T}}{\nu^2}} \frac{U}{\sqrt{gD \frac{\Delta \rho}{\rho}}} = \frac{UD}{\nu} = Re \quad (1.3)$$

Les flammes de convection naturelle sont les flammes caractéristiques de l'incendie, car uniquement soumises à l'entraînement d'air frais qu'elles provoquent. Elles sont caractérisées par un nombre de Froude inférieur à 10^{-2} , ce qui donne des vitesses à la surface combustible de l'ordre du mm/s . Leur structure est beaucoup moins bien définie que celles des flammes dominées par la convection forcée car les perturbations extérieures sont d'une part plus importantes et d'autre part beaucoup plus efficaces du fait des faibles vitesses du combustible.

Elle peut néanmoins se découper en trois zones caractéristiques (Fig. 1.4) :

- une zone de flamme persistante et d'accélération des gaz combustibles proche de la surface du combustible,
- une zone de flamme intermittente et de vitesse moyenne du mélange constante,
- le panache thermique où la vitesse et la température décroissent avec la hauteur.

L'écoulement est laminaire à la surface du matériau qui brûle car sa vitesse d'éjection est très faible. Cependant, en plus de provoquer une accélération des gaz combustibles, les forces de flottabilité sont également productrice de turbulence. Une transition entre les régimes laminaire et turbulent se produit donc très rapidement rendant la flamme turbulente dès la zone persistante. Le niveau de turbulence reste toutefois modeste, la vitesse maximale des gaz observées reste de l'ordre de quelques mètres par seconde.

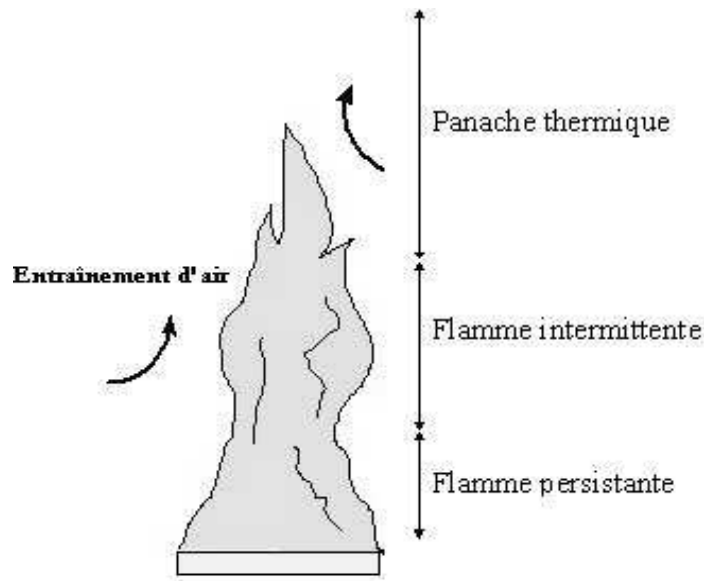
De nombreux auteurs ont publié sur le panache thermique des données expérimentales [19, 22, 72, 134, 137] ou des modélisations [44, 67, 136]. A partir de ses données expérimentales, Zukoski et al. [137] ont établi une corrélation pour le débit d'air entraîné $\dot{m}_e$ reliant celui-ci à la puissance du feu et la hauteur z :

$$\dot{m}_e = 0.21 \rho_0 \sqrt{g} z z^2 \dot{Q}_z^{*1/3} \quad (1.4)$$

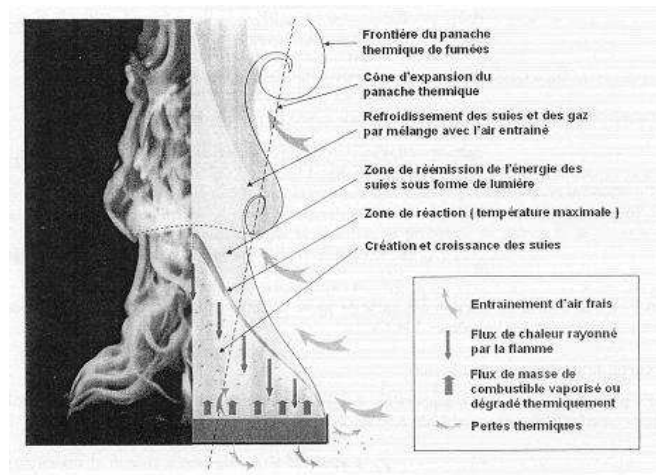
$\dot{Q}_z^*$ est une puissance adimensionnée que l'on retrouve souvent dans les corrélations ou la présentation des résultats expérimentaux et qui s'exprime selon :

$$\dot{Q}_z^* = \frac{\dot{Q}}{\rho_0 C_p T_0 \sqrt{g} z z^2} \quad (1.5)$$

où ρ_0 , C_p et T_0 sont la densité, la capacité calorifique et la température de l'air ambiant.



(a) Les trois zones schématiques



(b) Ecoulement autour de la flamme

FIG. 1.4 – Flamme de convection naturelle

À partir de ses données expérimentales, McCaffrey [72] établit une corrélation pour la vitesse w et l'écart relatif de température avec l'air ambiant $\frac{\Delta T}{T_0}$, distinguant les trois zones :

$$\frac{w}{Q^{1/5}} = k \left(\frac{z}{\dot{Q}^{2/5}} \right)^\eta \quad (1.6)$$

$$\frac{2g\Delta T}{T_0} = \left(\frac{k}{C} \right)^2 \left(\frac{z}{\dot{Q}^{2/5}} \right)^{2\eta-1} \quad (1.7)$$

où $\dot{Q}$ est la puissance du feu, z l'altitude, k , C et η des constantes données dans le ta-

bleau 1.1.

Region	$z/\dot{Q}^{2/5}[m/kW^{2/5}]$	η	k	C
Flame	< 0.08	0.5	$6.8 [m^{1/2}.s^{-1}]$	0.9
Intermittent	$0.08 - 0.2$	0	$1.9 [m.kW^{-1/5}.s^{-1}]$	0.9
Persistant	> 0.2	-1/3	$1.1 [m^{4/3}.kW^{-1/3}.s^{-1}]$	0.9

TAB. 1.1 – Corrélations de McCaffrey [72], vitesse et température le long de l'axe vertical d'une flamme de diffusion de méthane

A l'aide de trois bilans (masse, quantité de mouvement et énergie), la structure du panache peut être décrite analytiquement, mais des hypothèses simplificatrices sont nécessaires pour fermer le système. Ainsi, une hypothèse de gradients radiaux gaussiens et similaires pour w et ΔT est souvent considérée.

En supposant que w , b (le rayon du panache) et ΔT sont proportionnels à des puissances de z l'altitude, Zukoski et al. [137] établissent un modèle pour le rayon, la vitesse w_m et la température le long de l'axe du panache dont l'allure est donnée sur la figure 1.5,

$$\begin{aligned} b &= C_l z \\ w_m &= C_v (gz)^{1/2} \dot{Q}_D^{*1/3} \\ \Delta T &= C_T \dot{Q}_D^{*2/3} T_0 \end{aligned} \quad (1.8)$$

où C_l , C_v et C_T sont des constantes calées sur l'expérience.

Sous les mêmes hypothèses, Quintiere et Grove [99] ont établi un modèle pour la température T , la vitesse w et l'entraînement d'air $\dot{m}_e$ pour l'ensemble du panache en supposant un profil radial gaussien :

$$\frac{T - T_0}{T_m - T_0} = e^{-\beta \left(\frac{r}{b}\right)^2} ; \quad \frac{w}{w_m} = e^{-\left(\frac{r}{b}\right)^2} ; \quad \dot{m}_e = \pi \rho_0 w_m b^2 \quad (1.9)$$

avec

$$\Phi = \frac{T_m - T_0}{T_0} = 10.58(1 - \chi_r)^{2/3} \zeta^{-5/3} \quad (1.10)$$

$$w = \frac{w_m}{(gz_c)^{1/2}} = 4.17(1 - \chi_r)^{1/3} \zeta^{-1/3} \quad (1.11)$$

$$B = \frac{b}{z_c} = 0.118 \frac{z}{z_c} ; \quad \zeta = \frac{z}{z_c} ; \quad \beta = 0.913 \quad (1.12)$$

où χ_r est la fraction d'énergie perdue par rayonnement, z_c la longueur caractéristique du panache,

$$z_c = \left(\frac{\dot{Q}}{\rho_0 C_p T_0 \sqrt{g}} \right)^{2/5} \quad (1.13)$$

$\dot{Q}$ la puissance dégagée, ρ_0 , C_p et T_0 , la masse volumique, la capacité calorifique massique et la température de l'air ambiant, et g la gravité.

Des modèles ont également été développés en tenant compte d'une source ponctuelle fictive à l'altitude z_0 afin de considérer les foyers qui ne sont pas assimilables à des sources ponctuelles [49] :

$$z_0 = 0.083\dot{Q}^{2/5} - 1.02D \quad (1.14)$$

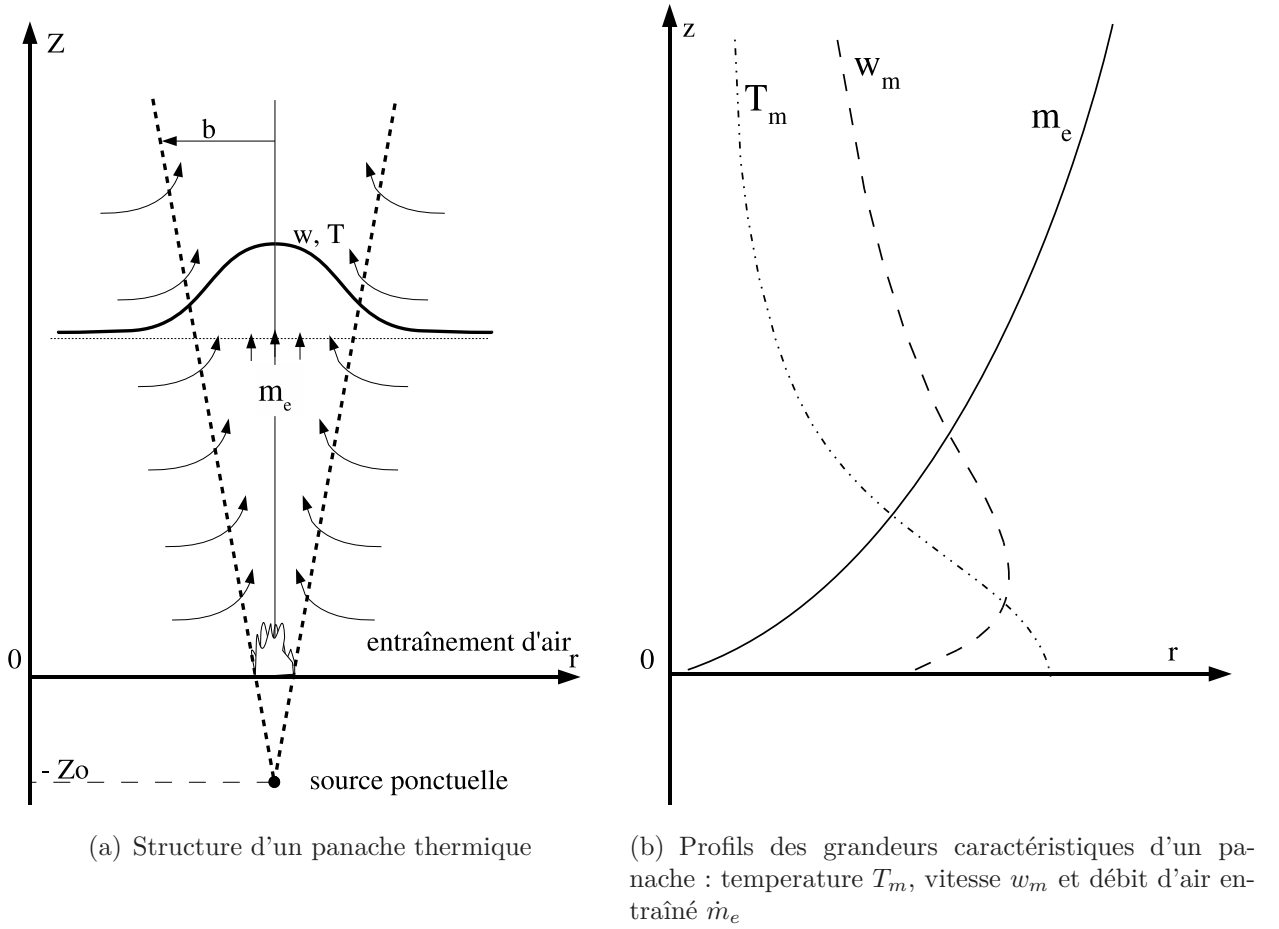


FIG. 1.5 – Caractérisation d'un panache thermique

On met alors en évidence l'effet de la dilution des fumées par l'air entraîné, la température décroissant rapidement dès que l'on s'éloigne de la flamme, l'effet de la convection naturelle, les vitesses étant les plus fortes juste au-dessus des zones chaudes.

Les études comme celle de Bouhafid et al. [14] ou Chitty et Cox [22] réalisées sur des brûleurs poreux (qui permettent de contrôler le débit de combustible) ont permis d'étudier les structures cohérentes qui se développent dans la zone persistante. Dans le cas de feux de nappe, les forces de cisaillement entre l'air frais et les produits de combustion chauds rendent instable l'écoulement et amplifient les oscillations prenant naissance à la surface du combustible [125], oscillations liées aux variations du taux de consommation de combustible dépendant du taux d'oxygène et donc de l'entraînement d'air.

Ces instabilités permettent la création de vortex donnant alors une forme de champignon à la flamme (Fig. 1.4.b). De l'air frais y est entraîné et refroidit l'écoulement ce qui provoque une rupture dans la flamme, des paquets de gaz en combustion s'échappant de celle-ci. La flamme a alors perdu de sa hauteur puis un nouveau vortex vient prendre la place du précédent. On constate alors une présence plus faible de la flamme dans la zone intermittente.

Le caractère fluctuant de la flamme dans la zone intermittente a aussi été mis en évidence par McCaffrey [72] ou Zukoski et al. [137] estimant que la hauteur moyenne perçue à l'oeil était surestimée de 10 à 15 %. On observe ainsi un phénomène de battement de la flamme de fréquence estimée par Zukoski [136] à :

$$f = (0.5 \pm 0.04) \left(\frac{g}{D} \right)^{0.5}$$

jouant un rôle déterminant dans l'entraînement d'air frais [137] ainsi que sur la formation des fumées [32].

Le caractère fluctuant de la flamme a amené à définir une hauteur médiane [22], hauteur au-dessous de laquelle la flamme se trouve 50 % du temps. Plusieurs corrélations ont été établies [30, 42, 99] et validées à l'aide de nombreuses données expérimentales, la plupart corrélant la hauteur de flamme adimensionnée par le diamètre du brûleur l/D au rapport $\dot{Q}^{2/5}/D$ ou la puissance adimensionnée $\dot{Q}^*$ liés au nombre de Froude. Pour les grandes puissances ($\dot{Q}^* > 5$), la relation est à la puissance 2/5, pour les faibles puissances ($\dot{Q}^* < 0.5$), elle est linéaire et pour les puissances intermédiaire ($3 < \dot{Q}^* < 10$), elle est à la puissance 2/3.

Cependant, au delà d'un certain diamètre de foyer, ces corrélations ne sont plus valables car la flamme est alors constituée de plusieurs flammes dont la hauteur est bien plus faible que le diamètre du foyer.

1.4 Dégradation des combustibles

Soumis au rayonnement de la flamme et des fumées, les combustibles non gazeux subissent une étape d'évaporation pour les liquides légers ou de pyrolyse pour les solides et les liquides lourds.

Tous les liquides s'évaporent à température ambiante, mais certains liquides très volatiles en raison de leur faible température d'évaporation donnent des débits si importants

à température ambiante qu'il se forme un mélange combustible/air qui peut s'enflammer spontanément et provoquer une explosion (flamme de prémélange) en raison du point d'inflammation très bas du combustible (température minimale à laquelle un liquide dégage une quantité suffisante de gaz pour s'embraser au contact d'une source de chaleur et entretenir sa combustion).

Les autres liquides ayant un point d'inflammation élevé doivent être chauffés pour s'enflammer et démarrer le processus de combustion. Ils brûlent en nappe et le débit de combustible est alors variable avec la surface du foyer [48]. Le régime de combustion est laminaire pour un diamètre inférieur à 30 cm et pleinement turbulent pour un diamètre supérieur à 1 m. Cette dépendance est liée au flux de chaleur reçu par la surface combustible. En effet, en l'absence d'apport d'énergie extérieur à la flamme, l'énergie nécessaire à la vaporisation du liquide correspond à l'écart entre l'énergie dégagée par la flamme et l'énergie perdue par le liquide (Fig. 1.6). On obtient alors un débit massique surfacique de

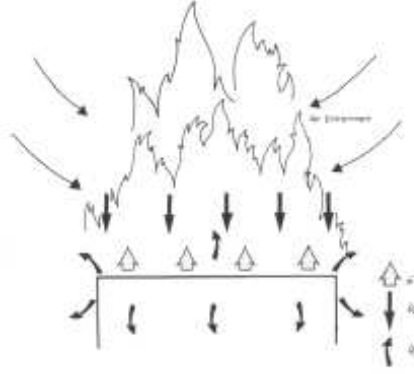


FIG. 1.6 – Bilan d'énergie sur la flamme

combustible :

$$\dot{m}'' = \frac{\dot{Q}_f'' - \dot{Q}_l''}{L_v} \quad (1.15)$$

$\dot{Q}_l''$ traduisant les transferts par conduction du bac contenant le liquide, convection et rayonnement de la flamme et $\dot{Q}_f''$ traduisant principalement la réémission du rayonnement de la flamme, soit :

$$\dot{Q}_f'' = \frac{\lambda}{D}(T_f - T_l) + h(T_f - T_l) + \sigma F_{f,l}(T_f^4 - T_l^4)(1 - e^{-kD}) \quad (1.16)$$

avec T_f et T_l les températures de la flamme et du liquide, λ et D la conductivité et le diamètre du bac, h le coefficient d'échange à la surface du combustible, σ la constante de Stephan et $F_{f,l}$ le facteur de forme entre la flamme et la surface du combustible.

Pour les petits diamètres, le débit de combustible est principalement contrôlé par la conduction et la convection. La flamme est alors très proche de la surface et le débit plus important sur les bords du foyer. Pour les grands diamètres, le rayonnement est

prépondérant [5]. La flamme est séparée de la surface par des vapeurs combustibles et le débit est contrôlé par le rayonnement. Le débit de combustible peut alors être estimé à l'aide de la corrélation :

$$\dot{m}'' = \dot{m}_{\infty}''(1 - e^{-k\beta D}) \quad (1.17)$$

avec $\dot{m}_{\infty}''$ le débit massique surfacique pour un diamètre infini, k un coefficient d'extinction, β un facteur correctif et D le diamètre du foyer. Babrauskas [5] propose des valeurs expérimentales pour les paramètres $\dot{m}_{\infty}''$ et $k\beta$ pour quelques combustibles. Ce type de loi ne permet pas de traduire directement l'effet local de la taille du foyer sur le débit de combustible mais uniquement pour l'ensemble de la surface combustible.

Les combustibles solides et autres hydrocarbures lourds subissent des décompositions dégageant des vapeurs combustibles. Le débit de ces vapeurs est alors fortement conditionné par la composition du matériau. Une manière simple de représenter le débit massique surfacique est d'utiliser une loi d'Arrhenius [5, 98] :

$$\dot{m}'' = A e^{-E_a/RT} \quad (1.18)$$

Le facteur préexponentiel A et l'énergie d'activation E_a dépendent du matériau considéré. Le flux de chaleur reçu par le matériau solide par rayonnement dépend également de sa configuration. Une pile de palettes de bois ne brûle pas au même rythme qu'un morceau massif de bois du même poids.

1.5 Feux de compartiment

Le confinement d'un foyer dans un compartiment modifie profondément le comportement du feu et ses conséquences sur son environnement (toxicité de l'air ambiant, dégradation des structures, etc.) principalement par l'intermédiaire des fumées piégées sous le plafond. De nouveaux phénomènes font alors leur apparition tels que la propagation du foyer principal aux foyers secondaires par rayonnement ou l'apparition de flammes fantômes aux interfaces fumées-air frais. De nouveaux couplages se mettent en place modifiant alors le comportement de l'incendie par rapport à un feu à l'air libre.

La puissance d'un feu à l'air libre est limitée par le débit et la quantité de combustible disponible. L'évolution de la puissance d'un feu confiné est aussi conditionnée par les conditions de ventilation et l'inertie thermique des parois. On peut alors dégager plusieurs phases caractéristiques résumées sur la figure 1.7, les différents types de régimes étant surtout liés à la ventilation qui fixe l'apport d'oxygène.

Ces courbes représentent une valeur moyenne dans l'enceinte de confinement et ne sont représentatives que d'un seul foyer, l'apparition de foyers secondaires, de nouvelles ouvertures ou la mise en route de ventilations mécaniques les modifiant.

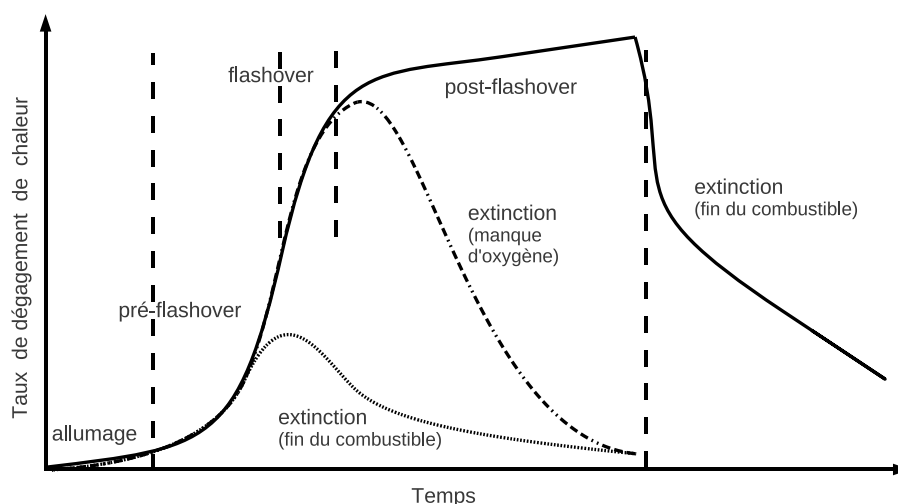


FIG. 1.7 – Les différentes phases d'un incendie

1.5.1 L'allumage

Les origines d'un incendie sont très variées. Parmi les diverses causes telles que le mégot de cigarette, l'échauffement d'une lampe, d'un projecteur ou d'une réaction chimique, le court-circuit électrique est l'origine la plus fréquente. L'échauffement, à proximité d'un matériau combustible, solide ou liquide, provoque alors un dégagement de combustible qui pourra s'enflammer si la température est localement assez élevée.

1.5.2 La croissance ou pré-flashover

Une fois le combustible primaire enflammé, le feu se développe de la même manière qu'à l'air libre, la flamme se propageant sur une surface de plus en plus grande. Le débit de combustible croît, la surface combustible recevant de l'énergie par convection ou rayonnement. Contrairement à une situation à l'air libre, les fumées et donc l'énergie qui s'échappent par convection dans le panache, ne sont pas dispersées mais piégées sous le plafond et rayonnent vers le sol, ajoutant leur contribution au rayonnement de la flamme. L'effet du confinement entraîne le feu dans la phase du flashover.

La durée de cette phase est primordiale car elle conditionne les chances de survie des occupants. Plus ce temps est long, plus les occasions de détection, intervention ou mise en sécurité seront nombreuses, augmentant les chances de survie. Il dépend des combustibles présents qui s'enflamment plus ou moins rapidement, peuvent se liquéfier sur d'autres combustibles (plastiques), de leur géométrie et de leur position et est donc très difficile à déterminer.

1.5.3 L'embrasement généralisé ou flashover

Le flashover est très rapide en comparaison de la durée de l'incendie et il est difficile de donner une définition exacte car ses origines sont multiples et dépendent de la configuration des locaux. Cependant, que ce soit un flux de chaleur de 20 kW/m^2 ou une température au plafond atteignant 600°C [5], c'est bien l'énergie reçue par convection ou rayonnement qui est à son origine, causant une propagation rapide de la flamme à l'ensemble du foyer initial ainsi qu'aux surfaces combustibles proches. Le débit de combustible augmente suite à l'augmentation de la pyrolyse (le débit surfacique varie peu) et à l'augmentation de la surface pyrolysée.

Les fumées piégées sous le plafond forment une couche dont l'épaisseur dépend du débit de combustible, du rendement de la combustion et de la configuration géométrique des lieux. Les deux premiers paramètres fixent la quantité de fumées créées et le dernier, leur débit d'évacuation. Ces fumées chauffent les parois et le plafond qui à leur tour rayonnent

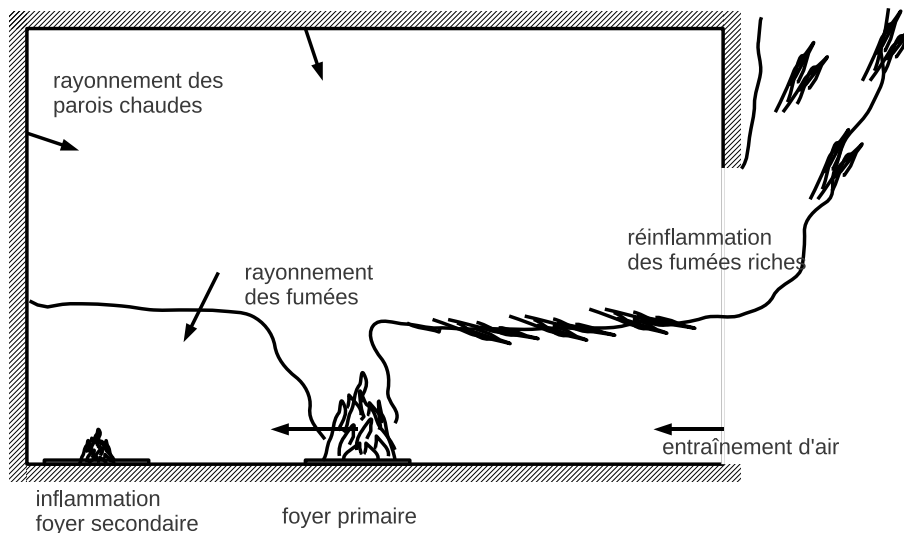


FIG. 1.8 – Conditions et caractéristiques d'un embrasement généralisé

vers le sol. L'énergie prélevée par les parois peut localement refroidir ces fumées qui vont descendre se mêler à l'air frais et pourront être entraînées, à nouveau, dans le panache.

Les fumées, principalement constituées de gaz de combustion et de suies (mis à part les combustibles ne produisant pas de suies tels que les alcools), rayonnent elles aussi vers le sol. Enfin des fumées riches, résultant d'un entraînement d'air frais trop faible dans le panache, peuvent se réinflammer à l'interface fumées-air frais, où l'on retrouve un rapport stœchiométrique permettant la combustion. Lorsque ces flammes se trouvent au niveau des ouvertures (Fig. 1.8), on est sûr que le flashover est atteint.

1.5.4 Le feu pleinement développé ou post-flashover

Alors que les critères de survie des occupants de locaux en feu sont liés aux conditions de réalisation du flashover (densité de fumées toxiques, température), le feu pleinement développé, lui, porte atteinte à la structure du bâtiment. En effet, les températures rencontrées lors du flashover sont de l'ordre de 600 °C, critique pour tout être vivant, contre 1300 à 1400 °C, température de détérioration du béton par exemple.

Rapidement, le régime du foyer n'est plus uniquement déterminé par l'apport de combustible, mais également par les dimensions du local en feu, des ouvertures et leur position, déterminant l'apport en oxygène.

On peut distinguer deux régimes de fonctionnement : contrôlé par la ventilation ou contrôlé par le combustible, ce régime dépendant finalement du rapport air-combustible du local (Fig. 1.9). Ainsi tout ce qui affecte le débit de combustible et le débit d'air, affecte le régime du feu pleinement développé. La surface du compartiment qui rayonne vers la surface combustible influence le débit de pyrolyse. La surface de l'ouverture $A_0\sqrt{H}$ contrôle l'alimentation du compartiment en oxydant. La configuration des combustibles principalement à travers la surface exposée A_f conditionne le flux reçu par rayonnement.

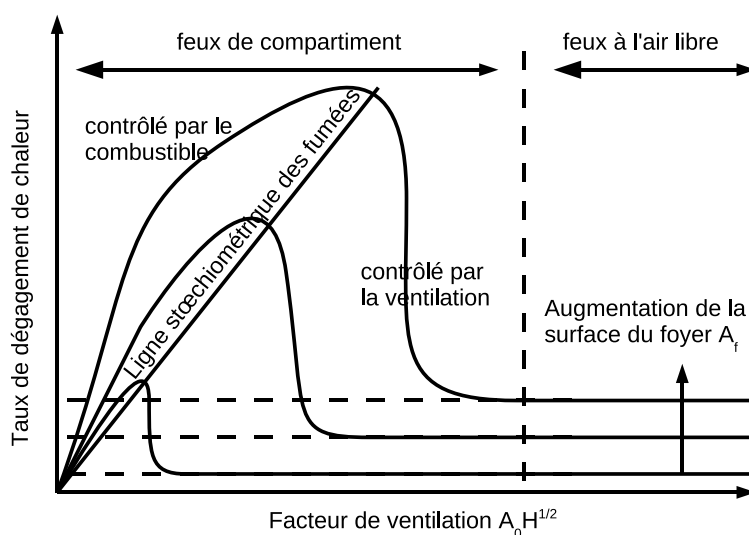


FIG. 1.9 – Influence de différents paramètres sur le post-flashover [33]

Chaque régime possède alors des caractéristiques distinctes : des flammes à l'ouverture pour les feux contrôlés par la ventilation, stratification pour les feux contrôlés par le combustible, les taux de dégagements de chaleur les plus forts étant obtenus pour des feux légèrement sous-ventilés.

1.5.5 L'extinction

L'extinction se produit lorsqu'un des deux réactifs vient à manquer. Si c'est le combustible, le feu s'arrête simplement. Malheureusement dans la plupart des feux confinés,

tout ou presque à l'exception des murs est combustible et le feu ne s'éteint naturellement qu'après la destruction du bâtiment.

Si c'est l'oxygène qui vient à manquer, les hautes températures engendrées suite au flashover peuvent maintenir la pyrolyse, mais l'absence d'oxygène ne permet pas la combustion des produits de pyrolyse. Suite à l'ouverture de porte, ou d'une vitre brisée, un apport d'air frais permet la réinflammation de ce combustible conduisant à un retour de flamme dit *backdraft*. Il correspond à la combustion rapide des imbrûlés à l'interface fumées-air frais créant un souffle vers l'extérieur.

1.6 Influence de la ventilation

Dans un feu de nappe à l'air libre, la flamme est constamment alimentée en oxygène permettant une combustion quasi-complète. Le principal impact du confinement est de limiter cette alimentation en oxygène.

Il faut différencier la ventilation naturelle, à travers une porte par exemple, et la ventilation mécanique forcée correspondant à des systèmes de ventilation ou d'extraction de fumées. Les débits obtenus à travers ces dernières sont nettement plus faibles que ceux obtenus à travers les ouvertures, ce qui va réduire le débit d'air alimentant la flamme. Parmi les ouvertures, il faut différencier les ouvertures verticales (porte) et les ouvertures horizontales (trappe de désenfumage au plafond), la convection naturelle augmentant le débit de ces dernières.

Quel que soit le type d'ouverture, le comportement du feu est souvent dépendant du niveau de ventilation. On peut alors faire la distinction entre les feux bien ventilés et les feux sous-ventilés.

1.6.1 Feux bien ventilés

Un feu est bien ventilé quand le débit d'air est suffisant pour alimenter la flamme en oxygène et permettre la combustion. Les fumées qui se dégagent du panache sont piégées sous le plafond ; une stratification s'installe dans la pièce, avec une zone de fumées chaudes et une zone d'air frais.

Cette stratification reste toutefois modeste tant que la flamme est suffisamment alimentée en oxygène. Cette alimentation se fait grâce à un gradient de pression relativement stable au niveau de l'ouverture. Le local, en surpression suite à la dilatation des gaz chauds, passe progressivement en dépression à mesure que les fumées le remplissent (Fig. 1.10). L'entraînement d'air créé par la flamme met alors le local en dépression au niveau du sol et en surpression dans la couche de fumées. Cet équilibre des pressions peut s'apparenter à celui créé par une pompe (le panache) entre l'air frais et les fumées.

Tant que le local est en dépression, la flamme est alimentée en oxygène et tout ou partie de la combustion se fait dans le local. Typiquement, un feu est généralement contrôlé par le débit de combustible avant le flashover puis contrôlé par la ventilation.

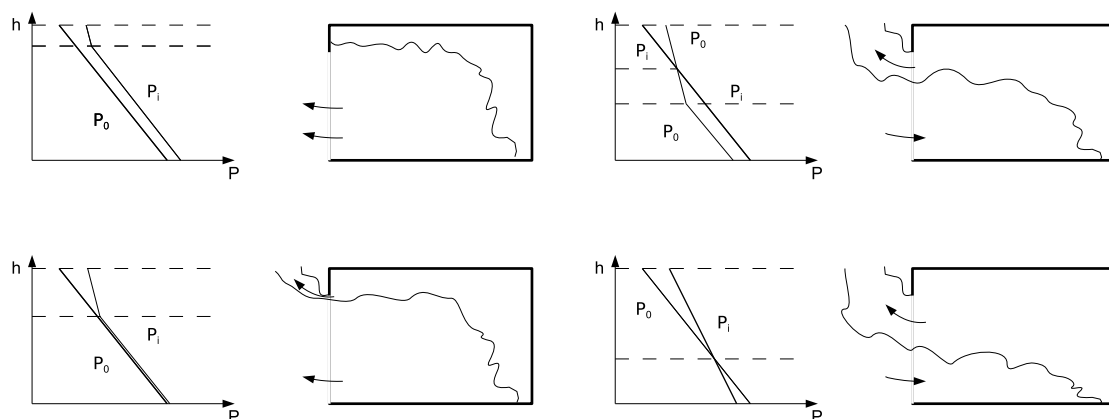


FIG. 1.10 – Influence de la ventilation naturelle
(P_0 : pression extérieure, P_i : pression interne)

1.6.2 Feux sous-ventilés

Un feu est sous-ventilé lorsque le débit d'air est insuffisant pour alimenter la flamme en oxygène. Le caractère sous-ventilé de l'incendie peut être estimé à l'aide d'une richesse globale, inférieure à 1 lorsque le feu est bien ventilé et supérieure à 1 lorsque le feu est sous-ventilé [117]. La combustion est alors très difficile et la production d'imbrûlés est très importante, remplissant complètement le local. Si les températures des fumées ou des parois sont assez élevées, elles peuvent rayonner et continuer à pyrolyser les combustibles. Selon la configuration des lieux, et en particulier les conditions de ventilation, différents phénomènes peuvent être observés.

Dans le cas d'un local hermétiquement fermé, l'apport d'oxygène est impossible et le feu meurt après avoir consommé tout l'oxygène initialement présent, c'est l'extinction. La flamme s'éteint lorsque les limites d'inflammabilité sont atteintes. Celles-ci sont dépendantes de la pression et de la température et sont généralement atteintes en-dessous de 10 à 12 % d'oxygène mais peuvent localement atteindre des taux plus bas (3 à 4 % d'oxygène [97]). Dans ces conditions et selon les conditions de température, le feu couvant qui consomme le combustible sans flamme par une oxydation hétérogène peut toutefois se maintenir, produisant un mélange de monoxyde et de dioxyde de carbone susceptible de se réenflammer si un apport suffisant d'oxygène se produit.

L'extinction peut survenir même si le local n'est pas hermétiquement fermé. Si les ouvertures sont suffisamment faibles, le gradient de pression entre le haut et le bas de l'ouverture peut ne pas être suffisant et la surpression engendrée par la dilatation des gaz chauds maintient un débit de fumées vers l'extérieur empêchant l'air frais d'entrer.

Le feu mourant, l'air se refroidit dans la pièce, permettant alors à l'air frais de pénétrer dans le local et de raviver le foyer. Si l'extinction ne s'est pas produite, le feu peut repartir. On se retrouve dans une situation de sous-ventilation qui mène de nouveau à l'extinction.

Un cycle se met alors en place jusqu'à la consommation du combustible [52].

Pour des conditions de ventilation insuffisantes conduisant à de faibles concentrations en oxygène, la flamme peut se détacher de celui-ci et venir s'établir à l'ouverture, en se déplaçant dans le local ([4], [8], [25]). Si le foyer est suffisamment proche du plafond, la flamme, habituellement attachée au foyer, peut se détacher pour aller flotter sous le plafond formant une flamme bleue pour les faibles débits allant jusqu'au jaune pour des débits plus importants [25, 87]. Les flammes ne se trouvent plus à proximité de la source combustible mais là où le rapport stœchiométrique entre le combustible et l'oxygène est respecté, on parle alors de flammes fantômes.

Chapitre 2

Etat des connaissances relatives à la modélisation des flammes turbulentes de diffusion

L'incendie fait intervenir de nombreux phénomènes pour lesquels les connaissances sont bien plus avancées dans les communautés dédiées que dans la communauté incendie. En effet, l'étude des incendies est assez récente et les caractéristiques des écoulements ou des régimes de combustion par exemple ainsi que les couplages prépondérants peuvent être très éloignés. Une connaissance de chaque discipline est donc nécessaire mais les besoins et objectifs de la modélisation des incendies peuvent amener à des choix de modélisation différents. Dans ce chapitre sont donc présentés un état des connaissances relatives à la modélisation des écoulements réactifs turbulents et une synthèse des choix communément fait dans la communauté incendie. Ce chapitre n'a pas vocation à être exhaustif mais vise simplement à présenter les idées directrices des principales approches de modélisation.

Par la simulation numérique, on cherche à représenter les phénomènes physiques en discrétisant les équations continues qui les modélisent. Dans un incendie, ces phénomènes font principalement intervenir la mécanique des fluides, la turbulence, la combustion et le rayonnement. Ce dernier point fait l'objet d'un chapitre dédié.

Dans un premier temps, les équations générales de la mécanique des fluides sont rappelées ainsi que les hypothèses simplificatrices utilisées. Ensuite, les différentes approches de modélisation de la turbulence sont évoquées et les principaux modèles de turbulence pour l'approche RANS sont présentés. Enfin, la modélisation des flammes de diffusion est abordée d'abord dans un cadre laminaire puis dans un cadre turbulent. Une réflexion sur l'estimation de la puissance libérée par une flamme est également proposée.

2.1 Mécanique des fluides

Un bilan de masse, des forces ou quantité de mouvement et d'énergie sur un élément de volume donne accès à l'écoulement à chaque instant en tout point du domaine. Un bilan sur une ou plusieurs espèces chimiques permet également de rendre compte de l'évolution de la composition de l'écoulement. Chaque bilan peut être mis sous la forme d'une équation de transport (Eq. 2.1), ce qui permet d'établir un système dont les composantes sont données par 2.2 avec ϕ les variables ($\underline{u}$ la vitesse, Y_i les espèces, h_t l'enthalpie totale), J_ϕ les flux de diffusion et S_ϕ les termes sources [132]. Les équations pour chaque composante du vecteur $(1, \underline{u}, Y_i, h_t)$ correspondent aux bilans de masse, quantité de mouvement, espèces et énergie.

$$\frac{\partial \rho \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \underline{u} \phi) = \nabla \cdot (-J_\phi) + S_\phi \quad (2.1)$$

Dans les flux de diffusion sont répertoriés les forces de pression P , le tenseur des contraintes visqueuses $\underline{\tau}$, le flux de diffusion moléculaire des espèces de coefficient de diffusion D_i , le flux de chaleur $\underline{q}$ et le travail des forces visqueuses $\underline{\tau} \cdot \underline{u}$.

Dans les termes sources sont répertoriés le terme source de masse Γ , les forces de volume $\rho \underline{f}$ (gravité, électromagnétisme), les termes de production ou consommation d'espèces chimiques $\dot{\omega}_i$, le travail des forces de pression $\frac{\partial P}{\partial t}$, le travail des forces extérieures $\rho \underline{u} \cdot \underline{f}$ et les sources de chaleur $\dot{q}'''$.

$$\phi = \begin{pmatrix} 1 \\ \underline{u} \\ Y_i \\ h_t \end{pmatrix} \quad J_\phi = \begin{pmatrix} 0 \\ P \underline{I} - \underline{\tau} \\ -\rho D_i \nabla Y_i \\ \underline{q} - \underline{\tau} \cdot \underline{u} \end{pmatrix} \quad S_\phi = \begin{pmatrix} \Gamma \\ \rho \underline{f} \\ \rho \dot{\omega}_i \\ \frac{\partial P}{\partial t} + \rho \underline{u} \cdot \underline{f} + \dot{q}''' \end{pmatrix} \quad (2.2)$$

Quantité de mouvement

Pour un fluide newtonien, le tenseur des contraintes visqueuses $\underline{\tau}$ est proportionnel à la partie symétrique du tenseur des taux de déformation $\underline{S}$.

$$\underline{\tau} = 2\mu \underline{S} + \eta \operatorname{tr}(\underline{S}) \underline{I} \quad \text{avec} \quad \underline{S} = \frac{1}{2} (\underline{\nabla} \underline{u} + {}^t \underline{\nabla} \underline{u}) \quad (2.3)$$

Les coefficients de Lamé μ et η , première et seconde viscosités dynamiques, relient le tenseur des déformations respectivement à la déformation linéaire (proportionnelle au gradient de vitesse) et à la déformation volumique. Pour la plupart des fluides peu visqueux pour lesquels les forces de viscosité de volume ne travaillent pas, la viscosité de volume κ est nulle (hypothèse de Stokes).

$$\kappa = \eta + \frac{2}{3}\mu = 0 \quad (2.4)$$

Les forces de volume se limitent à l'effet de la pesanteur ($S_{\underline{u}} = \rho \underline{g}$). D'après la loi fondamentale de la statique des fluides, si la densité de l'air ambiant est constante,

$$\nabla P_0 = \rho_0 \underline{g} \quad (2.5)$$

les forces de pression atmosphériques P_0 sont en équilibre avec les forces de pesanteur. En écrivant la pression P comme la somme de la pression atmosphérique P_0 et d'une pression mécanique p , on fait apparaître le terme de flottabilité responsable de la convection naturelle et l'équation de quantité de mouvement se réécrit selon :

$$\frac{\partial \rho \underline{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \underline{u} \otimes \underline{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot \underline{\underline{\tau}} + (\rho - \rho_0) \underline{g} \quad (2.6)$$

Equation de l'énergie

L'enthalpie totale est constituée de l'énergie interne et du travail des forces de pression regroupés dans l'enthalpie thermodynamique h ainsi que de l'énergie cinétique.

$$h_t = e + \frac{P}{\rho} + e_c = h + e_c \quad (2.7)$$

Le domaine d'étude se limitant à des écoulements à faible nombre de Mach, l'effet des variations de pression ainsi que le travail des forces visqueuses est négligé, de même que le travail des forces extérieures. Dans le flux de chaleur est pris en compte la chaleur conduite par le fluide de conductivité λ (loi de Fourier). L'effet Dufour (diffusion de la chaleur par la diffusion des espèces) ainsi que l'effet Sorret (diffusion des espèces par la diffusion de la chaleur) sont négligés.

$$\underline{\dot{q}} = -\lambda \nabla T \quad (2.8)$$

En l'absence de source de chaleur extérieure, le terme correspondant $\dot{q}'''$ représente les pertes thermiques (conduction, rayonnement), les changements d'état et/ou les réactions chimiques sont pris en compte dans la définition de l'enthalpie h respectivement par l'enthalpie sensible et par l'enthalpie de réaction $\Delta_r h^0$.

$$h = \sum_i Y_i h_i = \sum_i Y_i \left(h_{f_i} + \int_{T_{ref}}^T C_{p_i} dT \right) = \Delta_r h^0 + \int_{T_{ref}}^T \sum_i Y_i C_{p_i} dT \quad (2.9)$$

Reste à définir une loi d'état pour le fluide que l'on prendra comme un mélange de gaz parfaits. Cette dernière hypothèse permet d'obtenir la masse volumique d'après la température (via l'enthalpie) et la composition du fluide avec R la constante des gaz parfaits et $\mathcal{M}_i$ la masse molaire des espèces :

$$P = \rho R T \sum_i \frac{Y_i}{\mathcal{M}_i} \quad (2.10)$$

ainsi que le volume massique :

$$\frac{1}{\rho} = \frac{R}{P} T \sum_i \frac{Y_i}{\mathcal{M}_i} \quad (2.11)$$

2.2 Approches de modélisation de la turbulence

La turbulence est visible dans beaucoup des écoulements rencontrés dans la vie courante (fumée, chute d'eau, vent) et la plupart des écoulements utilisés par les systèmes industriels (moteurs, pompes, ailes d'avion). Il en est de même pour les écoulements rencontrés dans un incendie.

Un écoulement laminaire devient turbulent lorsque la viscosité moléculaire ne suffit plus pour dissiper l'énergie liée au transfert convectif de quantité de mouvement dans les gradient de vitesse moyenne [61]. Les forces de cisaillement et de flottabilité amènent à la création d'instabilités de Kelvin-Helmoltz (tourbillons) qui sont amplifiées par le caractère non linéaire des équations de Navier-Stokes. Tel que montré par Reynolds, l'écoulement peut être caractérisé par le nombre qui porte son nom (Eq. 2.12) et devient turbulent entre des nombres de Reynolds de 2000 à 4000 pour un écoulement en conduite de section circulaire. Dans un écoulement quelconque, ce critère dépend des échelles caractéristiques choisies

$$Re = \frac{UL}{\nu} \quad (2.12)$$

U , L et ν sont respectivement la vitesse du fluide, une grandeur caractéristique de l'écoulement et la viscosité cinématique du fluide.

Intervenant dans une large plage de phénomènes physiques, la turbulence est difficile à définir précisément. Néanmoins, les écoulements turbulents possèdent un certain nombre de propriétés [34]. Ils sont instationnaires, tridimensionnels, rotationnels. Ils augmentent le mélange par la diffusion dite turbulente et dissipent l'énergie. Enfin, des structures cohérentes sont présentes dans l'écoulement dont les tailles et vitesses couvrent une large plage d'échelle de temps et d'espace.

C'est l'évolution des structures tourbillonnaires qui assurent la dissipation de l'énergie. L'énergie créée par les forces de cisaillement de l'écoulement est d'abord transformée en énergie cinétique de rotation dans les plus grosses structures (échelle intégrale). Celles-ci se décomposent en structures plus petites (échelle de Taylor) et l'énergie cinétique est transmise de proche en proche jusqu'à l'échelle moléculaire (échelle de Kolmogorov) où elle est dissipée par frottement en chaleur. Cette notion de cascade d'énergie dite de Kolmogorov [57] assure le passage d'une turbulence fortement anisotrope aux grandes échelles à une turbulence isotrope aux plus petites échelles. Le spectre d'énergie turbulente en fonction de la fréquence de rotation des tourbillons (Fig. 2.1) permet de mettre en valeur les trois zones d'échelles.

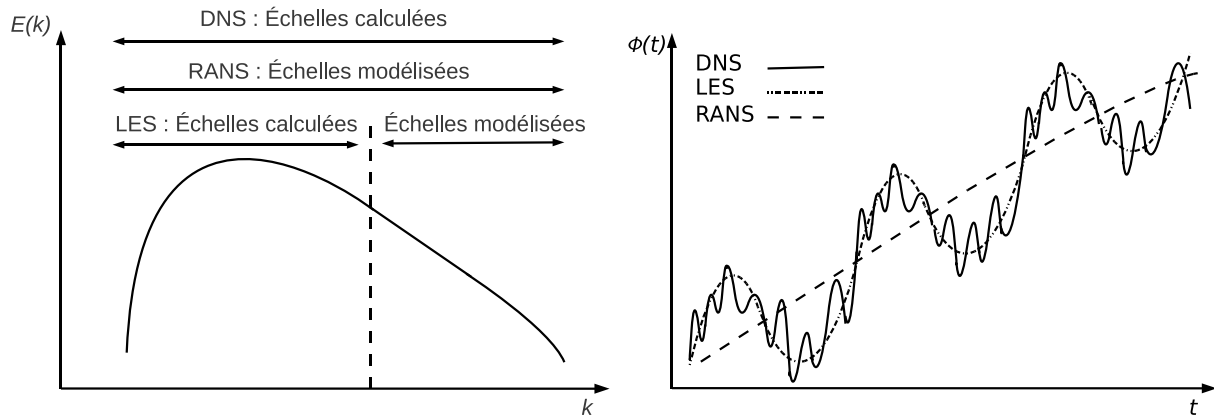


FIG. 2.1 – Comparaison des approches RANS, LES et DNS dans l'espace spectral et dans l'espace temporel

Il existe principalement quatre catégories d'approches pour la modélisation de la turbulence [34] dont la finesse est illustrée par la figure 2.1 :

- les *corrélations* issues d'expériences ou d'approches intégrales : elles donnent des ordres de grandeur (coefficients de frottement, d'échange) en fonction des nombres adimensionnels de l'écoulement (nombre de Reynolds, de Nusselt, de Prandtl),

- l'*approche statistique* : des équations moyennes au sens de Reynolds (Reynolds Averaged Navier-Stokes equations) sont résolues après l'application de moyennes d'ensemble ou temporelles (voir p. 31) aux équations de l'écoulement. Dans cette approche, l'ensemble du spectre turbulent est modélisé et seules les fréquences les plus basses de l'écoulement moyen sont captées.

- la *simulation aux grandes échelles* ou *Large Eddy Simulation* (LES) : les grandes échelles de l'écoulement sont résolues alors que les plus petites sont modélisées ce qui permet de capter une plus grande gamme de fréquences.

- la *simulation numérique directe* ou *Direct Numerical Simulation* (DNS) : les équations de l'écoulement sont résolues exactement sur l'ensemble du spectre turbulent et toutes les fréquences de l'écoulement peuvent être captées.

2.2.1 Direct Numerical Simulation

Dans une DNS, toutes les échelles de l'écoulement sont résolues ce qui donne accès à des informations détaillées sur l'écoulement (production, développement et dissipation de la turbulence, comportement en proche paroi). Cela implique que le domaine de calcul soit de la taille du domaine physique ou au moins de quelques fois la taille de la plus grande structure caractérisée par l'échelle intégrale de la turbulence L . Cela implique aussi que la taille de maille utilisée soit au moins celle des plus petites échelles de la turbulence (échelle de Kolmogorov η). Le nombre de points utilisés dans chaque direction est donc

(L/η) , proportionnel à $Re_L^{3/4}$ où Re_L est le nombre de Reynolds lié à l'échelle intégrale. Une simulation tridimensionnelle instationnaire coûte donc Re^3 mailles. Avec la puissance de calcul actuelle, cette approche ne peut être appliquée qu'à des configurations académiques (écoulement en canal, écoulement cisailé) en utilisant des méthodes numériques adaptées pour chaque cas. La DNS est donc plus un outil de recherche fondamentale utilisé comme une expérience numérique pour comprendre des phénomènes que l'expérience n'est pas encore capable de capturer.

2.2.2 Large Eddy Simulation

Dans un écoulement turbulent, les grandes échelles contiennent plus d'énergie que les petites échelles et assurent la majeure partie du transport de l'information. C'est sur ce constat qu'est basée la LES. Les grandes échelles sont résolues et les plus petites modélisées. La distinction est faite au moyen d'un filtre F défini par :

$$\bar{\phi}(\underline{x}, t) = \int \phi(\underline{x}', t) F(\underline{x}, \underline{x}') d\underline{x}' \quad (2.13)$$

Les grandeurs calculées ϕ se décomposent alors en une partie filtrée $\bar{\phi}$ et une fluctuation ϕ' selon la relation :

$$\phi(\underline{x}, t) = \bar{\phi}(\underline{x}, t) + \phi'(\underline{x}, t) \quad (2.14)$$

Appliquée à l'équation de la quantité de mouvement (ici à masse volumique constante),

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \bar{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho \bar{u}_j \bar{u}_i) = -\frac{\partial}{\partial x_j} [\rho (\overline{u_j u_i} - \bar{u}_j \bar{u}_i)] - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial \bar{\tau}_{ij}}{\partial x_j} + (\rho - \rho_0) g_i \quad (2.15)$$

cette opération fait apparaître un nouveau terme, les tensions de Reynolds de sous-maille. En effet, puisque $\overline{u_i u_j} \neq \bar{u}_i \bar{u}_j$, et que la quantité $\overline{u_i u_j}$ est difficile à calculer, c'est le tenseur de sous-maille τ_{ij}^s qui est modélisé.

$$\tau_{ij}^s = -\rho (\overline{u_i u_j} - \bar{u}_i \bar{u}_j) \quad (2.16)$$

Il traduit l'influence des petites structures turbulentes sur l'écoulement. Pour exemple, on peut citer le premier modèle et le plus utilisé, le modèle à viscosité de Smagorinsky [110] qui traduit l'augmentation du transport et de la dissipation par la turbulence :

$$\tau_{ij}^s - \frac{1}{3} \tau_{kk}^s \delta_{ij} = -2\mu_t \bar{S}_{ij} \text{ avec } \mu_t = C_s^2 \rho \Delta^2 \sqrt{\bar{S}_{ij} \bar{S}_{ij}} \quad (2.17)$$

μ_t est une viscosité turbulente, C_s une constante du modèle à déterminer et Δ la taille du filtre.

L'approche a été approfondie et donne de bons résultats malgré quelques difficultés notamment pour le traitement en proche paroi [34]. De plus, les coûts de calculs restent élevés car la qualité de la solution dépend beaucoup du filtre et du maillage utilisés.

2.2.3 Reynolds Average Navier-Stokes simulation

L'approche statistique proposée par Reynolds modélise l'ensemble du spectre turbulent. Les grandeurs de l'écoulement ϕ sont décomposées en une moyenne $\bar{\phi}$ et une fluctuation ϕ' selon :

$$\phi(\underline{x}, t) = \bar{\phi}(\underline{x}) + \phi'(\underline{x}, t) \quad (2.18)$$

Lorsque l'écoulement moyen est stationnaire, la moyenne est temporelle :

$$\bar{\phi}(\underline{x}) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T \phi(\underline{x}, t) dt \quad (2.19)$$

T est le temps d'intégration et doit être grand par rapport au temps caractéristique de la turbulence. Lorsque l'écoulement moyen est instationnaire, la moyenne est d'ensemble :

$$\bar{\phi}(\underline{x}, t) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_1^N \phi(\underline{x}, t) \quad (2.20)$$

N est le nombre de réalisations d'un événement, ici l'écoulement. Sous l'hypothèse qu'un grand nombre de réalisations N est équivalent à une moyenne temporelle de temps T (hypothèse d'ergodicité), ces deux moyennes sont égales. Ainsi est traduite la vision de la turbulence comme un processus aléatoire qui peut être modélisé par une approche statistique.

Appliquée à l'équation de la quantité de mouvement (ici à masse volumique constante),

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \bar{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho \bar{u}_j \bar{u}_i + \rho \overline{u'_j u'_i}) = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial \bar{\tau}_{ij}}{\partial x_j} + (\rho - \rho_0) g_i \quad (2.21)$$

cette opération fait apparaître un nouveau terme, les tensions de Reynolds $\overline{u'_j u'_i}$. Comme pour la LES, c'est ce terme qui est modélisé. Le formalisme est le même mais les hypothèses sous-jacentes sont bien différentes. Alors que les tensions de Reynolds de sous-maille de l'approche LES tendent vers une valeur nulle lorsque la taille de maille tend vers l'échelle de Kolmogorov, les tensions de Reynolds de l'approche RANS ne tendent pas vers une valeur nulle car elles traduisent l'effet de toutes les échelles de turbulence sur l'écoulement.

Cette approche permet de capturer l'écoulement moyen pour les écoulements statistiquement stationnaires. Lorsque l'écoulement est instationnaire, elle permet également de capturer les structures tourbillonnaires de l'écoulement moyen résolu fortement dépendantes de la taille de maille employée. Cependant, les effets instationnaires liés à la turbulence ne sont pas pris en compte par le processus statistique.

Les écoulements rencontrés dans les incendies sont dominés par les grandes structures mises en place par la convection naturelle. La gamme d'échelle rencontrée allant de l'épaisseur de flamme (de l'ordre du micromètre) jusqu'aux dimensions d'un bâtiment (de l'ordre de la dizaine de mètres) est bien trop importante pour espérer résoudre toutes les échelles. La DNS n'est donc pas envisageable. La LES est devenue une voie populaire dans la mesure

où elle résout exactement les grandes échelles de l'écoulement ici importantes. Cependant, capter correctement les plus grandes échelles de la flamme demande un coût de calcul relativement important en regard des applications industrielles visées. De plus les modèles de sous-maille nécessitent encore une mise au point pour être fiables et prédictifs. Le choix de modélisation se porte donc sur l'approche RANS. Moins coûteuse en temps de calcul, elle permet tout de même de capter l'écoulement moyen et l'effet de la turbulence sur celui-ci. Les modèles robustes et éprouvés existants permettent ainsi un travail plus aisé sur la prise en compte d'autres phénomènes tout aussi importants que la turbulence dans les incendies.

2.2.4 Ecoulements à masse volumique variable

Pour les écoulements à masse volumique variable, l'utilisation de la moyenne de Reynolds (ou du filtre précédemment défini pour la LES) fait apparaître des fluctuations de densité lors de la décomposition de la densité :

$$\overline{\rho\phi} = \overline{\rho}\overline{\phi} + \overline{\rho'\phi'} \quad (2.22)$$

La décomposition des grandeurs à l'aide de la moyenne de Favre définie par :

$$\overline{\rho}\widetilde{\phi}(\underline{x}, t) = \overline{\rho\phi}(\underline{x}, t) \quad \text{avec} \quad \phi = \widetilde{\phi} + \phi'' \quad \text{et} \quad \widetilde{\phi''} = 0 \quad (2.23)$$

permet d'éviter la modélisation des corrélations impliquant les fluctuations de densité. Appliquée à l'équation de la quantité de mouvement, l'équation obtenue est de la même forme que celle obtenue avec la moyenne de Reynolds :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\overline{\rho}\widetilde{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\overline{\rho}\widetilde{u}_j\widetilde{u}_i + \overline{\rho}\widetilde{u_j''u_i''} \right) = -\frac{\partial \overline{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial \overline{\tau}_{ij}}{\partial x_j} + (\overline{\rho} - \rho_0)g_i \quad (2.24)$$

De la même manière, un nouveau terme apparaît, les tensions de Reynolds $\widetilde{u_j''u_i''}$ au sens de Favre. Les écoulements traités par la suite étant à masse volumique variable, le formalisme de Favre est conservé.

2.3 Modélisation des flux turbulents

En appliquant l'opérateur de moyenne à l'équation de continuité, on obtient formellement la même équation où la densité et la vitesse moyennes remplacent les valeurs instantanées. Appliqué à l'équation de quantité de mouvement (Eq. 2.24), un nouveau terme apparaît, les tensions de Reynolds R_{ij} :

$$R_{ij} = \widetilde{u_i'' u_j''} \quad (2.25)$$

Il en est de même pour l'équation d'un scalaire :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{\phi}) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{\phi} + \bar{\rho} \widetilde{u_j'' \phi''}) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\rho} D_\phi \frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial x_j} \right) + \bar{S}_\phi \quad (2.26)$$

qui fait apparaître un flux turbulent $\widetilde{u_j'' \phi''}$.

Une équation pour chaque tension de Reynolds peut être dérivée des équations moyennes et instantanées pour la quantité de mouvement [103] :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \widetilde{u_i'' u_j''}) + \frac{\partial}{\partial x_k} (\bar{\rho} \tilde{u}_k \widetilde{u_i'' u_j''}) = D_{ij} + P_{ij} + \varphi_{ij} - \bar{\rho} \varepsilon_{ij} \quad (2.27)$$

Contribuent à l'évolution des tensions de Reynolds :

- la diffusion moléculaire et turbulente

$$D_{ij} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\mu \frac{\partial \widetilde{u_i'' u_j''}}{\partial x_k} \right) - \frac{\partial}{\partial x_k} (\bar{\rho} \widetilde{u_k'' u_i'' u_j''}) \quad (2.28)$$

- la production par les gradients de vitesses moyennes

$$P_{ij} = -\bar{\rho} \widetilde{u_k'' u_i''} \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_k} - \bar{\rho} \widetilde{u_k'' u_j''} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_k} \quad (2.29)$$

- l'effet du gradient de pression moyen et de la gravité, la redistribution de l'énergie cinétique turbulente par les fluctuations de pression et une contribution à la diffusion des fluctuations de vitesse et de pression

$$\begin{aligned} \varphi_{ij} &= -\overline{u_i'' \left(\frac{\partial p}{\partial x_j} + \rho_0 g_j \right)} - \overline{u_j'' \left(\frac{\partial p}{\partial x_i} + \rho_0 g_i \right)} \\ &= -\overline{u_i'' \left(\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j} + \rho_0 g_j \right)} - \overline{u_j'' \left(\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \rho_0 g_i \right)} + \overline{p' \left(\frac{\partial u_i''}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j''}{\partial x_i} \right)} - \frac{\partial}{\partial x_k} (\overline{p' u_j''} \delta_{ik} + \overline{p' u_i''} \delta_{jk}) \end{aligned} \quad (2.30)$$

- la dissipation par les petites échelles

$$\bar{\rho} \varepsilon_{ij} = \tau_{jk} \frac{\partial \widetilde{u_i''}}{\partial x_k} + \tau_{ik} \frac{\partial \widetilde{u_j''}}{\partial x_k} \quad (2.31)$$

De la même manière, une équation pour chaque flux turbulent scalaire $\widetilde{u_i''\phi''}$ peut être dérivée à partir des équations moyennes et instantanées de la vitesse et du scalaire [103] :

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\widetilde{\bar{\rho} u_i'' \phi''} \right) + \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\widetilde{\bar{\rho} u_k u_i'' \phi''} \right) = D_{i\phi} + P_{i\phi} + \varphi_{i\phi} - \bar{\rho} \varepsilon_{i\phi} \quad (2.32)$$

Les termes sources pour les flux turbulents scalaires peuvent être déduits des termes sources pour les tensions de Reynolds en remplaçant les fluctuations de vitesse par les fluctuations des scalaires et le tenseur des contraintes visqueuses par les flux de diffusion scalaires.

Les termes de production peuvent être calculés exactement à l'inverse des autres termes (diffusion turbulente, corrélations vitesse-pression, dissipation). Des équations pourraient être dérivées mais des termes d'ordre supérieur apparaîtraient à l'image de la corrélation triple $(\widetilde{u_i'' u_j'' u_k''})$ dans l'équation pour les tensions de Reynolds.

Enfin, la connaissance de la moyenne d'un scalaire n'est pas toujours suffisante pour représenter l'effet de la turbulence sur celui-ci. Certains modèles demandent alors la connaissance des moments d'ordre supérieur tel que la variance du scalaire, dont l'équation est dérivée des équations moyenne et instantanée du scalaire [103] :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left(\widetilde{\bar{\rho} \phi''^2} \right) + \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\widetilde{\bar{\rho} u_k \phi''^2} \right) &= \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\overline{\rho D \frac{\partial \phi''^2}{\partial x_k}} - \overline{\rho u_k'' \phi''^2} \right) \\ &\quad - 2 \overline{\rho u_k'' \phi''} \frac{\partial \phi}{\partial x_k} - 2 \overline{\rho D \frac{\partial \phi}{\partial x_k} \frac{\partial \phi}{\partial x_k}} + 2 \overline{\phi'' S_\phi} \end{aligned} \quad (2.33)$$

2.3.1 Modèles au second ordre

Les modèles au second ordre résolvent les tensions de Reynolds (Eq. 2.27). Les termes inconnus sont souvent modélisés comme suit :

- le terme de diffusion est composé d'une partie laminaire connue et d'une partie turbulente modélisée à l'aide d'une hypothèse de diffusion dite gradient généralisé (GGDH) de Daly et Harlow [28] :

$$D_{ij}^T = - \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\widetilde{\bar{\rho} u_k'' u_i'' u_j''} \right) = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(C_s \frac{k}{\varepsilon} \widetilde{\bar{\rho} u_k'' u_l''} \frac{\partial \widetilde{u_i'' u_j''}}{\partial x_l} \right) \quad (2.34)$$

- l'effet du gradient de pression moyen et de la gravité ne nécessite que la modélisation de la fluctuation de vitesse $\overline{u_i''}$:

$$G_{ij} = - \overline{u_i''} \left(\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j} + \rho_0 g_j \right) - \overline{u_j''} \left(\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \rho_0 g_i \right) \quad (2.35)$$

- la redistribution de l'énergie cinétique turbulente par les fluctuations de pression est décomposée en un terme dit lent ou de retour à l'isotropie (C_1), un terme dit rapide

ou d'isotropisation de la production (C_2) [58] et un terme d'isotropisation des effets de variation de la masse volumique (C_3) [6] :

$$\begin{aligned}\Pi_{ij} = \overline{p' \left(\frac{\partial u_i''}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j''}{\partial x_i} \right)} &= C_1 \left(\overline{p} \varepsilon_{ij} - \overline{p} \varepsilon_{ll} \frac{\widetilde{u_i'' u_j''}}{2k} \right) \\ &+ C_2 \left(P_{ij} - P_{ll} \frac{\widetilde{u_i'' u_j''}}{2k} \right) \\ &+ C_3 \left(G_{ij} - G_{ll} \frac{\widetilde{u_i'' u_j''}}{2k} \right)\end{aligned}\quad (2.36)$$

- le terme de diffusion lié aux fluctuations de pression est généralement négligé devant les termes de diffusion laminaire et turbulent,

- la dissipation est décomposée en une partie isotrope et une partie déviatrice. Cette dernière est négligée en faisant l'hypothèse d'une isotropie des petites échelles de la turbulence ou prise en compte dans la modélisation du terme de redistribution Π_{ij} [96] :

$$\varepsilon_{ij} \sim \frac{2}{3} \varepsilon \delta_{ij} \quad (2.37)$$

Les équations pour les six composantes de la dissipation dérivées des équations de la quantité de mouvement sont alors remplacées par une équation pour la dissipation isotrope :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\overline{p} \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{p} \widetilde{u_j} \varepsilon) = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(C_\varepsilon \frac{k}{\varepsilon} \overline{p} \widetilde{u_k'' u_l''} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_l} \right) + C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{k} P_{ii} - \overline{p} C_{\varepsilon 2} \frac{\varepsilon^2}{k} + C_{\varepsilon 3} \frac{\varepsilon}{k} \varphi_{ii} \quad (2.38)$$

Les modèles au second ordre sont à même de représenter l'effet de l'anisotropie de la turbulence sur l'écoulement mais leur mise en œuvre et leur résolution sont assez lourdes. De plus, pour que le second ordre soit complet, les flux turbulents scalaires doivent aussi être résolus nécessitant un effort particulier dans le cas des écoulements réactifs pour prendre en compte l'effet de la réaction sur la turbulence [103]. Des modèles algébriques pour les tensions de Reynolds ont été développés mais posent de nombreux problèmes de convergence liés à leur complexité [29]. Les modèles au premier ordre permettent une résolution plus aisée de la turbulence mais au prix d'hypothèses fortes sur la physique.

2.3.2 Modèles au premier ordre

Les modèles au premier ordre reposent sur le concept de viscosité turbulente proposé par Boussinesq. La turbulence ayant tendance à augmenter le mélange par diffusion, le tenseur de Reynolds est modélisé par analogie avec le tenseur des contraintes visqueuses à l'aide d'une viscosité turbulence μ_t , propriété de l'écoulement et non pas du fluide :

$$\overline{p} \widetilde{u_i'' u_j''} - \frac{1}{3} \overline{p} \widetilde{u_k'' u_k''} \delta_{ij} = -\mu_t \left[\left(\frac{\partial \widetilde{u_i}}{\partial x_j} + \frac{\partial \widetilde{u_j}}{\partial x_i} \right) + \frac{2}{3} \frac{\partial \widetilde{u_k}}{\partial x_k} \delta_{ij} \right] \quad (2.39)$$

On définit alors l'énergie cinétique turbulente k comme la demi-trace du tenseur de Reynolds :

$$k = \frac{1}{2} \widetilde{u_i'' u_i''} \quad (2.40)$$

Cette analogie peut également être faite entre les flux turbulents scalaires et la diffusion scalaire (loi de Fick pour les espèces, loi de Fourier pour l'enthalpie) traduisant une hypothèse de diffusion par simple gradient (SGDH) :

$$\widetilde{\rho u_i'' \phi''} = -\frac{\mu_t}{\sigma_t} \frac{\partial \widetilde{\phi}}{\partial x_j} \quad (2.41)$$

Le problème est donc reporté sur la détermination de la viscosité turbulente. Plusieurs approches ont été développées telles que le modèle à longueur de mélange de Prandtl pour les écoulements 2D :

$$\mu_t = \bar{\rho} l_m^2 \left| \frac{\partial \widetilde{u}}{\partial y} \right| \quad (2.42)$$

où la longueur de mélange l_m est à ajuster en fonction du problème, le modèle à une équation de Prandtl-Kolmogorov

$$\mu_t = \bar{\rho} l_m k^{1/2} \quad (2.43)$$

où k est résolu par une équation de transport dérivée des équations pour les tensions de Reynolds :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} k) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \widetilde{u_j k}) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + P + G - \bar{\rho} \varepsilon \quad (2.44)$$

Le terme de production $P(= P_{ii})$ est naturellement fermé, le terme de diffusion D_{ii} est fermé par une loi gradient et les termes de pression moyenne et gravité $G(= G_{ii})$ nécessitent une modélisation qui sera discutée ultérieurement. Une incertitude subsiste sur la dissipation ε qui intervient dans l'équation pour k et la valeur de la longueur de mélange.

Les modèles à deux équations ont été proposés pour lever cette incertitude. Une des variables résolues est naturellement k . Le choix de la seconde variable (longueur de mélange l_m , fréquence turbulente ω) a donné lieu à plusieurs modèles mais le plus utilisé résout la dissipation ε . Naturellement présente dans l'équation pour k , elle peut être reliée à l'énergie cinétique turbulente en faisant l'hypothèse que l'on est proche de l'équilibre production-dissipation ($\varepsilon \sim k^{3/2}/l_m$), hypothèse valable pour les écoulements à haut nombre de Reynolds. Ainsi est construit le modèle haut-Reynolds $k - \varepsilon$. Launder et Spalding [60] ont proposé directement une équation modélisée pour ε basée sur la forme de celle de k :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \widetilde{u_j \varepsilon}) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{k} P - \bar{\rho} C_{\varepsilon 2} \frac{\varepsilon^2}{k} + C_{\varepsilon 3} \frac{\varepsilon}{k} G \quad (2.45)$$

où $C_{\varepsilon 1}$, $C_{\varepsilon 2}$ et $C_{\varepsilon 3}$ sont des constantes données dans le tableau 2.1.

La viscosité turbulente s'exprime alors à l'aide de l'équation 2.43 selon

$$\mu_t = \bar{\rho} C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (2.46)$$

où C_μ est une constante donnée dans le tableau 2.1.

Constante	C_μ	$C_{\varepsilon 1}$	$C_{\varepsilon 2}$	$C_{\varepsilon 3}$	σ_k	σ_ε	σ_t
Valeur	0.09	1.42	1.92	voir p. 38	1.0	1.3	0.7

TAB. 2.1 – Constantes du modèle $k - \varepsilon$

De six inconnues que sont les tensions de Reynolds, le problème est réduit à deux, l'énergie cinétique turbulence et sa dissipation permettant de calculer la viscosité turbulente. La résolution est simplifiée, mais la représentation de la physique également : les différentes composantes du tenseur de Reynolds n'étant plus résolues, la viscosité turbulente ne permet de rendre compte que d'un effet isotrope de la turbulence sur l'écoulement, ce qui est pénalisant dans les cas de forte anisotropie.

2.3.3 Variances et dissipations scalaires

L'équation pour la variance du scalaire contrôle l'évolution des fluctuations du scalaire par le mélange turbulent. Son équation (Eq. 2.33) fait apparaître un flux turbulent et un terme de production par le gradient moyen qui sont soit connus pour les modèles au second ordre soit fermés à l'aide de la formulation SGDH. La corrélation impliquant le terme source réactif demande une modélisation propre à chaque physique considérée et ne sera pas développée ici. Le terme de dissipation peut être scindé en trois termes :

$$-2\rho D \overline{\frac{\partial \phi}{\partial x_k} \frac{\partial \phi}{\partial x_k}} = -2\rho D \overline{\frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial x_k} \frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial x_k}} - 2\rho D \overline{\frac{\partial \phi''}{\partial x_k} \frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial x_k}} - 2\rho D \overline{\frac{\partial \phi''}{\partial x_k} \frac{\partial \phi''}{\partial x_k}} \quad (2.47)$$

Les deux premiers termes sont le plus souvent négligés devant le troisième [119]. Le terme de dissipation contrôle la décroissance des fluctuations.

Il peut être décrit à l'aide d'une équation de transport, mais cette dernière fait apparaître de nombreuses corrélations qu'il faut à leur tour modéliser. Pour des nombres de Reynolds suffisamment élevés, la dégénérescence de cette équation de transport amène à une description simplifiée du mélange turbulent à l'aide d'un modèle de relaxation linéaire :

$$-2\rho D \overline{\frac{\partial \phi''}{\partial x_k} \frac{\partial \phi''}{\partial x_k}} \sim -\frac{\overline{\rho \phi''^2}}{R_\phi \tau_t} \quad (2.48)$$

où R_ϕ est une constante déterminée par l'expérience et τ_t un temps turbulent. A l'aide d'une formulation SGDH, l'équation pour les variances de scalaire s'écrit donc :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \widetilde{\phi''^2}) + \frac{\partial}{\partial x_k} (\bar{\rho} \widetilde{u_k \phi''^2}) &= \frac{\partial}{\partial x_k} \left[\left(\rho D + \frac{\mu_t}{\sigma_t} \right) \frac{\partial \phi''^2}{\partial x_k} \right] \\ &\quad - 2 \frac{\mu_t}{\sigma_t} \frac{\partial \widetilde{\phi}}{\partial x_k} \frac{\partial \widetilde{\phi}}{\partial x_k} - \frac{\bar{\rho} \widetilde{\phi''^2}}{R_\phi \tau_t} + 2 \overline{\phi'' S_\phi} \end{aligned} \quad (2.49)$$

2.3.4 Modélisation de la turbulence dans l'incendie

L'approche RANS a été largement utilisée pour la modélisation des panaches thermiques contrôlés par les effets gravitationnels [68].

Le modèle de turbulence $k - \varepsilon$ de Launder et Spalding [60] est généralement appliqué pour fermer les flux turbulents dans les équations de Navier-Stokes. Ce modèle reste populaire en raison de sa simplicité, sa robustesse numérique malgré les faiblesses constatées que sont la surestimation des vitesses et de la température aux centres de panaches thermiques et la sous prédiction de leur diffusion latérale [1, 71, 131] ou la surprédiction de la propagation des écoulements stratifiés [108].

Pour tenter de corriger ces défauts, des modifications ont été apportées au modèle portant sur les constantes du modèle, la fermeture des tensions de Reynolds ou sur la fermeture du terme de production de turbulence par la gravité.

Diffusion turbulente

La diffusion par la turbulence est contrôlée par la viscosité turbulente (Eq. 2.46) où intervient la constante C_μ et le nombre de Prandtl turbulent σ_t . Ces constantes calibrées par rapport à des expériences ont toutefois fait l'objet d'études qui montrent leur forte influence [82, 92], l'optimal étant obtenu pour un rapport C_μ/σ_t de 0,19 [92]. La valeur standard de C_μ de 0,09 a été calibrée sur de nombreuses expériences et malgré son influence, il semble hasardeux de modifier cette constante sans bases physiques.

Terme de flottabilité

La flottabilité est un moteur pour la création de quantité de mouvement dans les équations de Navier-Stokes, elle est également un moteur pour la création de la turbulence. La prise en compte de la flottabilité dans l'équation pour ε fait intervenir la constante $C_{\varepsilon 3}$ dont la valeur n'est pas très bien établie. L'équation 2.45 initialement proposée par Rodi [104] fait intervenir le nombre de Richardson R_i :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \widetilde{u_j \varepsilon}) &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + S_\varepsilon \\ S_\varepsilon &= C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{k} (P + G) (1 + C_{\varepsilon 3} R_i) - \bar{\rho} C_{\varepsilon 2} \frac{\varepsilon^2}{k} \end{aligned} \quad (2.50)$$

où R_i est défini par

$$R_i = -\frac{1}{2} \frac{G_l}{P + G} \quad (2.51)$$

$G_l = 0$ pour les stratifications instables et $G_l = 2G$ pour les stratifications stables. L'équation pour la dissipation prend alors deux formes selon le type d'écoulement :

$$\begin{aligned} S_\varepsilon &= C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{k} (P + G) - \bar{\rho} C_{\varepsilon 2} \frac{\varepsilon^2}{k} && \text{pour les stratifications instables} \\ S_\varepsilon &= C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{k} [P + (1 - C_{\varepsilon 3})G] - \bar{\rho} C_{\varepsilon 2} \frac{\varepsilon^2}{k} && \text{pour les stratifications stables} \end{aligned} \quad (2.52)$$

Un grand nombre de valeur a été proposé pour la constante $C_{\varepsilon 3}$, l'influence de cette dernière étant variable selon les auteurs [68]. Afin de ne conserver qu'une forme de l'équation indépendante de l'écoulement, une forme testant le terme de production par la gravité a également été proposée [120] :

$$S_\varepsilon = C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{k} [P + \max(G, 0)] - \bar{\rho} C_{\varepsilon 2} \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (2.53)$$

Dans le cadre des modèles au premier ordre, les fluctuations de vitesses au sens de Favre sont exprimées au sens de Reynolds et généralement fermées par une loi simple gradient SGDh. En négligeant le gradient de pression moyen devant la gravité, on obtient :

$$G = -\overline{u_i''} \left(\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \rho_0 g_i \right) = -\frac{\overline{\rho u_j'}}{\bar{\rho}} \left(\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \rho_0 g_i \right) \sim -\frac{1}{\rho} \frac{\mu_t}{\sigma_t} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} g_i \quad (2.54)$$

Cette fermeture est couramment utilisée et permet de prendre en compte un certain effet de la gravité sur la turbulence : ce terme, positif lorsque la densité augmente avec l'altitude, augmente donc le mélange turbulent lorsque l'écoulement est instable (forte densité au-dessus d'une faible densité) et à la détruire dans les écoulements stables.

L'approche SGDh a tendance à sous-estimer la production de turbulence par la gravité [82, 108] en raison de l'hypothèse d'isotropie de la turbulence. L'approche GGDh a été utilisée pour prendre en compte l'anisotropie de la turbulence dans ce terme amenant à l'expression :

$$G = -\frac{3}{2\bar{\rho}} \frac{C_\mu k}{\sigma_t \varepsilon} \widetilde{u_i'' u_k''} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_k} \left(\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \rho_0 g_i \right) \quad (2.55)$$

De manière générale, cette formulation apporte une amélioration des prédictions de la vitesse, de la température et de la diffusion latérale des panaches thermiques [68, 129] ou des flammes de diffusion [131]. Même si des comparaisons avec des mesures plus récentes [106] ont montré que le choix du modèle le plus approprié au traitement de la flottabilité dépendait de l'ensemble des données expérimentales à modéliser [15], aucun des modèles testés ne capture correctement tous les détails de l'écoulement en terme de vitesse et température dans les deux configurations planes et axisymétriques.

Améliorations du modèle $k - \varepsilon$

Les modèles décrits précédemment ont été développés dans le cadre d'écoulement pleinement turbulents. La transition entre un régime laminaire proche de la source et un régime turbulent d'un panache thermique ou une flamme de diffusion à bas nombre de Froude ont amené à l'utilisation de modèles pour les faibles nombres de Reynolds. Reprenant la formulation du modèle $k - \varepsilon$, le modèle Low Reynolds Number (LRN) $k - \varepsilon$ utilise des fonctions d'amortissement annulant les termes de production dans les zones laminaires [59].

La forte hypothèse d'isotropie de la turbulence étant discutable dans le cas d'un panache thermique ou d'une flamme de diffusion turbulents, des modèles algébriques ont été développés pour prendre en compte l'anisotropie de la turbulence [29] :

$$\widetilde{u_i''u_j''} = \frac{2}{3}k\delta_{ij} + \frac{k}{\varepsilon} \left[\frac{(1 - C_2)(P_{ij} - \frac{2}{3}P_{ii})}{C_1 + (P_{ii} + G_{ii})/\varepsilon - 1} + \frac{(1 - C_3)(G_{ij} - \frac{2}{3}G_{ii})}{C_1 + (P_{ii} + G_{ii})/\varepsilon - 1} \right] \quad (2.56)$$

mais en raison de leur mise en œuvre difficile, la partie algébrique est souvent limitée au terme de flottabilité, le terme de production étant modélisé par le modèle $k - \varepsilon$.

Les modifications du modèle $k - \varepsilon$ ont été testées sur différentes configurations : cavité entraînée [29], panaches thermiques turbulents [131] [15, 68, 129] ou des flammes turbulentes de diffusion [23, 131] sans constater d'améliorations significatives avec une augmentation du coût de calcul de 5 à 30 %. Par conséquent, ces formulations sont peu utilisées pour la modélisation de l'incendie.

Un modèle $k - \varepsilon$ a été développé en tenant compte de contraintes de réalisabilité sur les tensions de Reynolds :

$$\begin{aligned} \widetilde{u_i''^2} &\geq 0 \\ \widetilde{u_i''u_j''}^2 &\leq \widetilde{u_i''^2}\widetilde{u_j''^2} \end{aligned} \quad (2.57)$$

Il relie la viscosité turbulente au tenseur des déformations et utilise une équation corrigée pour la dissipation [109]. Appliqué à un panache thermique axisymétrique et un panache thermique plan, le modèle $k - \varepsilon$ réalisable améliore significativement les résultats lorsqu'il est utilisé avec une fermeture GGDH pour le terme de production de la turbulence par la gravité mais ne semble pas apporter d'améliorations avec une fermeture SGDH [68].

Conclusion

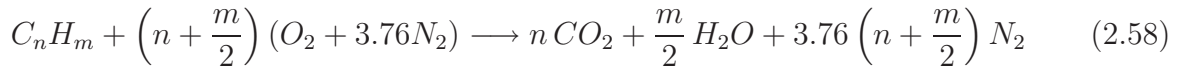
Pour cette première approche de la modélisation des incendies, il a été choisi d'utiliser une approche RANS, suffisante pour appréhender les principaux effets des différents phénomènes physiques présents dans un incendie pour un coût de calcul modéré. Le modèle de turbulence adopté est le modèle $k - \varepsilon$ en tenant compte de l'effet de la gravité. Les différentes fermetures évoquées pour ce terme sont étudiées par la suite.

2.4 Flammes laminaires de diffusion

Nul dans le cas d'écoulements inertes, le taux de production ou consommation des espèces $\dot{\omega}_i$ est la première difficulté rencontrée dans les écoulements réactifs tels que les flammes où la réaction est une réaction de combustion.

2.4.1 Chimie de la combustion

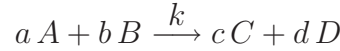
La combustion est une réaction d'oxydoréduction entre un combustible et un comburant (ou oxydant). L'équation-bilan de la réaction complète s'écrit pour un hydrocarbure



Cette réaction libère une énergie appelée enthalpie de réaction $\Delta_r h^0$, exprimée en $J.mol^{-1}$, que la thermodynamique permet d'exprimer à l'aide des enthalpies de formation Δh_f^0 et des coefficients stœchiométriques ν_i de la réaction [39, 50] :

$$\Delta_r h^0 = \sum_{i=1}^N \nu_i \Delta h_{fi}^0 \quad (2.59)$$

Le taux de réaction, exprimé en $mol.m^{-3}.s^{-1}$, représente la vitesse à laquelle l'espèce est produite ou consommée. Pour une réaction bimoléculaire élémentaire issue de la collision des deux molécules A et B ,



la loi d'action de masse établit une relation entre la vitesse de réaction et la concentration des espèces où la constante de réaction k tient compte de la fréquence de collisions efficaces entre les deux molécules [50, 124] :

$$\dot{\omega}_A = -\frac{d[A]}{dt} = k[A]^a[B]^b \quad (2.60)$$

La théorie cinétique des gaz permet d'exprimer la constante de réaction par la loi d'Arrhenius où le facteur pré-exponentiel A tient compte de l'efficacité des collisions et le facteur d'Arrhenius de l'énergie des molécules [39],

$$k = A e^{-\frac{E}{RT}} \quad (2.61)$$

indiquant ainsi que seules les molécules réactives entrant en collision avec une énergie suffisante peuvent réagir. Cette théorie ne suffit pas pour expliquer les réactions uni et tri-moléculaires [50, 124]. Les premières sont expliquées en faisant intervenir un partenaire de collision et peuvent être décrites comme une réaction d'excitation de la molécule par le partenaire de collision suivie d'une réaction aboutissant aux produits finaux :



De même, les réactions tri-moléculaires se décomposent en une réaction créant un complexe que le partenaire de collision vient frapper dans une seconde réaction pour donner les produits finaux :



D'une manière générale, les réactions chimiques ne sont que rarement des réactions élémentaires. L'oxycombustion de l'hydrogène ne fait intervenir que trois molécules réactives ($2H_2 + O_2 \rightarrow 2H_2O$) mais fait intervenir cinq espèces intermédiaires (H , O , OH , HO_2 et H_2O_2) dans un mécanisme de plusieurs dizaines de réactions élémentaires [124]. On y voit apparaître des intermédiaires réactionnels à courte durée de vie, les radicaux, que l'on ne voit pas dans l'équation bilan. Plus les molécules réactives sont grosses, plus le nombre d'équations et d'espèces augmente, faisant intervenir des étapes d'initiation (création de radicaux), de propagation (consommation de réactifs, création de produits et recyclage d'intermédiaires dont les radicaux), de ramification (multiplication des radicaux et intermédiaires) et de terminaison (consommation des radicaux et intermédiaires).

Chaque réaction peut donc s'écrire de manière générale comme un ensemble de R équilibres r entre les N espèces M_j ,

$$\sum_{j=1}^N \nu'_{jr} M_j \rightleftharpoons \sum_{j=1}^N \nu''_{jr} M_j, \quad r = 1, \dots, R \quad (2.62)$$

où ν'_{jr} et ν''_{jr} sont les coefficients stœchiométriques des espèces dans les réactifs et les produits dans chaque équilibre. Le taux de réaction q_r pour chaque réaction s'écrit alors à l'aide de la loi d'action de masse

$$q_r = k_r \prod_{j=1}^N [M_j]^{\nu'_{jr}} - k_r^{-1} \prod_{j=1}^N [M_j]^{\nu''_{jr}} \quad (2.63)$$

où les constantes de réaction k_r et réaction inverse k_r^{-1} s'expriment à l'aide de la loi d'Arrhenius. Finalement, le taux de réaction global $\dot{\omega}_i$ de l'espèce M_i est le bilan des taux de consommation et production de chaque réaction.

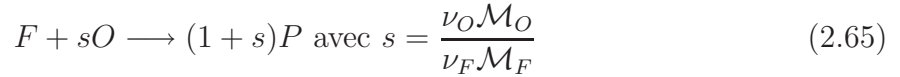
$$\dot{\omega}_i = \sum_{r=1}^R \nu_{ir} q_r \text{ avec } \nu_{ir} = \nu''_{ir} - \nu'_{ir} \quad (2.64)$$

Ainsi, la réaction globale de combustion d'un hydrocarbure 2.58 est le bilan de nombreuses réactions intermédiaires qu'il est utopique de vouloir représenter dans des calculs industriels. En isolant les réactions prépondérantes, des méthodes de réduction de mécanismes cinétiques permettent de faciliter l'écriture des taux de réaction en conservant une bonne description de la chimie [90]. Toutefois, dans la plupart des cas et en particulier dans le cadre des incendies, considérer une équation globale est suffisant pour une première approche [84].

2.4.2 Approximation de Schvab-Zeldovich

Dans une flamme laminaire de prémélange, le taux de réaction est contrôlé par la diffusion de la chaleur et des espèces à travers le front de flamme. Dans une flamme laminaire de diffusion, c'est la diffusion des espèces réactives les unes vers les autres et la diffusion de la chaleur de la zone de flamme vers les réactifs qui contrôlent la réaction. La description d'une flamme laminaire demande donc la connaissance des fractions massiques des espèces et de la quantité d'énergie dans l'écoulement qui est évaluée à l'aide de l'enthalpie du mélange.

Décrivant la réaction à l'aide d'une réaction globale (Eq. 2.58), au minimum cinq espèces sont à représenter : C_nH_m , O_2 , CO_2 , H_2O et N_2 qui correspondent à la réaction complète. Pour une réaction incomplète, des espèces intermédiaires peuvent être considérées. On peut aussi les regrouper en trois espèces globales, le combustible noté F , l'oxydant O et les produits P liées par l'équation :



où s est le rapport stoechiométrique massique. On raisonne alors en terme de fractions massiques en se rapportant à une unité de masse de combustible.

Sous l'hypothèse que les espèces i et l'enthalpie h diffusent à la même vitesse, c'est-à-dire, en supposant des nombres de Lewis égaux à un,

$$Le = \frac{\lambda}{\rho C_{pi} D_i} = 1 \text{ pour } i = 1, \dots, N \quad (2.66)$$

et en se plaçant dans un cas adiabatique, les fractions massiques des trois espèces Y_i ainsi que l'enthalpie h vérifient l'équation de transport 2.67.

$$\frac{\partial \rho \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \underline{u} \phi) = \nabla \cdot (\rho D \nabla \phi) + \dot{\omega}_\phi \text{ avec } \begin{cases} \dot{\omega}_F = \dot{\omega}_F \\ \dot{\omega}_O = s \dot{\omega}_F \\ \dot{\omega}_P = -(1 + s) \dot{\omega}_F \\ \dot{\omega}_h = 0 \end{cases} \quad (2.67)$$

En introduisant les variables de Schvab-Zeldovich,

$$\begin{aligned} Z_1 &= sY_F - Y_O \\ Z_2 &= -(1 + s)Y_F - Y_P \\ Z_3 &= h \end{aligned} \quad (2.68)$$

on obtient la même équation de transport sans terme source pour les scalaires Z_k . Une normalisation par leur valeur dans leur condition d'entrée permet d'obtenir les variables réduites z_k . Ces scalaires passifs, vérifient la même équation 2.69, valent 1 dans le combustible pur et 0 dans l'oxydant pur. Égales entre elles, la détermination d'une seule de ces variables est suffisante, appelée fraction de mélange et notée z .

$$\frac{\partial \rho z}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \underline{u} z) = \nabla \cdot (\rho D \nabla z) ; z = \frac{Z - Z_O}{Z_F - Z_O} \quad (2.69)$$

D'après (2.68) et (2.69), l'expression de la fraction de mélange en fonction des fractions massiques s'écrit selon :

$$z = \frac{1}{1 + \phi} \left(\phi \frac{Y_F}{Y_F^1} - \frac{Y_O}{Y_O^0} + 1 \right) \text{ avec } \phi = s \frac{Y_F^1}{Y_O^0} \quad (2.70)$$

avec ϕ la richesse du mélange définie à partir du coefficient stœchiométrique massique et de la composition des réactifs purs Y_F^1 et Y_O^0 . La réaction est complète lorsque le combustible et l'oxydant ont été consommés dans les proportions stœchiométriques, c'est-à-dire que leur fraction massique est nulle. La fraction de mélange stœchiométrique est donc définie par

$$z_{st} = \frac{1}{1 + \phi} \quad (2.71)$$

et permet de localiser la flamme.

Physiquement, la fraction de mélange représente la quantité de combustible provenant de la source combustible ; elle est égale à la fraction massique de combustible lorsque celui-ci n'a pas encore réagi.

Ainsi, sous les hypothèses que la réaction est décrite par une équation globale, que les nombres de Lewis sont unitaires et en l'absence de pertes thermiques, la résolution de ces deux équations (Eq. 2.69 pour z et Eq. 2.67 pour $\phi = Y_F$ par exemple) permet de décrire la flamme qu'elle soit de diffusion ou de prémélange partiel. En revanche, dans le cas particulier des flammes de prémélange parfait, la fraction de mélange est constante et connue, cette variable est alors inutile et la flamme est caractérisée par l'une des fractions massiques Y_F , Y_O , Y_P ou la variable d'avancement c valant 0 dans les gaz frais et 1 dans les gaz brûlés.

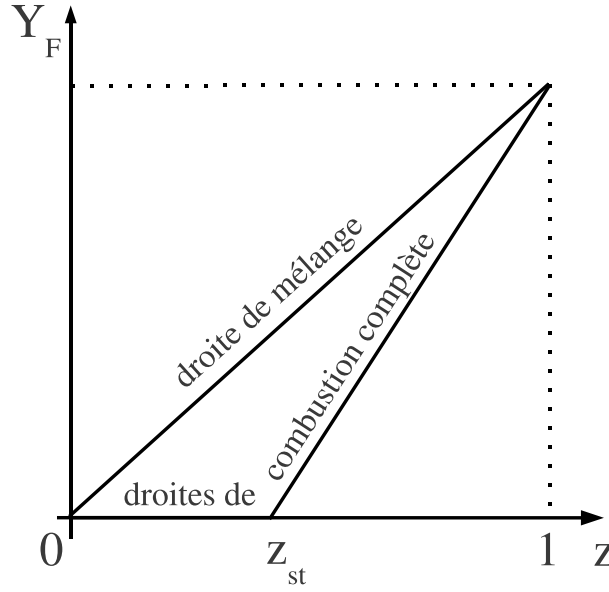
2.4.3 Types de cinétique chimique

Ces deux variables définissent l'état thermochimique du mélange que l'on peut situer dans le diagramme (z, Y_F) de la figure 2.2. La droite de mélange et par la droite de combustion complète définissent le domaine d'existence du couple (z, Y_F) . La première correspond à un mélange qui n'a pas commencé à réagir, la seconde à un mélange qui a fini de réagir.

A l'aide de l'approximation de Schvab-Zeldovich, le problème d'une flamme laminaire de diffusion peut être réduit à deux inconnues : la fraction de mélange z et une fraction massique, celle du combustible Y_F par exemple. Des hypothèses sur la cinétique chimique permettent de réduire le nombre d'inconnues :

- lorsque la chimie est suffisamment rapide, le mélange atteint l'équilibre chimique dès que les espèces sont dans les proportions stœchiométriques. Le taux de réaction est nul en dehors de la zone de flamme. La fraction massique de combustible peut alors être déduite de la fraction de mélange. Sa résolution n'est plus nécessaire et la réaction est entièrement contrôlée par le mélange par diffusion [17].

Si la réaction est *infinitement rapide et irréversible*, le combustible et l'oxydant ne co-existent pas en dehors de la stœchiométrie où ils sont instantanément consommés. Les

FIG. 2.2 – Diagramme d'existence du couple (z, Y_F)

fractions massiques suivent des lois linéaires par morceaux représentées sur la figure 2.3. Une solution analytique de la flamme peut être trouvée dans des configurations simples [89],[93].

- si la réaction est *infinitement rapide et réversible*, les espèces atteignent instantanément un état d'équilibre thermodynamique. Les fractions massiques sont alors des fonctions quelconques de z obtenues par un calcul de thermodynamique.

- lorsque les effets cinétiques sont non négligeables devant le temps de mélange par diffusion, la *cinétique chimique est dite finie*. Le mélange n'est plus en équilibre, le taux de réaction est non nul en dehors de la zone stœchiométrique et doit être calculé. Une flamme de diffusion n'a pas de vitesse de flamme ou d'épaisseur bien définie comme une flamme de prémélange. Le taux de réaction n'est donc pas une donnée intrinsèque liée au rapport combustible/oxydant mais est fortement dépendant de l'écoulement. Peters [88] propose de réécrire l'équation de transport pour Y_F dans un repère local attaché à l'isosurface stœchiométrique dont une des coordonnées est la fraction de mélange.

Si la courbure de la flamme est suffisamment faible, le gradient de fraction de mélange est principalement dirigé selon la normale à la flamme. Par une transformation de Crocco, l'équation 2.67 pour Y_F , écrite dans l'espace physique peut s'écrire dans le repère monodimensionnel d'abscisse z lié à la flamme [93] :

$$\rho \frac{\partial Y_F}{\partial t} - \rho \chi \frac{\partial^2 Y_F}{\partial z^2} = \dot{\omega}_F \text{ avec } \chi = D (\nabla z)^2 \quad (2.72)$$

Dans l'équation 2.72, χ a la dimension de l'inverse d'un temps de diffusion et quantifie les transferts de masse et d'énergie à travers la flamme. Il est communément appelé *taux*

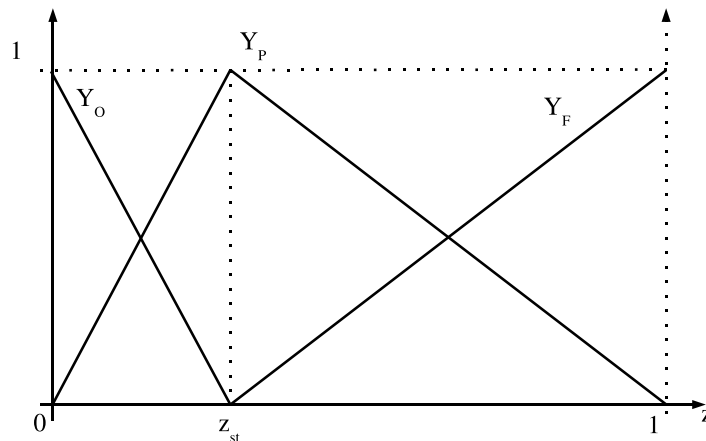


FIG. 2.3 – Lois d'état pour les fractions massiques dans le cas d'une chimie complète infiniment rapide

de dissipation scalaire en prévision de son utilisation dans la modélisation des flammes turbulentes de diffusion. La dérivée seconde quant à elle, caractérise la structure de la flamme. Des développements asymptotiques [64, 27] ou la résolution de l'équation 2.72 par des codes de calcul de chimie détaillée basés sur l'utilisation de schémas cinétiques plus ou moins complets permettent d'estimer le taux de réactions en fonction de la fraction de mélange z et du taux de dissipation χ . L'utilisation d'une chimie détaillée reste limitée à des cas simples mais permet de prévoir les extinctions ou l'auto-inflammation. En identifiant les espèces et réactions prépondérantes, les méthodes de réduction de mécanismes permettent de réduire le nombre d'inconnues, se limitant à quelques réactions.

2.5 Flammes turbulentes de diffusion

Pour les écoulements réactifs turbulents, ici les flammes turbulentes de diffusion, les équations du système font apparaître la moyenne du terme source réactif $\tilde{\dot{\omega}}_i$. Ce dernier ne peut être exprimé en utilisant les grandeurs moyennes à la place des grandeurs locales en raison de la forte non linéarité en Y_i et T de la loi d'Arrhenius.

$$\tilde{\dot{\omega}}_i(T, Y_j, j = 1 \dots N) \neq \dot{\omega}_i(\tilde{T}, \tilde{Y}_j, j = 1 \dots N) \quad (2.73)$$

Son estimation doit donc reposer sur la physique de la flamme. Cette physique change en fonction des caractéristiques de l'écoulement et de la cinétique chimique.

2.5.1 Interaction entre la combustion et la turbulence

La turbulence est caractérisée par le nombre de Reynolds turbulent Re_t qui compare les forces d'inertie des tourbillons et les forces visqueuses ; le nombre de Damköhler Da compare le temps caractéristique de la turbulence τ_t et le temps caractéristique de la chimie τ_c :

$$Re_t = \frac{u' l_t}{\nu} \quad Da = \frac{\tau_t}{\tau_c} \quad (2.74)$$

où u' et l_t représentent la vitesse et l'échelle intégrale caractéristiques de la turbulence.

L'absence d'une épaisseur de flamme bien définie pour une flamme de diffusion rend difficile la définition de régimes de combustion. Pour les flammes de prémélange, la taille des tourbillons est comparée avec l'épaisseur du front de flamme [119], grandeur intrinsèque au prémélange. En revanche, la flamme de diffusion est surtout une zone de diffusion dont l'épaisseur dépend des caractéristiques de l'écoulement. Néanmoins, on peut définir quatre régimes représentés schématiquement sur la figure 2.4 :

- lorsque le nombre de Reynolds est suffisamment faible, la turbulence n'affecte pas la zone de flamme, le régime est *laminaire*.
- lorsque le temps de diffusion des espèces devient très faible devant le temps de transport par l'écoulement (la chimie est infiniment rapide, $Da > Da_{LFA}$), la flamme est déformée par la turbulence mais sa structure interne n'est pas affectée et conserve la structure interne d'une flamme laminaire. La flamme turbulente est alors dans un régime de *flammelettes*.
- lorsque l'épaisseur de la flamme devient de l'ordre de l'échelle de Kolmogorov (la chimie est lente, $Da < Da_{ext}$), la turbulence affecte le front de flamme jusqu'à l'*extinction*.
- entre ces deux régimes, la turbulence affecte le front de flamme sans toutefois l'éteindre, rendant la flamme fortement instationnaire.

Les deux nombres de Damköhler Da_{LFA} pour Laminar Flamelet Assumption et Da_{ext} pour extinction caractérisent les limites de ces régimes [27].

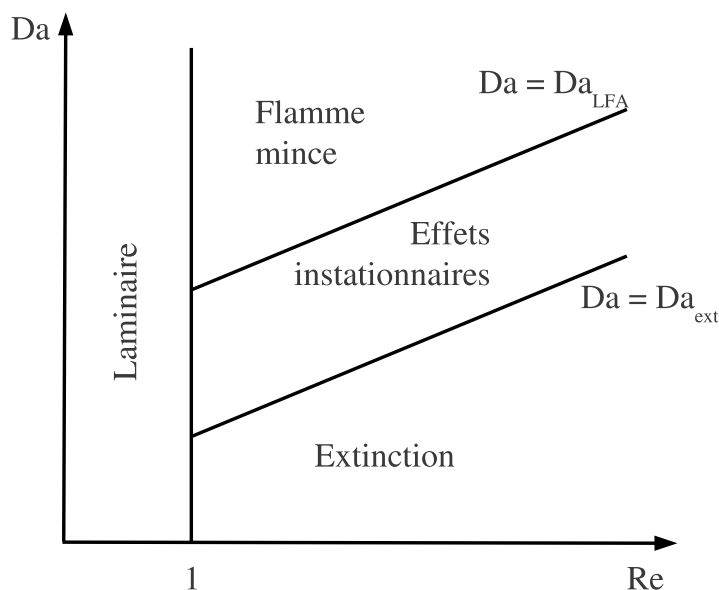


FIG. 2.4 – Régimes de combustion d'une flamme de diffusion

2.5.2 Approches de modélisation

En régime turbulent, la réaction n'est plus uniquement contrôlée par la chimie, c'est à dire la diffusion moléculaire des espèces et de l'énergie, mais également par le mélange turbulent. Les structures turbulentes accroissent le mélange des gaz frais/gaz brûlés et/ou le mélange combustible/oxydant. La modélisation des mélanges réactifs turbulents consiste donc en une description du mélange turbulent en plus d'une description de la chimie dans la fermeture du terme source réactif moyen. On distingue trois grandes approches résumées sur la figure 2.5 : les modèles géométriques, les modèles de mélange turbulent et les modèles statistiques.

Les modèles géométriques

Bien que les *modèles géométriques* puissent être présentés de manière générale pour les flammes de prémélange et les flammes de diffusion comme dans [119], en pratique, ils ne sont appliqués qu'aux flammes de prémélange. La flamme est décrite à l'aide d'iso-surfaces de la variable d'avancement. Le plus souvent associée à une hypothèse de chimie infiniment rapide, la flamme se réduit à une interface entre les gaz frais et les gaz brûlés dont on calcule l'évolution [53, 70, 95].

Les modèles de mélange turbulent

Les *modèles de mélange turbulent* traduisent l'effet de la turbulence sur le mélange réactif. Les inhomogénéités créées par la turbulence sont décrites par la variance du scalaire

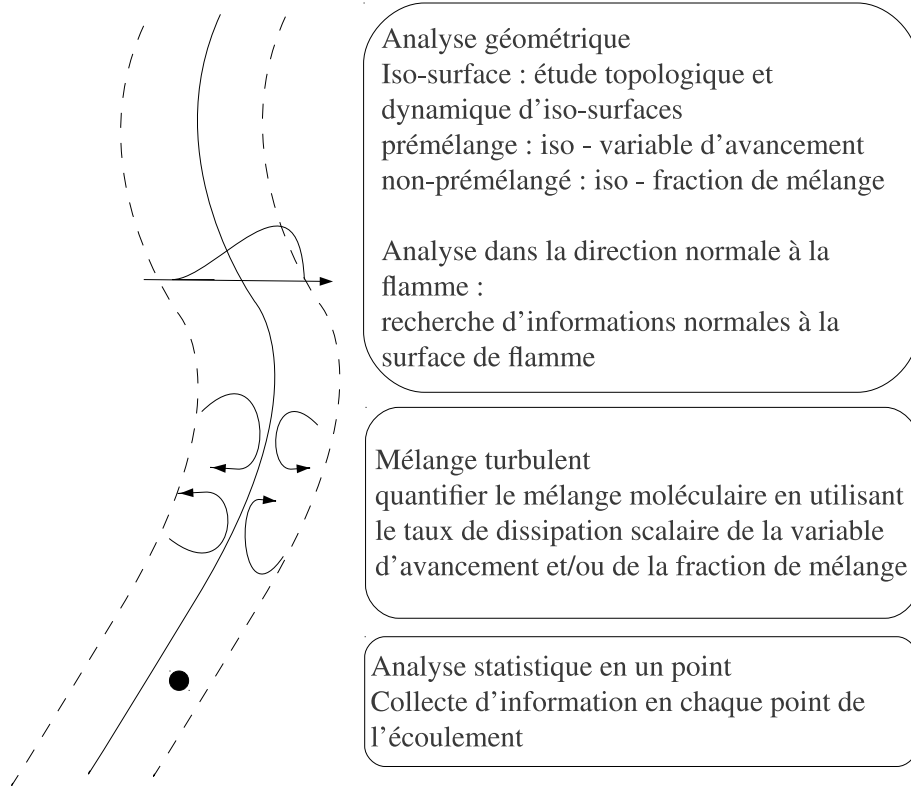


FIG. 2.5 – Trois types d'analyses de flammes turbulentes, d'après [119]

décrivant la flamme [119]. Le terme de dissipation $\bar{\rho}\tilde{\chi}$ apparaissant dans son équation de transport (Eq. 2.33) traduit le mélange turbulent :

$$\bar{\rho}\tilde{\chi} = \overline{\rho D \nabla \phi \nabla \phi} \quad (2.75)$$

Avec la corrélation impliquant le terme source, il joue un rôle important dans le contrôle de la réaction, il assure la décroissance de la variance et la consommation des réactifs. Le taux de dissipation est alors estimé que ce soit par des fermetures algébriques ou une équation de transport.

En faisant l'hypothèse d'une chimie infiniment rapide irréversible, une flamme de prémélange peut être décrite comme une interface, la variable d'avancement c vaut soit 0 soit 1. Seule la dissipation des fluctuations contrôle la réaction, ce qui correspond à des passages intermittents de paquets de gaz frais et gaz brûlés en un point donné. Le modèle Eddy-Break-Up [112] relie alors le taux de réaction aux fluctuations d'avancement pendant un temps turbulent τ_t . L'expression fait intervenir la variance de l'avancement $\widetilde{c''^2} = \widetilde{c}(1 - \widetilde{c})$:

$$\tilde{\omega}_c = -C_{EBU} \frac{\widetilde{c''^2}}{\tau_t} = -C_{EBU} \frac{\widetilde{c}(1 - \widetilde{c})}{\tau_t} \quad (2.76)$$

La constante C_{EBU} est à ajuster mais est justifiée théoriquement par le modèle Bray-Moss-Libby [78].

Le modèle EBU a été étendu aux flammes de diffusion donnant lieu au modèle Eddy-Dissipation-Concept [69]. Sur des configurations physiques, la variance de l'avancement est simplement remplacée par la fraction massique du réactif en défaut ou la fraction massique de produits :

$$\tilde{\omega}_F = C_{EDC} \frac{1}{\tau_t} \min \left(\tilde{Y}_F, \frac{\tilde{Y}_O}{s}, \beta \frac{\tilde{Y}_P}{1+s} \right) \quad (2.77)$$

Ces modèles sont simples mais robustes donc couramment utilisés dans les codes de calculs industriels, mais par construction, ils ne sont valides que dans les situations où la chimie est rapide devant le mélange. Ils ont en effet le défaut de surestimer le taux de réaction surtout lorsque la chimie n'est plus infiniment rapide.

Les modèles statistiques

L'utilisation de fonctions de densité de probabilité (pdf) permet une représentation plus complète de l'interaction turbulence-combustion. Alors que les modélisations précédentes présupposent une structure intermittente de la flamme, les méthodes à pdf tiennent compte du poids statistiques des états intermédiaires, beaucoup plus adaptées aux flammes de diffusion où le passage du combustible à l'oxydant se fait de manière continue.

La probabilité que la variable φ ait une valeur comprise entre φ et $\varphi + d\varphi$ au point $\underline{x}$ et au temps t est $P(\varphi, \underline{x}, t)d\varphi$. Par définition, la norme de la pdf vaut 1 :

$$\int_{\varphi} P(\varphi, \underline{x}, t) d\varphi = 1 \quad (2.78)$$

Les moyennes statistiques de grandeurs clés comme un scalaire, ses moments ou le terme source chimique sont exprimées à l'aide de la pdf :

$$\overline{\phi}(\underline{x}, t) = \int_{\varphi} \phi(\varphi) P(\varphi, \underline{x}, t) d\varphi \quad (2.79)$$

$$\overline{\phi'^n}(\underline{x}, t) = \int_{\varphi} [\phi(\varphi) - \overline{\phi}(\underline{x}, t)]^n P(\varphi, \underline{x}, t) d\varphi \quad (2.80)$$

Si N variables sont nécessaires pour décrire les états intermédiaires, une pdf jointe de N variables est utilisée :

$$\overline{\phi}(\underline{x}, t) = \int_{\varphi_1} \dots \int_{\varphi_N} \phi(\varphi_1, \dots, \varphi_N) P(\varphi_1, \dots, \varphi_N, \underline{x}, t) d\varphi_1 \dots d\varphi_N \quad (2.81)$$

Si la masse volumique est variable, il est plus pratique d'utiliser une pdf définie au sens de Favre $\tilde{P}(\varphi, \underline{x}, t)$, c'est-à-dire pondérée par la masse volumique :

$$\tilde{P}(\varphi, \underline{x}, t) = \frac{\rho P(\varphi, \underline{x}, t)}{\bar{\rho}} \quad (2.82)$$

La masse volumique moyenne est alors évaluée à partir du volume massique et de la pdf de Favre :

$$\frac{1}{\bar{\rho}} = \int_{\varphi} \frac{\tilde{P}(\varphi, \underline{x}, t)}{\rho(\varphi)} d\varphi \quad (2.83)$$

La pdf peut être *présumée*. Dans ce cas, la condition de normalisation et les $n - 1$ premiers moments sont nécessaires mais suffisants pour déterminer une pdf présumée à n paramètres. La plus couramment utilisée est la fonction β :

$$\tilde{P}(\varphi, \underline{x}, t) = \frac{\varphi^{a-1}(1-\varphi)^{b-1}}{\int_0^1 \varphi^{a-1}(1-\varphi)^{b-1} d\varphi} \quad (2.84)$$

où a et b sont déduits de la moyenne et de sa variance :

$$\tilde{\varphi} = \int_0^1 \varphi \tilde{P}(\varphi, \underline{x}, t) d\varphi \quad \widetilde{\varphi'^2} = \int_0^1 (\varphi - \tilde{\varphi})^2 \tilde{P}(\varphi, \underline{x}, t) d\varphi \quad (2.85)$$

La fonction β peut amener à des difficultés d'intégration notamment au niveau des branches infinies lorsque a ou b sont inférieurs à 1. On peut alors citer la distribution rectangle-Dirac qui permet une intégration analytique :

$$\tilde{P}(\varphi, \underline{x}, t) = D_0 \delta(\varphi - \varphi_0) + D_1 \delta(\varphi - \varphi_1) + h [\mathcal{H}(\varphi - \varphi_2) - \mathcal{H}(\varphi - \varphi_3)] \quad (2.86)$$

où φ_0 et φ_1 sont les bornes du domaine de définition de la pdf, D_0 , D_1 , φ_2 , φ_3 et h sont les paramètres de la pdf également déduits de la moyenne et sa variance, δ et $\mathcal{H}$ la distribution de Dirac et la fonction de Heaviside.

Présumer une pdf à plus de deux variables étant difficile, cette méthode demande de faire quelques hypothèses sur la chimie. D'une chimie infiniment rapide jusqu'à une cinétique finie détaillée, l'interaction avec la turbulence demande des modèles de complexité croissante. Cependant, tous sont basés sur l'hypothèse que la flamme turbulente conserve localement sa structure laminaire. Ainsi, dans le cadre d'une réaction globale à une étape, la structure locale de la flamme turbulente peut être décrite à l'aide de la fraction de mélange z et la fraction massique de combustible Y_F . La pdf jointe $P(Y_F, z, \underline{x}, t)$ est donc suffisante pour décrire la flamme turbulente.

Les modèles à pdf présumées peuvent être regroupés en deux classes. La première regroupe les modèles calculant le terme source chimique moyen (Eq. 2.87), et transportant la fraction massique de combustible dont quelques exemples sont donnés par la suite :

$$\widetilde{\dot{\omega}_F}(\underline{x}, t) = \int_0^1 \int_0^1 \dot{\omega}_F(Y_F, z) \tilde{P}(Y_F, z, \underline{x}, t) dY_F dz \quad (2.87)$$

A l'aide de cette formulation, dans des conditions de prémélange parfait et de chimie infiniment rapide assurant une pdf à deux pics de Dirac en $c = 0$ et 1 , on retrouve le modèle EBU.

Le modèle Modèle Intermittent Lagrangien (MIL) [13] tient compte d'un délai de mélange avant une combustion infiniment rapide. On peut alors parler de combustion soudainement infiniment rapide [31]. L'effet de la turbulence est traité à l'aide d'une pdf sur

le temps de mélange turbulent τ_t traduisant le fait que la combustion n'a lieu que lorsque l'allumage est plus rapide que le mélange et d'une pdf sur la fraction de mélange traitant le mélange turbulent :

$$\widetilde{\dot{\omega}}_F(\underline{x}, t) = \int_0^1 \int_{\tau_{ig}}^{+\infty} \dot{\omega}_F^{MIL}(z, \tau_t) \widetilde{P}(\tau_t, \underline{x}, t) \widetilde{P}(z, \underline{x}, t) d\tau_t dz \quad (2.88)$$

Le modèle Libby-Williams-Poitiers [63, 102] tient compte d'un temps chimique fini. La pdf est une pdf jointe de la fraction de mélange et de la fraction massique de combustible. Elle est composée de pics de Dirac (2 à 4) permettant une intégration algébrique aisée. Le terme source chimique local peut être calculé à l'aide de modèles cinétiques plus ou moins compliqués [35, 103]. Ce modèle développé pour les flammes turbulentes de prémélange partiel peut en théorie représenter l'ensemble des flammes turbulentes allant du prémélange parfait jusqu'à la diffusion, mais la pdf contient trop peu d'informations pour caractériser une flamme de diffusion [35].

Les modèles de flammelettes pour les flammes turbulentes de diffusion utilisent une librairie contenant le taux de réaction local en fonction de la fraction de mélange et du taux de dissipation. Elle est obtenue en résolvant une flamme laminaire dans différentes conditions de richesse et pour différents taux d'étirement. Cette librairie de flammelettes, associée à une pdf présumée de la fraction de mélange et du taux de dissipation permet d'estimer le taux de réaction moyen selon :

$$\widetilde{\dot{\omega}}_F(\underline{x}, t) = \int_0^1 \int_0^{+\infty} \dot{\omega}_F(z, \chi) \widetilde{P}(z, \chi, \underline{x}, t) d\chi dz \quad (2.89)$$

Le calcul des taux de réaction locaux se faisant sur une flamme laminaire, il n'y a aucune restriction sur la description de la chimie que l'on souhaite incorporer au modèle.

La seconde classe de modèles à pdf présumées ne nécessite pas le calcul du terme source chimique moyen et est réservée aux flammes turbulentes de diffusion. A l'image de ce qui est fait pour les flammes laminaires de diffusion, l'hypothèse que le taux de réaction est nul en dehors de la flamme permet de s'affranchir de son calcul. La composition du mélange est alors calculée en définissant la structure de la flamme à l'aide de la fraction de mélange et en présumant la forme de la pdf pour le mélange turbulent :

$$\widetilde{Y}_i(\underline{x}, t) = \int_0^1 \int_0^1 Y_i(Y_F, z) \widetilde{P}(Y_F, z, \underline{x}, t) dY_F dz \quad (2.90)$$

En introduisant la pdf conditionnée de Y_F par z , $\widetilde{P}(Y_F|z, \underline{x}, t)$, le problème peut être décomposé en un problème de mélange décrit par la pdf en z et un problème lié à la structure interne de la flamme décrit par la pdf conditionnée :

$$\widetilde{Y}_i(\underline{x}, t) = \int_0^1 \int_0^1 Y_i(Y_F, z) \widetilde{P}(Y_F|z, \underline{x}, t) \widetilde{P}(z, \underline{x}, t) dY_F dz \quad (2.91)$$

Alors que le problème de mélange est traité classiquement en résolvant la fraction de mélange et sa variance, le calcul des moyennes conditionnées (Eq. 2.92) est traité différemment selon le régime cinétique choisi :

$$\langle \tilde{Y}_i | z \rangle = \int_0^1 Y_i(Y_F, z) \tilde{P}(Y_F | z, \underline{x}, t) dY_F \quad (2.92)$$

Le modèle de pdf présumée à chimie infiniment rapide utilise l'hypothèse que les réactifs ne coexistent pas. Les moyennes conditionnées des fractions massiques sont les lois laminares (Fig. 2.3) uniquement dépendantes de la fraction de mélange et la pdf conditionnée se réduit à une distribution de Dirac sur la fraction de mélange. L'équation 2.91 se réduit donc à :

$$\tilde{Y}_i(\underline{x}, t) = \int_0^1 Y_i(z) \tilde{P}(z, \underline{x}, t) dz \quad (2.93)$$

Comme pour les flammes laminares de diffusion, dans le cadre d'une réaction infiniment rapide, on peut faire la distinction entre une réaction irréversible (lois linéaires, non co-existence des réactifs) et une réaction réversible (équilibre local entre les réactifs et les produits). Puisque la structure de la flamme est figée, la réaction n'est contrôlée qu'à travers le mélange turbulent décrit par la variance dont la dissipation est contrôlée par le taux de dissipation moyen $\tilde{\chi}$. On pourrait donc classer ce modèle avec les modèles de mélange turbulent.

Les modèles de flammelettes laminares considèrent des effets cinétiques mais utilisent une hypothèse de chimie rapide afin de rester dans le cadre d'une flamme mince. Cette hypothèse permet alors l'utilisation d'un repère local attaché à la surface de flamme. L'équation de transport obtenue (Eq. 2.72) est préalablement résolue sur une flamme laminaire à contre-courant [90]. Une librairie est construite fournissant les fractions massiques en fonction de la fraction de mélange et le taux de dissipation scalaire χ permettant d'évaluer les moyennes conditionnées :

$$\langle \tilde{Y}_i | z \rangle = \int_0^1 Y_i(z, \chi) \tilde{P}(\chi | z, \underline{x}, t) d\chi \quad (2.94)$$

En supposant que le taux de dissipation et la fraction de mélange ne sont pas corrélés, la pdf conditionnée est indépendante de la fraction de mélange. On peut présumer de sa forme calculée grâce à la résolution du taux de dissipation scalaire et de sa variance (une loi log-normal par exemple [88] ou un pic de Dirac centré sur la stœchiométrie [89]).

Le niveau de détail de la cinétique chimique impliquée est ici lié au schéma cinétique utilisé pour la construction de la librairie mais les temps chimiques caractéristiques sont toujours plus courts que tout autre temps caractéristique dans l'écoulement car l'hypothèse d'une flamme mince a été faite. L'extinction et l'auto-inflammation ne peuvent donc pas être capturées.

L'approche Conditional Moment Closure (CMC) propose de résoudre une équation de

transport pour les moyennes conditionnées des fractions massiques [55]. En supposant que les variations des fractions massiques sont faibles autour d'une valeur de la fraction de mélange, la structure de la flamme peut être représentée avec un nombre fini de moyennes conditionnées. Toutefois, la qualité de la description dépend de ce nombre, de la fermeture des différents termes de l'équation et du nombre de variables de conditionnement utilisées [12], ce qui complique la modélisation et augmente le temps de calcul.

La pdf peut être calculée. Présumer la forme de la pdf demande de faire des hypothèses restrictives sur la structure de la flamme. Afin de s'affranchir de ces hypothèses, la pdf peut être *calculée* à l'aide d'une équation de transport [94]. Pour une pdf jointe des composantes de la vitesse et de N scalaires, une équation de transport est dérivée :

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} (\rho P) + \nabla \cdot (\rho \underline{u} P) + (\bar{\rho} g - \nabla \bar{p}) \cdot \nabla_{\underline{u}} P + \sum_{i=1}^N \frac{\partial}{\partial \varphi_i} (\dot{\omega}_i P) \\ &= \nabla_{\underline{u}} \cdot [\langle -\nabla \cdot \tau + \nabla p' | \underline{u}, \varphi \rangle P] - \sum_{i=1}^N \frac{\partial}{\partial \varphi_i} (\langle \nabla \cdot (\rho D \nabla \varphi_i) | \underline{u}, \varphi \rangle P) \end{aligned} \quad (2.95)$$

P est la pdf jointe $P(\underline{u}, \varphi_1, \dots, \varphi_N, \underline{x}, t)$, $\langle \cdot \rangle$ la moyenne conditionnée ici par la vitesse et les scalaires et $\nabla_{\underline{u}}$ est l'opérateur divergence par rapport au vecteur vitesse. Les deux premiers termes représentent la variation locale et le transport par convection, le troisième terme, le transport par la gravité et le gradient de pression moyen et le quatrième terme traduit l'effet du terme source chimique sur la pdf. Tous ces termes sont connus car définis dans l'espace physique pourvu que le schéma cinétique de la réaction soit défini. Les deux moyennes conditionnées sont les seuls termes à modéliser. La première représente le transport de la pdf par les forces visqueuses et les fluctuations de pression, la seconde, le transport de la pdf par le micromélange.

La résolution de cette équation se fait à l'aide d'une méthode de Monte Carlo. L'évolution d'un ensemble de N particules est calculée suivant l'équation de transport de la pdf. Chaque particule représentant une possibilité d'évolution de la pdf, cette dernière est reconstruite statistiquement en chaque point. Sans restriction sur les hypothèses de cinétique chimique, cette méthode demande néanmoins un nombre important de particules pour donner des résultats satisfaisants ce qui implique un coût de calcul encore inimaginable pour des calculs industriels.

2.5.3 Synthèse de la combustion turbulente dans l'incendie

Les modèles précédemment cités ont été développés dans le cadre de la modélisation des flammes turbulentes. Les validations par rapport aux expériences ont mis en évidence les capacités et les limites des modèles sur des flammes turbulentes. En particulier, l'hypothèse de chimie infiniment rapide est souvent remise en cause ce qui a amené au développement de modèles traitant de manière plus juste la description de la cinétique et son interaction avec la turbulence.

Dans le cadre des incendies, bien d'autres phénomènes interagissent avec les flammes dont l'impact sur le comportement d'un feu est du même ordre que la description de la flamme elle-même. La complexité du modèle ainsi que le coût de calcul en est d'autant augmenté. Par conséquent, les modèles de combustion turbulente utilisés par la communauté incendie se limitent aux plus simples [84].

Les modèles de chimie infiniment rapide sont privilégiés [65, 66, 122, 128] et en particulier le modèle EDC [26, 85, 121]. Le modèle de flammelettes est moins utilisé [62, 131] et donne des résultats similaires [11, 84].

Les cas traités se regroupent en deux catégories :

- les flammes à l'air libre, souvent produites par un brûleur poreux dont le débit massique de combustible est contrôlé. D'une manière générale, les vitesses et températures ainsi que l'entraînement d'air sont bien prédits, mais l'expansion radiale de la flamme est sous estimée et l'entraînement d'air surestimé dans le panache [84].

- les feux de compartiments ouverts dont le cas de Steckler [114] est le plus traité. Dans la littérature traitant ce cas, la température de la couche chaude et la hauteur de fumées sont prédites à 20 % près. Les flux de masse à travers les ouvertures sont prédits à 40 % près. En revanche, les températures et la stratification près des parois sont mal reproduites ce qui est imputé au modèle de turbulence $k - \varepsilon$. Cependant, certains de ces calculs sont traités avec des parois adiabatiques, ce qui peut fausser le calcul du flux rayonné sur les gaz à proximité des parois.

Cette étude constituant les premières étapes de l'adaptation de *Code_Saturne* à l'incendie, les modèles les plus simples seront utilisés, soit un modèle de flammelettes associé à une hypothèse de chimie infiniment rapide. La pdf utilisée est constituée de deux pics de Dirac et d'un rectangle dont les amplitudes et les positions sont déterminées à l'aide de la fraction de mélange et de sa variance afin de limiter le coût de calcul lié au calcul des valeurs moyennes.

2.5.4 Estimation de la puissance libérée par une flamme

Les modèles utilisant une réaction globale et une hypothèse de chimie infiniment rapide permettent de résoudre une flamme de diffusion laminaire ou turbulente sans calculer explicitement le terme source chimique responsable de la consommation des réactifs. Pourtant, il pourrait être utile de connaître l'énergie libérée localement.

En se plaçant dans un repère lié à la flamme, sous l'hypothèse d'une faible courbure et dans un cas stationnaire, Bilger [9] cité par Peters [89] et Peters lui-même [88] propose une écriture pour le terme source chimique :

$$\dot{\omega}_i = -\frac{1}{2}\rho\chi\frac{\partial^2 Y_i}{\partial z^2} \text{ avec } \chi = 2D(\nabla z)^2 \quad (2.96)$$

où le produit $\rho\chi$ représente les flux de masse réciproques échangés entre les réactifs à travers la flamme. Le terme source chimique turbulent s'obtient en prenant la moyenne de

la valeur laminaire [93] :

$$\tilde{\omega}_i = -\frac{1}{2} \int_0^1 \int_0^\infty \rho(z, \chi) \chi(z) \frac{\partial^2 Y_i}{\partial z^2} \tilde{P}(z, \chi) dz d\chi \quad (2.97)$$

Cette formulation utilise le concept des flammelettes laminaires. Bien qu'aucune hypothèse sur la chimie n'ait été faite, hormis que le gradient de fraction de mélange est normal à la surface de flamme, cette écriture est surtout utilisée dans le cadre d'une chimie finie. Son utilisation dans le cadre d'une chimie infiniment rapide n'est a priori pas exclue [93] et amène à la conclusion suivante : lorsque la réaction est considérée comme irréversible, les lois pour les fractions massiques sont linéaires. La dérivée seconde apparaissant dans l'équation 2.97 est nulle en dehors de la stœchiométrie et le taux de réaction ne dépend que de la valeur du taux de dissipation scalaire et de l'amplitude de la pdf à la stœchiométrie.

On se propose alors de vérifier ces conclusions pour le modèle à une réaction globale à chimie infiniment rapide utilisé dans le cadre de cette étude. On se place dans le cas de flammes turbulentes de diffusion idéalisées à l'aide de quatre hypothèses :

- l'écoulement est à bas nombre de Mach, la masse volumique est calculée à pression atmosphérique constante,
- le nombre de Lewis est unitaire et toutes les espèces diffusent avec le même coefficient,
- la réaction est représentée par une réaction globale à une étape,
- la chimie est infiniment rapide.

En faisant l'hypothèse d'une chimie infiniment rapide irréversible, les réactifs ne peuvent pas coexister ce qui permet de déterminer la structure de la flamme. Cette dernière est donnée par les fractions massiques locales :

$$\begin{array}{ll} z < z_{st} \text{ (côté pauvre)} & z > z_{st} \text{ (côté riche)} \\ \left\{ \begin{array}{l} Y_F = 0 \\ Y_O = Y_O^0 \left(1 - \frac{z}{z_{st}} \right) \\ Y_P = 1 - Y_F - Y_O \end{array} \right. & \left\{ \begin{array}{l} Y_F = Y_F^1 \frac{z - z_{st}}{1 - z_{st}} \\ Y_O = 0 \\ Y_P = 1 - Y_F - Y_O \end{array} \right. \end{array} \quad (2.98)$$

où $Y_O^0 = Y_F^1 = 1$ sont les fractions massiques du combustible et de l'oxydant dans leur entrée. La dérivée seconde des fractions massiques se réduit à une distribution de Dirac à la stœchiométrie d'amplitude :

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial^2 Y_F}{\partial z^2} \right|_{z_{st}} &= \frac{Y_F^1}{1 - z_{st}} \delta(z - z_{st}) \quad ; \quad \left. \frac{\partial^2 Y_O}{\partial z^2} \right|_{z_{st}} = \frac{Y_O^0}{z_{st}} \delta(z - z_{st}) \\ \left. \frac{\partial^2 Y_P}{\partial z^2} \right|_{z_{st}} &= - \left. \frac{\partial^2 Y_F}{\partial z^2} \right|_{z_{st}} - \left. \frac{\partial^2 Y_O}{\partial z^2} \right|_{z_{st}} \end{aligned} \quad (2.99)$$

et indépendante du taux de dissipation. Le taux de réaction s'écrit alors :

$$\tilde{\omega}_i = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2 Y_i}{\partial z^2} \bigg|_{z_{st}} \int_0^1 \int_0^\infty \rho(z) \chi(z) \delta(z - z_{st}) \tilde{P}(z, \chi) d\chi dz \quad (2.100)$$

que l'on peut réécrire à l'aide de la pdf du taux dissipation conditionnée en z_{st} selon :

$$\tilde{\omega}_i = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2 Y_i}{\partial z^2} \bigg|_{z_{st}} \widetilde{(\rho\chi|z_{st})} \tilde{P}(z_{st}) \text{ avec } \widetilde{(\rho\chi|z_{st})} = \int_0^\infty \rho(z_{st}) \chi(z_{st}) \tilde{P}(\chi|z_{st}) d\chi \quad (2.101)$$

L'inconnue est donc reportée sur l'estimation de χ et de sa pdf conditionnée. En supposant que la fraction de mélange et le taux de dissipation sont indépendants [93], le taux de dissipation à la stœchiométrie s'écrit :

$$\widetilde{(\rho\chi|z_{st})} = \int_0^\infty \rho_{st} \chi_{st} \tilde{P}(\chi) d\chi \quad (2.102)$$

avec ρ_{st} et χ_{st} les valeurs de la densité et du taux de dissipation à la stœchiométrie ($\rho(z_{st})$ et $\chi(z_{st})$). En supposant χ_{st} constant, on retrouve l'expression proposée par Peters [89] :

$$\tilde{\omega}_i = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2 Y_i}{\partial z^2} \bigg|_{z_{st}} \rho_{st} \chi_{st} \tilde{P}(z_{st}) \quad (2.103)$$

Plusieurs solutions permettent de relier χ_{st} à la valeur moyenne :

- celui-ci peut être considéré indépendant de la fraction de mélange et estimé à l'aide d'une relaxation linéaire classique :

$$\chi_{st} = \tilde{\chi} = \frac{\varepsilon z''^2}{R_z k} \quad (2.104)$$

- celui-ci peut être estimé à partir de l'étude analytique réalisée sur les flammes laminares de diffusion à contre-courant qui relie le taux de dissipation au taux de dissipation stœchiométrique. Pour cette analyse, un taux de dissipation constant est considéré. Le taux de réaction s'écrit donc :

$$\tilde{\omega}_i = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2 Y_i}{\partial z^2} \bigg|_{z_{st}} \rho_{st} \tilde{\chi} \tilde{P}(z_{st}) \quad (2.105)$$

Cette formulation suppose donc que la consommation des réactifs est liée à l'amplitude de la pdf (représentant la quantité de matière à la stœchiométrie) pondérée par la rupture de pente à cet endroit et la dissipation moyenne de la variance de la fraction de mélange. En particulier, le concept des flammelettes amène, en cas de variance maximale (donc de pdf nulle à la stœchiométrie) à un taux de réaction nul ; le début de la dissipation, à partir d'une situation de variance maximale devrait se faire avec des dérivées des fractions massiques des espèces nulles. Cette conclusion est contraire à l'intuition, puisque l'on s'attend à ce que les flux réciproques de masse (échangés entre particules fluides) responsables

de la dissipation soient échangés entre les états extrêmes (oxydant et combustible purs) pour fournir instantanément des produits, répartis sur l'ensemble de l'intervalle de fraction de mélange (en particulier à la base des pics des fonctions β à forte variance) même si l'amplitude de la pdf à la stœchiométrie reste infime.

Cette formulation conduit à une autre conclusion : quand la moyenne de la fraction de mélange est suffisamment différente de la stœchiométrie, en dessous d'une valeur critique de la variance, la totalité de la masse se retrouve du même côté (riche ou pauvre) et, de par la linéarité des fractions massiques, la dissipation de la variance résiduelle n'a plus d'effet sur les fractions massiques. Nous nous attendons donc à ce que, lorsque la variance se rapproche de cette valeur limite (c'est-à-dire quand tout le support de la pdf s'approche d'un seul domaine de richesse), la dérivée décroisse progressivement et s'annule à la valeur critique : un comportement continu du terme source par rapport à la variance est alors souhaitable.

Dans le cadre d'une chimie infiniment rapide, l'expression du taux de réaction déduite du concept des flammelettes (Eq. 2.105) amène à des contradictions avec le sens physique.

Nous connaissons la loi de composition en fonction de la fraction de mélange sans faire d'hypothèses sur la répartition de la dissipation (Eq. 2.98). Nous pouvons également construire les pdfs associées à diverses valeurs de la fraction de mélange et de sa variance. Ainsi, dans le cas général, l'évolution des fractions massiques ne dépend que de l'évolution de la pdf sur son support contrôlée par les deux premiers moments, la fraction de mélange et sa variance.

Avec une chimie très simplifiée, nous savons écrire les fractions massiques et leur équation de transport indépendamment de la forme de la pdf. Ici, nous supposons des lois quadratiques pour les fractions massiques :

$$\begin{cases} Y_F = z^2 \\ Y_O = (1 - z)^2 \\ Y_P = 2z(1 - z) \end{cases} \quad (2.106)$$

illustrée par la figure 2.6. Dans ce cas particulier, les fractions massiques moyennes dépendent alors de la fraction de mélange moyenne et de sa variance selon :

$$\begin{cases} \tilde{Y}_F = \tilde{z}^2 + \tilde{z}''^2 \\ \tilde{Y}_O = (1 - \tilde{z})^2 + \tilde{z}''^2 \\ \tilde{Y}_P = 2\tilde{z} - 2\tilde{z}^2 = 2\tilde{z} - 2\tilde{z}^2 - 2\tilde{z}''^2 \end{cases} \quad (2.107)$$

Par la combinaison linéaire ci-dessus, nous pouvons établir l'équation de transport pour la fraction massique des produits à partir des équations de transport pour la fraction de mélange moyenne, son carré et sa variance et obtenir (le calcul détaillé est présenté en annexe B.1) :

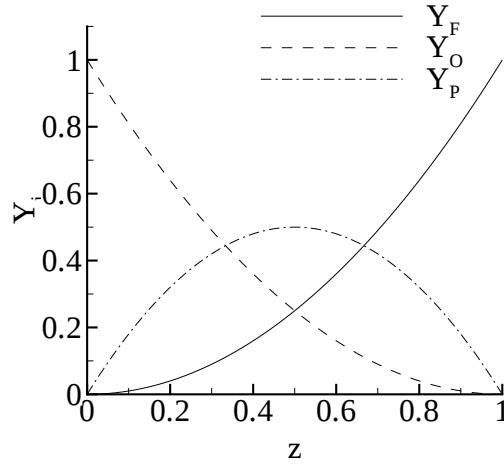


FIG. 2.6 – Fractions massiques instantanées pour une chimie quadratique.

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_P}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{Y}_P}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\rho} \widetilde{u_j'' Y_P''} \right) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\overline{\rho D \frac{\partial Y_P}{\partial x_j}} \right) + \overline{4 \rho D \frac{\partial z}{\partial x_j} \frac{\partial z}{\partial x_j}} \quad (2.108)$$

On observe alors que, pour cette loi d'état, le taux de réaction pour $\tilde{Y}_P$ est directement le double du taux de dissipation scalaire. Le même raisonnement peut être conduit quelque soit la loi d'état considérée mais la relation polynomiale entre les fractions massiques et la fraction de mélange et sa variance est perdue. On peut tout de même constater que la création des produits n'est due qu'à la dissipation scalaire, la convection, la diffusion et la diffusion turbulente se chargeant seulement de réalimenter la zone de réaction en réactifs (voir annexe B.2).

Nous étendons donc la constatation précédente à tout type de chimie pour relier l'évolution des fractions massiques au seul taux de dissipation scalaire, c'est-à-dire aussi, aux flux de masse échangés entre réactifs à travers la flamme, mais pondéré par la variation des concentrations avec la variance, ce que nous pouvons écrire mathématiquement :

$$\tilde{\omega}_i = -\bar{\rho} \tilde{\chi} \frac{\partial \tilde{Y}_i}{\partial z''^2} \quad (2.109)$$

Notons que dans le cas particulier des lois quadratiques, les deux formulations donnent le même résultat, et que l'expression 2.109 présente une certaine cohérence avec Bilger [9] et Peters [88] puisque le taux de réaction est proportionnel au taux de dissipation moyen.

La loi d'état quadratique nous a permis d'établir un lien direct entre le taux de réaction et le taux de dissipation. Nous nous intéressons maintenant à la chimie infiniment rapide, illustrée par la figure 2.7, plus physique mais plus raide mathématiquement parlant. L'expression de la dérivée pour ce modèle de chimie est donnée en annexe C.

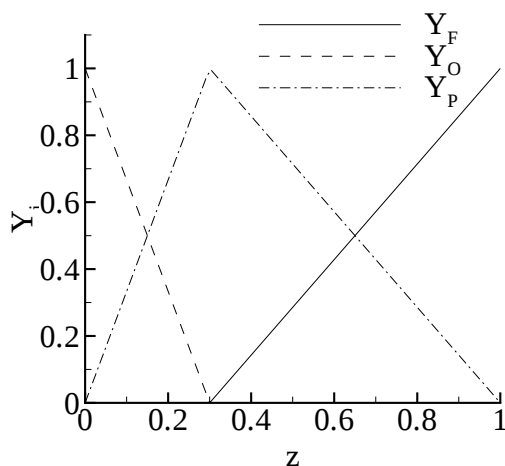


FIG. 2.7 – Fractions massiques instantanées pour une chimie infiniment rapide.

Utilisant la même loi d'état et la même fermeture pour le taux de dissipation scalaire, nous obtenons deux formulations que nous allons comparer sur trois configurations d'écoulement (se distinguant par la fraction de mélange moyenne) et pour trois formes de pdf présumées :

- une distribution de Curl constituée de deux pics de Dirac d'amplitudes et de positions adaptables. Introduites dans le contexte du génie chimique, les distributions de Curl permettent de représenter des flux interfaciaux mais ne sont pas adaptées à la représentation du mélange turbulent. Toutefois, elles permettent de représenter les deux premiers moments d'une distribution (avec une modification minime, il est même possible de retrouver un troisième moment identique à celui d'une fonction β , ce qui n'est pas le but de la présente étude). Avec une telle distribution, le taux de réaction proposé par le concept des flammelettes ne serait non nul que lors du passage d'un des pics à la stœchiométrie. La simplicité des formules de détermination des paramètres, et de l'intégration associée, permet de disposer d'une expression analytique de la dérivée de la fraction massique d'une espèce par rapport à la variance de la fraction de mélange.

- une pdf à rectangle et pics de Dirac, peu coûteuse et suffisamment précise du fait de la faible sensibilité des lois d'état aux moments d'ordre élevé. La simplicité des formules de détermination des paramètres, et de la formule de sommation associée, permet de disposer

d'une expression analytique de la dérivée de la fraction massique d'une espèce par rapport à la variance de la fraction de mélange.

- une pdf β réputée la plus physique. Malgré la simplicité des formules de détermination des paramètres, la complexité de l'intégration ne permet de disposer que d'une expression numérique (par différence finies) de la dérivée de la fraction massique d'une espèce par rapport à la variance de la fraction de mélange.

La figure 2.8 présente l'évolution de la fraction massique de produits $\tilde{Y}_P$ en fonction de la variance adimensionnée $\tilde{z}''^2/[\tilde{z}(1-\tilde{z})]$. Les produits étant créés avec la dissipation de la variance, les graphes se lisent de droite à gauche en suivant la décroissance de la variance. L'évolution de $\tilde{Y}_P$ est calculée avec les trois pdfs pour trois fractions de mélange moyenne $\tilde{z} = z_{st}/3$, $\tilde{z} = z_{st}$ et $\tilde{z} = 2z_{st}$ avec $z_{st} = 0.3$ correspondant à un combustible dilué. On retrouve le fait que la forme de la pdf a peu d'influence sur les grandeurs moyennes, si ce n'est l'amélioration de la continuité des fractions massiques par rapport à la variance de la fraction de mélange.

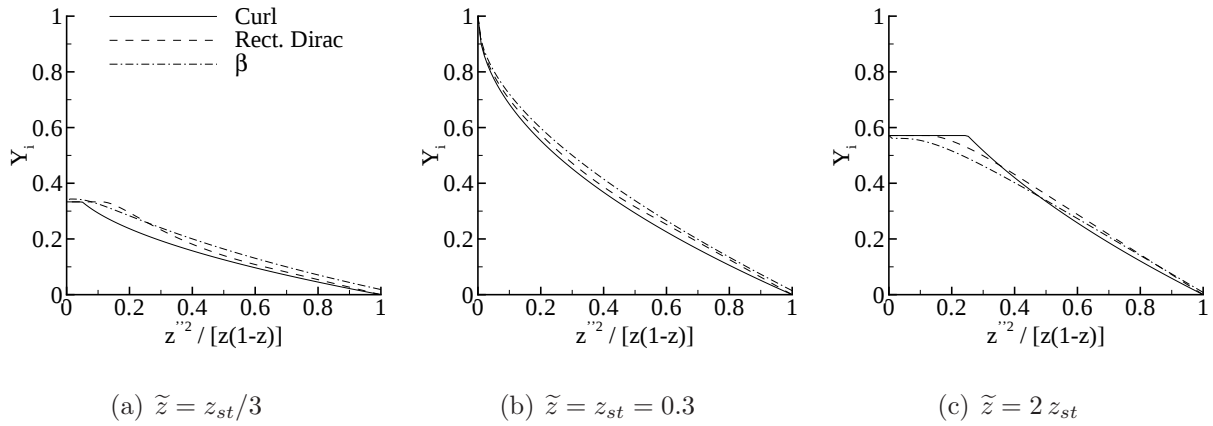


FIG. 2.8 – Evolution de la fraction massique de produits pour les trois types de pdf pour trois fractions de mélange moyenne en fonction de la variance adimensionnée $\tilde{z}''^2/[\tilde{z}(1-\tilde{z})]$

Puisque les deux formulations (Eq. 2.105 et 2.109) sont exprimées en fonction du taux de dissipation moyen, seuls les taux de réactions adimensionnés $\tilde{\omega}_i/\bar{\rho}\tilde{\chi}$ sont comparées. Les figures 2.9, 2.10 et 2.11 présentent l'évolution des fractions massiques des produits ainsi que celle des taux de réactions des deux formulations pour trois fractions de mélange moyennes $\tilde{z} = z_{st}/3$, $\tilde{z} = z_{st}$ et $\tilde{z} = 2z_{st}$, pour une variance adimensionnée par sa valeur maximale, $\tilde{z}''^2/[\tilde{z}(1-\tilde{z})]$ comprise entre 0 et 1, et ce, pour les trois formes de pdf.

Comme pour les fractions massiques, le taux de réaction calculé par dérivation (Eq. 2.109) est peu dépendant de la forme de la pdf. Par contre, le taux de réaction calculé à l'aide du

concept des flammelettes (Eq. 2.105) est d'une part très dépendant de la forme de la pdf et d'autre part très différent du taux calculé par dérivation.

En particulier, le concept des flammelettes amène systématiquement à un taux de réaction nul lorsque la variance est maximale illustrant la première remarque faite précédemment. Les deux dérivées sont censées représenter la même évolution de la fraction massique par rapport à la variance. Or une dérivée nulle implique que la fraction massique reste constante lorsque la variance évolue, ce qui n'est manifestement pas le cas.

La seconde remarque est bien illustrée par l'utilisation de la pdf rectangle-Dirac dans le cas où la fraction de mélange est différente de la stœchiométrie (Fig. 2.9.b, 2.10.b et 2.11.b). Avec cette pdf, le passage à une valeur nulle de la pdf est net ce qui entraîne une discontinuité sur la valeur du taux de réaction estimé avec le concept des flammelettes alors que la dérivation conduit à un taux de production qui rejoint continûment la valeur nulle. Cette transition est moins visible avec la pdf β car le passage à une valeur nulle de la pdf est continu (Fig. 2.9.c, 2.10.c et 2.11.c). Au contraire, elle est flagrante avec la distribution de Curl, le taux de réaction estimé avec le concept des flammelettes n'étant non nul que lorsque l'un des pics de Dirac se trouve à la stœchiométrie; ces positions sont matérialisées par les droites verticales sur les figures 2.9.a, 2.10.a et 2.11.a. En tenant compte de l'évolution des branches infinies de la pdf (ou des pics de Dirac) sur les bornes de son support, la consommation des réactifs est considérée dès la valeur maximale de la variance et quelque soit la valeur de la fraction de mélange moyenne, donc quelque soit la position de la pdf par rapport à la fraction de mélange stœchiométrique.

Enfin, sur les figures 2.9, 2.10 et 2.11 est également représentée la fraction massique des produits calculée à partir des deux formulations (Eq. 2.105 et 2.109). Seule la formule obtenue par dérivation permet alors de retrouver la fractions massique calculée par le modèle de combustion. Alors qu'elle utilise la même loi d'état, la formulation déduite du concept des flammelettes conduit toujours à une création plus tardive et sous-estimée des produits.

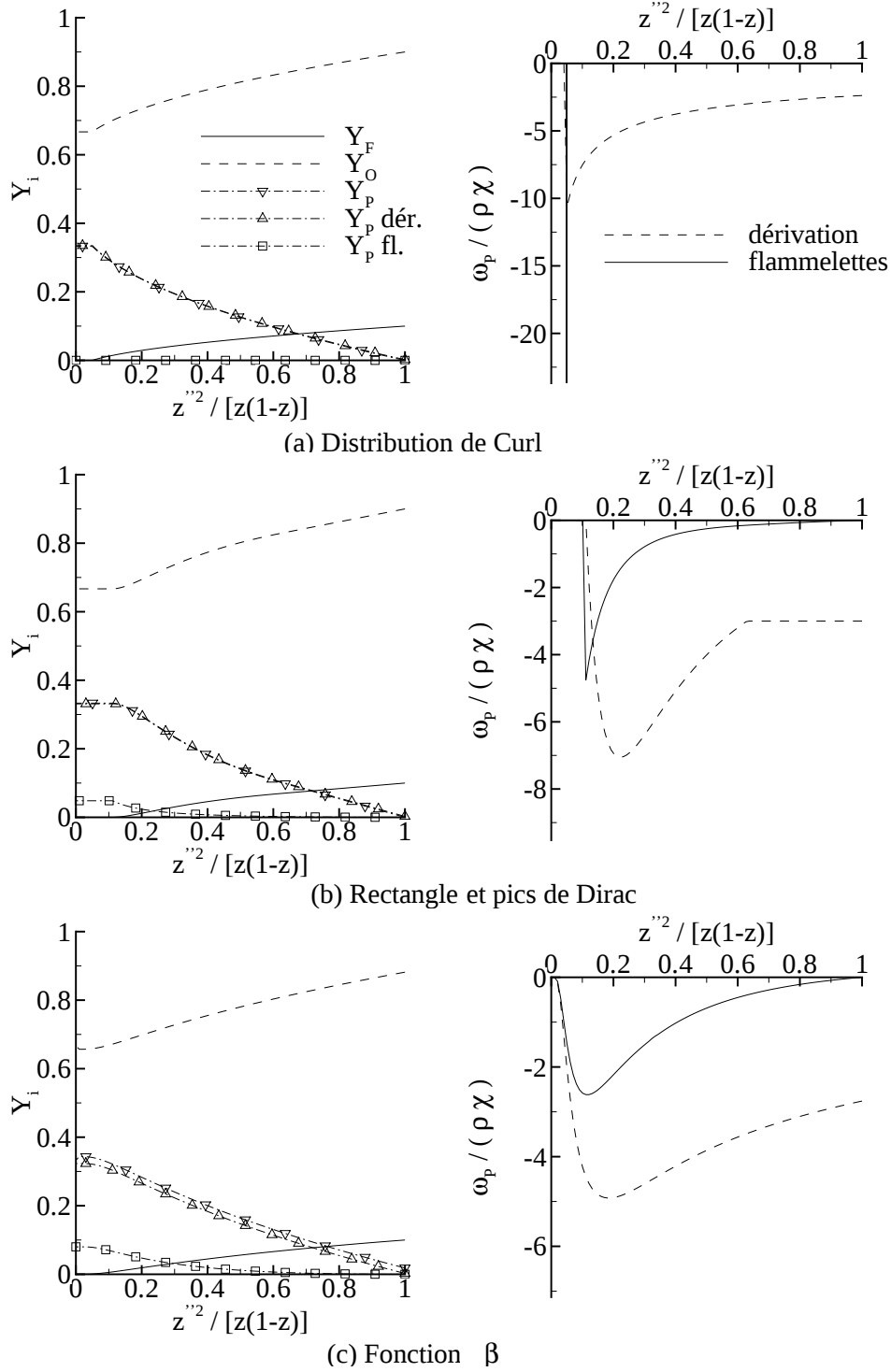


FIG. 2.9 – Evolution des fractions massiques de produits (à gauche) et des dérivées pour les deux formulations (à droite) en fonction de la variance adimensionnée $\tilde{z}''^2/[\tilde{z}(1-\tilde{z})]$ pour $\tilde{z} = z_{st}/3$.

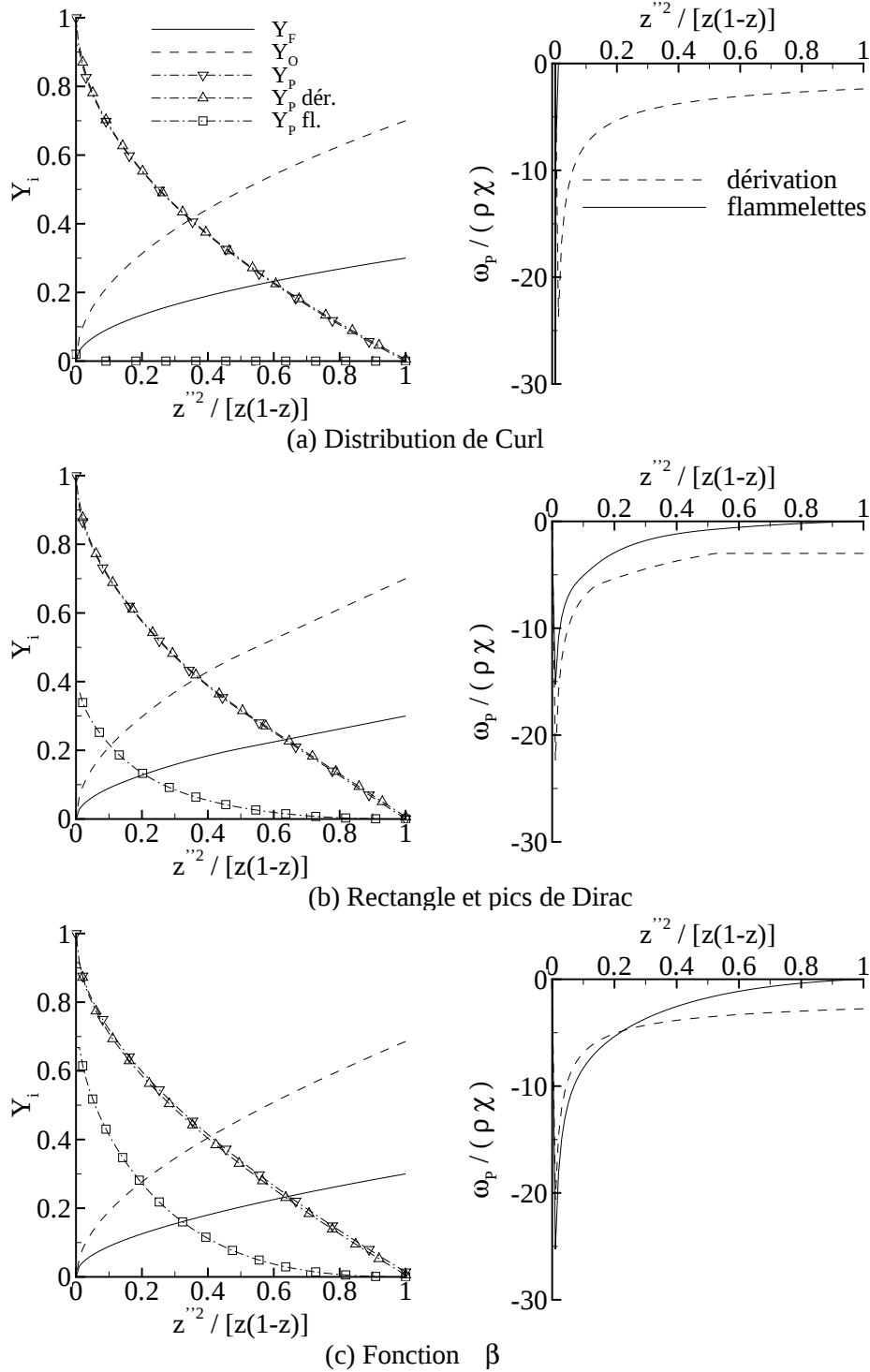
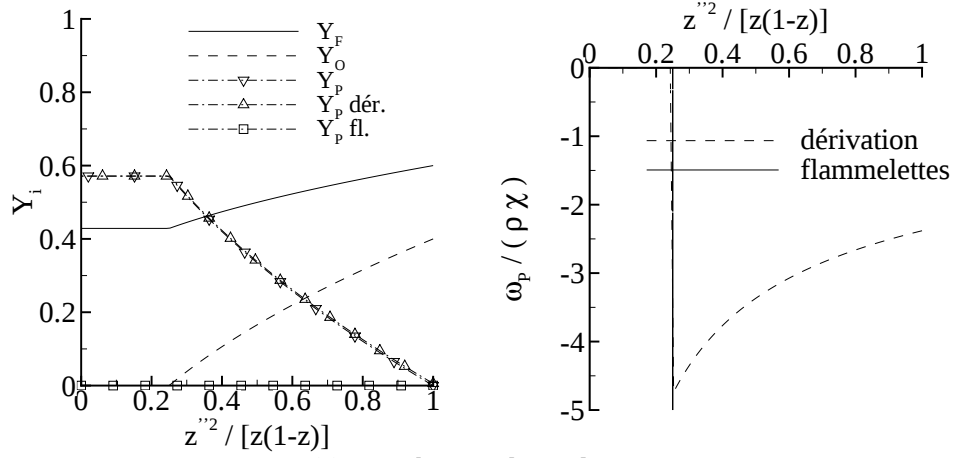
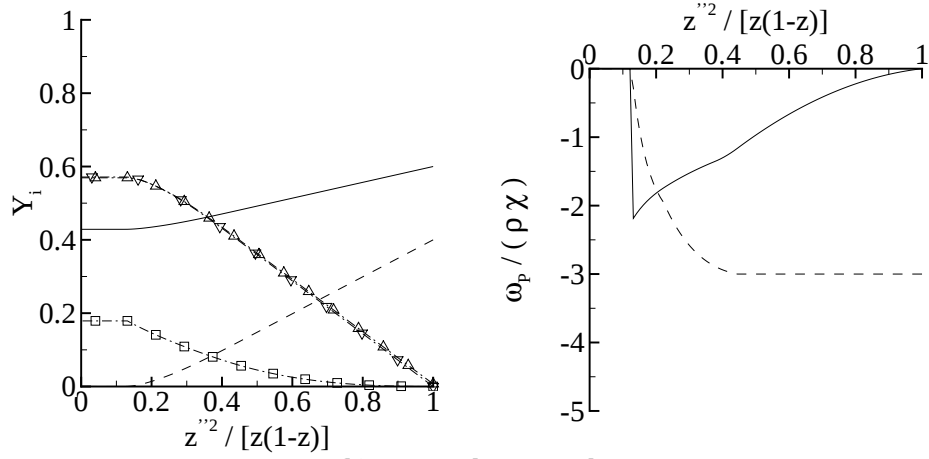


FIG. 2.10 – Evolution des fractions massiques de produits (à gauche) et des dérivées pour les deux formulations (à droite) en fonction de la variance adimensionnée $\tilde{z}''^2/[\tilde{z}(1-\tilde{z})]$ pour $\tilde{z} = z_{st}$.



(a) Distribution de Curl



(b) Rectangle et pics de Dirac

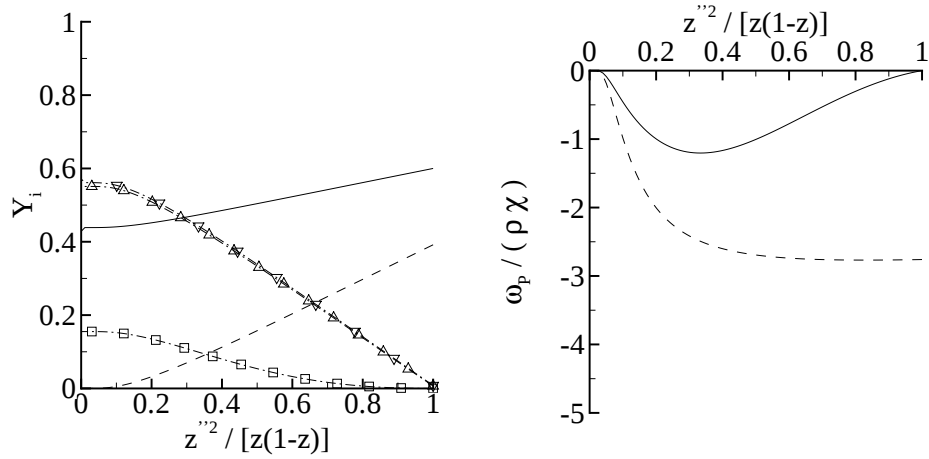
(c) Fonction β

FIG. 2.11 – Evolution des fractions massiques de produits (à gauche) et des dérivées pour les deux formulations (à droite) en fonction de la variance adimensionnée $\tilde{z}''^2/[\tilde{z}(1-\tilde{z})]$ pour $\tilde{z} = 2z_{st}$.

Les hypothèses qui sont faites pour établir la formule proposée par Peters [89] portent sur l'indépendance statistique entre la fraction de mélange et le taux de dissipation, ainsi que sur l'estimation de ce dernier à la stœchiométrie, qui représente finalement, la valeur conditionnée en z_{st} de $\rho\chi$. Ce terme représente le flux de matière traversant la flamme par diffusion et nous avons vu qu'il ne pouvait être dépendant que de l'amplitude de la pdf à la stœchiométrie, c'est-à-dire de la masse présente à cet endroit.

En égalant les deux expressions du taux de réaction, nous pouvons identifier le facteur reliant le taux de dissipation conditionné en z_{st} et le taux de dissipation moyen. Ce facteur est présenté sur la figure 2.12 sous la forme du rapport χ_{st}/χ en fonction de la variance adimensionnée pour trois fractions de mélange moyenne, pour la pdf rectangle-Dirac et la fonction β .

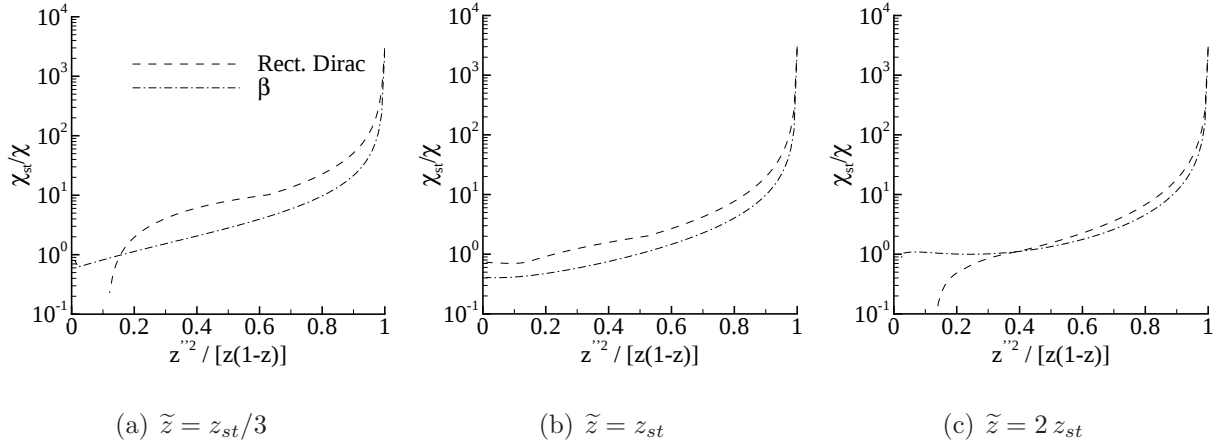


FIG. 2.12 – Rapport de la dissipation conditionnée sur la dissipation moyenne χ_{st}/χ en fonction de la variance adimensionnée $\tilde{z}''^2/[\tilde{z}(1-\tilde{z})]$ pour les trois types de pdfs et pour trois fractions de mélange moyenne.

On constate clairement que ce facteur est loin de l'unité, en particulier lorsque l'on se trouve à la variance maximale où il tend vers l'infini. La dissipation scalaire est alors concentrée sur la ligne stœchiométrique, unique zone où les flux de masse entre combustible et oxydant sont échangées pour fournir des produits et où pourtant, l'amplitude de la pdf est nulle. En revanche, ce facteur tend vers l'unité avec la fonction β et vers zéro avec la pdf rectangle-Dirac lorsque la variance est totalement dissipée.

L'hypothèse d'uniformité du taux de dissipation à travers la flamme n'est donc pas vérifiée dans nos exemples. Cependant, même en utilisant un modèle physique plus solide pour estimer la dissipation conditionnée à la stœchiométrie, l'hypothèse d'indépendance statistique faite entre la fraction de mélange et le taux de dissipation conduira toujours à une dépendance directe du taux de réaction à l'amplitude de la pdf à la stœchiométrie, c'est-à-dire à la masse présente à cet endroit et non pas aux flux de masse réciproques échangés à travers la flamme.

Toujours en égalant les deux expressions pour le taux de réaction, et sans faire l'hypothèse d'indépendance statistique entre la fraction de mélange et le taux de dissipation, il est possible de déterminer la valeur (numérique) du taux de dissipation conditionné dans la flamme turbulente, soit $(\rho\chi|z_{st})\tilde{P}(z_{st})$ qui représente les flux de masse échangés à travers la stœchiométrie. La figure 2.13 présente l'évolution de ce dernier adimensionné par le taux de dissipation moyen.

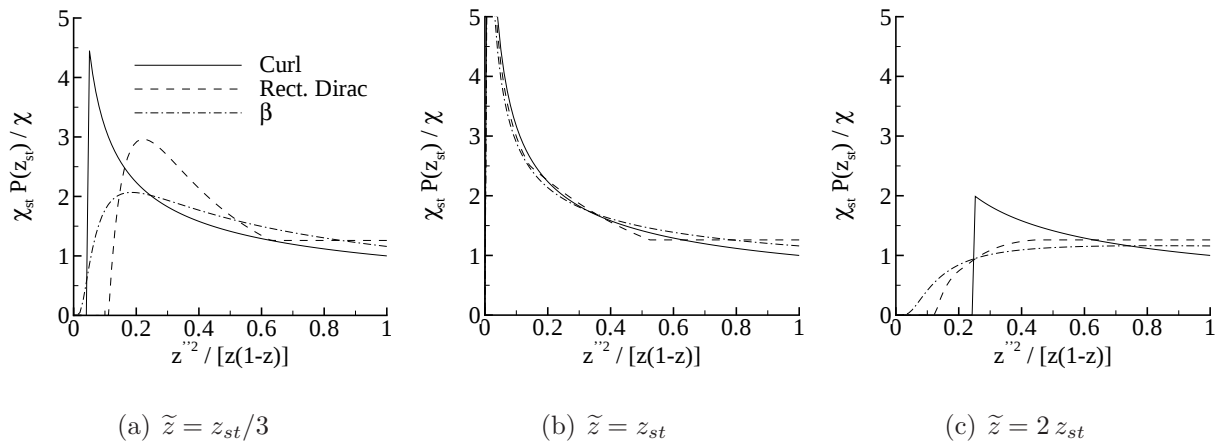


FIG. 2.13 – Rapport de la dissipation conditionnée par l'amplitude de la pdf à la stœchiométrie sur la dissipation moyenne $\chi_{st}\tilde{P}(z_{st})/\tilde{\chi}$ en fonction de la variance adimensionnée $\tilde{z}''^2/[\tilde{z}(1-\tilde{z})]$ pour les trois types de pdfs et pour trois fractions de mélange moyenne.

Lorsque l'on est à forte variance, ce rapport est de l'ordre de l'unité indiquant que l'ensemble de la dissipation participe à la réaction. A faible variance, deux cas sont à distinguer. Lorsque la fraction de mélange moyenne est suffisamment loin de la stœchiométrie (Fig. 2.13.a et 2.13.c), l'ensemble de la pdf se trouve du même côté (pauvre ou riche). Aucun flux de masse n'est échangé à travers la flamme, ce qui explique que le taux de dissipation conditionné s'annule. Par contre, lorsque l'on se trouve à la stœchiométrie (Fig. 2.13.b), le taux de dissipation proportionnel à la variance, tend vers zéro et le rapport $\chi_{st}\tilde{P}(z_{st})/\tilde{\chi}$ tend vers l'infini. En revanche, le taux de dissipation conditionné tend bien vers zéro indiquant qu'aucun flux de masse ne traverse la frontière stœchiométrique car tous les réactifs ont été consommés.

Les constatations faites dans cette analyse sont flagrantes en utilisant une hypothèse de chimie infiniment rapide, mais le raisonnement reste le même quelque soit le type de chimie utilisée. Cependant, pour une cinétique chimique finie ou à l'équilibre, la zone de réaction est plus large et le temps de séjour des réactifs dans cette zone plus long ; la différence entre quantité de matière et flux de masse échangés avec les réactifs dans cette zone est réduite, ce qui peut donner lieu à des résultats cohérents.

L'analyse qui conduit à l'expression 2.105 est développée dans un contexte de flammes dont ne relèvent pas rigoureusement les exemples présentés ici. Nous considérons donc la dérivation de la loi d'état (Eq. 2.109) comme une possibilité d'estimation de la libération d'enthalpie par une flamme, utilisable dans davantage de cas notamment plus proches des configurations industrielles. Cette formulation permet de s'affranchir des critères de validité très contraignants imposés par le concept des flammes qui ne sont que rarement respectés comme le mentionne Bilger [10].

Chapitre 3

Modélisation du rayonnement

Lors d'un incendie, un tiers de la puissance du feu est due au rayonnement de la flamme. La flamme tout comme les fumées et les parois rayonnent dans différents spectres d'émission selon le matériau considéré. Le rayonnement est donc un élément primordial ; il est le principal vecteur d'énergie, responsable de la propagation du feu. Ce transfert d'énergie est instantané et sans support matériel. L'énergie est portée par les photons et opère donc à distance. On comprend alors son importance et la nécessité de sa prise en compte dans la simulation, de même qu'il est important de bien comprendre la formation des fumées et le rayonnement qu'elles émettent.

Le rayonnement d'une flamme se manifeste par la lumière jaune qui s'en échappe. Elle correspond à l'émission de photons lors de la vibrations et rotations des molécules constituants les produits de combustion ainsi que des particules solides imbrûlées s'oxydant à travers la zone riche en oxygène de la flamme.

Seules les molécules ayant un moment dipolaire peuvent interagir avec les radiations électromagnétiques de la flamme. Ainsi, les molécules symétriques telles que N_2 , O_2 ou les cycles benzéniques restent transparents alors que les molécules hétéronucléaires dissymétriques telles que CO , CO_2 , H_2O ou les suies peuvent absorber ou émettre certaines longueurs d'onde. Par exemple, le CO_2 possède trois bandes d'absorption à 2.8, 4.4 et 15 μm (Fig. 3.1).

L'intensité lumineuse subit trois phénomènes à la traversée d'un milieu non-transparent : la diffusion, l'absorption et l'émission. La perte d'intensité dI_λ à travers une épaisseur dx d'un milieu est proportionnelle à l'intensité I_λ , le coefficient d'absorption κ_λ dépendant de la concentration de l'espèce absorbante et l'épaisseur dx :

$$dI_{\lambda x} = \kappa_\lambda I_{\lambda x} dx \quad (3.1)$$

En intégrant sur l'épaisseur du milieu L , on obtient la valeur de l'intensité à la sortie du milieu connue comme la loi de Beer-Lambert :

$$I_{\lambda L} = I_{\lambda 0} e^{-\kappa_\lambda L} \quad (3.2)$$

où $I_{\lambda 0}$ est l'intensité lumineuse à l'entrée du milieu. Ainsi, plus le milieu est épais ou

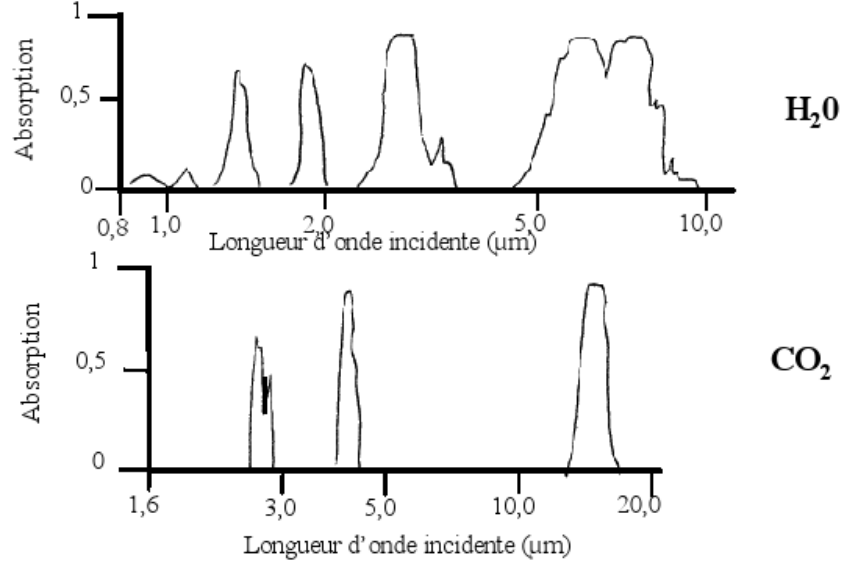


FIG. 3.1 – Spectre d’absorption de la vapeur d’eau et du dioxyde de carbone à pression atmosphérique

concentré en espèces absorbantes, plus il sera absorbant. La pression joue également un rôle en modifiant la pression partielle de l’espèce, liée à la concentration.

3.1 Equation des Transferts Radiatifs

Les transferts radiatifs dans un milieu peuvent donc être caractérisés par l’évolution de l’intensité lumineuse I_λ traversant ce milieu le long d’un rayon lumineux, énergie rayonnée par unité de temps et par longueur d’onde λ passant à travers la surface normale à la direction Ω du rayon dans un angle solide centré autour de Ω . C’est donc une puissance par unité de surface et par stéradian ($W/m^2.sr$).

Ce rayon lumineux peut être diffusé, absorbé et/ou émis. Un bilan sur un élément curviligne de ce rayon donne lieu à une équation dite *Equation des Transferts Radiatifs* (ETR) (Eq. 3.3) composée d’une dérivée temporelle, un terme de transport à la vitesse de la lumière c le long de l’abscisse curviligne s dans la direction Ω et les trois termes sources S altérant l’intensité lumineuse du rayon [77].

$$\frac{1}{c} \frac{\partial I_\lambda}{\partial t} + \frac{\partial I_\lambda}{\partial s} = S_{\text{emission}} + S_{\text{absorption}} + S_{\text{diffusion}} \quad (3.3)$$

Le milieu émet une intensité lumineuse caractérisée grâce à un coefficient d’émission ε_λ par rapport à l’intensité émise par un corps noir à la même température. Le gain d’intensité pour le rayon est alors

$$S_{\text{emission}} = \varepsilon_\lambda I_{\lambda b} \quad (3.4)$$

où $I_{\lambda b}$ est l'intensité du corps noir et s'exprime selon

$$I_{\lambda b} = \frac{2\hbar c^2}{\lambda^5 \left(e^{\hbar c / k_b \lambda T} - 1 \right)} \quad (3.5)$$

avec $\hbar$ la constante de Planck, k_b la constante de Boltzmann et T la température. Intégré sur l'ensemble du spectre, l'intensité lumineuse du corps noir s'exprime à l'aide de la loi de Stephan-Boltzmann :

$$I_b = \int_0^\infty I_{\lambda b} d\lambda = \frac{\sigma}{\pi} T^4 \quad (3.6)$$

L'absorption du milieu est caractérisée par un coefficient d'absorption κ_λ positif ou nul qui tend à diminuer l'intensité lumineuse selon

$$S_{absorption} = -\kappa_\lambda I_\lambda \quad (3.7)$$

L'absorptivité correspondante α_λ se déduit alors de l'épaisseur optique du milieu τ_λ :

$$\alpha_\lambda = 1 - e^{-\tau_\lambda} \text{ avec } \tau_\lambda = \int_0^s \kappa_\lambda ds \quad (3.8)$$

La diffusion du milieu est caractérisée par un coefficient de diffusion σ_λ . Le rayon perd de son intensité et en récupère par la diffusion des autres rayons. Le premier cas est traité de manière analogue à l'absorption, le second utilise une fonction de phase, rapport entre la diffusion anisotrope et une diffusion isotrope, traduisant la probabilité qu'un rayon provenant d'une direction Ω_i soit diffusé dans la direction Ω :

$$S_{diffusion} = -\sigma_\lambda I_\lambda + \frac{\sigma_\lambda}{4\pi} \int_0^{4\pi} I_\lambda(s, \Omega_i) \phi(\lambda, \Omega, \Omega_i) d\Omega_i \quad (3.9)$$

La résolution de cette équation est lourde car il faut considérer chaque direction de propagation et chaque longueur d'onde. Dans la pratique, des hypothèses permettent de simplifier le calcul, la première étant que le temps de propagation d'un rayon lumineux est infiniment court devant tous les temps caractéristiques généralement rencontrés dans les applications industrielles. Le terme temporel peut donc être négligé, le coefficient d'émission peut être pris égal au coefficient d'absorption et la diffusion peut être négligée, hypothèses qui seront justifiées dans les paragraphes suivants :

$$\frac{\partial I_\lambda}{\partial s} = \kappa_\lambda (I_{\lambda b} - I_\lambda) \quad (3.10)$$

Pour des milieux gris, l'ETR peut être intégrée sur toutes les longueurs d'ondes, la résolution d'une seule équation est alors suffisante :

$$\frac{\partial I}{\partial s} = \kappa I_b - \kappa I = \kappa \left(\frac{\sigma}{\pi} T^4 - I \right) \quad (3.11)$$

Le flux radiatif est l'intensité lumineuse de toutes les longueurs d'onde passant par l'élément de surface selon toutes les directions Ω :

$$\underline{q}_r = \int_0^\infty \int_{4\pi} I_\lambda(\underline{s}, \Omega) \underline{s} d\Omega d\lambda \quad (3.12)$$

Un bilan de flux sur un élément de volume permet d'estimer l'énergie gagnée ou perdue par rayonnement $\dot{q}'''$ dans l'écoulement (Eq. 2.2) :

$$\dot{q}''' = -\nabla \cdot \underline{q}_r = -\nabla \cdot \int_0^\infty \int_{4\pi} I_\lambda(\underline{s}, \Omega) \underline{s} d\Omega d\lambda \quad (3.13)$$

En intégrant l'ETR sur toutes les directions, ne contribuent à l'évolution de l'énergie totale du système que l'émission et l'absorption, la diffusion ne faisant que rediriger les flux d'énergie n'apparaît plus dans le bilan global :

$$\nabla \cdot \underline{q}_r = 4\pi \int_0^\infty \varepsilon_\lambda I_{\lambda b} d\lambda - \int_0^\infty \kappa_\lambda G_\lambda d\lambda \text{ avec } G_\lambda = \int_{4\pi} I_\lambda(\underline{s}, \Omega) d\Omega \quad (3.14)$$

La résolution exacte de cette équation n'est possible que dans des cas de géométries très simples et à l'aide d'hypothèses simplificatrices fortes sur les propriétés radiatives inapplicables dans la majorité des cas. Il existe plusieurs méthodes approchées pour la résolution de l'ETR dont quatre principales [49] :

- *la méthodes des harmoniques sphériques ou modèle $P - n$* : l'intensité lumineuse étant une fonction angulaire via l'angle solide, elle est décomposée en harmoniques sphériques, pendant des séries de Fourier appliquées aux fonctions périodiques appliqué aux fonctions angulaires. En faisant l'hypothèse d'un milieu gris, cette méthode permet de résoudre l'ETR à l'aide d'une seule équation. Cette méthode est réservée aux milieux optiquement épais et n'est pas appropriée pour les milieux stratifiés rencontrés dans les incendies.

- *la méthode des zones* : le domaine est divisé en zones homogènes en température et propriétés radiatives. Les échanges entre zones et surfaces sont alors estimés à l'aide de facteurs de forme donnant lieu à une équation pour la température ou le flux de chaque zone. La solution est obtenue en inversant le système d'équations couplées entre elles. La méthode demande l'utilisation d'un nombre suffisant de zones pour être efficace. Les coefficients d'échange doivent aussi être stockés au préalable, ce qui peut devenir coûteux si la géométrie est compliquée.

- *les méthodes de flux* : l'ensemble des directions de propagation est discrétisé en un nombre fini de directions pour lesquelles l'intensité lumineuse est considérée sur la largeur de l'angle solide. L'ETR est alors résolue sur chaque direction. Selon le nombre de directions choisi, on obtient les méthodes à deux, quatre ou six flux, associées à une discrétisation cartésienne. Ne pouvant pas tenir compte des rayons provenant de directions non orthogonales au maillage, cette méthode a été généralisée à une discrétisation non cartésienne. La méthode de transferts radiatifs discrets (DTRM), la méthode des ordonnées discrètes (DOM) ou la méthode des volumes finis (FVM) donnent la luminance sur un nombre quelconque de directions, l'efficacité de la méthode augmentant avec le nombre de directions.

La méthode DTRM traite l'ETR sous sa forme intégrale, calculant la luminance de proche en proche le long d'un rayon, les méthodes DOM et FVM traitent l'ETR sous sa forme différentielle.

- *les méthodes statistiques* (méthode de Monte-Carlo) : l'évolution d'un ensemble de photons est calculée. Chaque photon représentant une possibilité d'évolution, l'intensité lumineuse est reconstruite statistiquement en chaque point du domaine. Pour être efficace, la méthode demande un nombre de photons important ce qui rend le coût de calcul élevé, restant toutefois raisonnable devant le coût de calcul des méthodes précédentes.

3.2 Propriétés radiatives du milieu

D'après la loi de Kirchhoff, les coefficients d'émissivité et d'absorption sont égaux sur chaque longueur d'onde [7], supposant un équilibre thermodynamique local. Le milieu est donc caractérisé par ses coefficients d'absorption et de diffusion. Dans le cadre des incendies, les fumées occupant le milieu sont constituées de produits de combustion tels que le dioxyde de carbone (CO_2), la vapeur d'eau (H_2O), le diazote (N_2) et d'autres composés plus exotiques (CO , HCS , HCN , HCl , HF , HBr , etc.) selon la composition du combustible (C , H , O , N , Cl , F , Br), ainsi que de particules solides d'imbrûlés, les suies. Ces suies ou particules de suies résultent en majeure partie d'une combustion incomplète de mélanges riches dus à des débits de pyrolyse importants pour une faible concentration en oxygène, très dépendant du taux d'entraînement d'air frais indépendamment de l'état du combustible. Les gaz sont peu diffusants [132], de même que les suies tant qu'elles restent petites ($d < 0.1 \mu m$) [111]; les termes de diffusion peuvent donc être négligés.

Le calcul du coefficient d'absorption est rendu difficile par les interactions entre les différents composants du milieu, sa forte dépendance à la longueur d'onde et donc à la température. Son calcul est souvent séparé en une partie concernant les gaz et une partie concernant les suies [84]

$$\kappa = \kappa_{gaz} + \kappa_{suies} \quad (3.15)$$

scindant la difficulté en deux parties, le rayonnement des suies (en particulier la diffusion) étant un ordre de grandeur au-dessus de celui de la phase gazeuse.

3.2.1 Propriétés radiatives de la phase gazeuse

Le coefficient d'absorption d'une espèce gazeuse non transparente est estimé à partir de l'intensité lumineuse que le gaz absorbe à une longueur d'onde. Le spectre qui en résulte contient des raies spectrales caractérisées par une intensité et une largeur qui peuvent être très différentes d'une raie à une autre, recensées dans des bases de données (HITRAN pour High resolution TRANsmision par exemple). Ainsi, résoudre l'ETR pour chacune de ces longueurs d'onde est une tâche coûteuse en ressource informatique et impraticable en dehors de calculs servant de référence pour la validation de modèles sur des configurations simples.

Plusieurs approches ont été développées pour estimer le coefficient d'absorption :

- l'approche *raie par raie* ou *Line By Line* (LBL) : le spectre d'absorption est discrétisé en bandes très fines d'une largeur inférieure à $0,01 \text{ cm}^{-1}$. Cette méthode est la plus fine mais la plus coûteuse en temps de calcul.

- les *modèles à bandes étroites* ou *Narrow Band Models* (NBM) : la résolution spectrale est comprise entre 5 et 50 cm^{-1} . Chaque bande est caractérisée par une largeur et une intensité dépendant des raies présentes dans la bande. Différents modèles existent pour leur répartition (équidistantes pour le modèle d'Elsasser et aléatoire pour les modèles statistiques). Les fonctions obtenues permettent d'obtenir des coefficients d'absorption moyens (pour le modèle d'Elsasser) et des émissivités (ou absorptivités) moyennes par une intégration sur la bande :

$$\overline{\kappa_\lambda(\lambda)} = \frac{1}{\Delta\lambda} \int_{\lambda-\Delta\lambda/2}^{\lambda+\Delta\lambda/2} \kappa_\lambda d\lambda' \quad \overline{\alpha_\lambda(\lambda)} = \frac{1}{\Delta\lambda} \int_{\lambda-\Delta\lambda/2}^{\lambda+\Delta\lambda/2} (1 - e^{-\tau_\lambda}) d\lambda' \quad (3.16)$$

Ces modèles développés pour un unique gaz homogène s'étendent facilement à un mélange de gaz. Pour un gaz (ou mélange de gaz) inhomogène, c'est-à-dire dont la température varie le long d'une direction de résolution, un effort de modélisation est nécessaire pour prendre en compte l'effet de la température sur le spectre (modèle de Curtis-Godson par exemple). Ces modélisations portent sur l'émissivité intervenant dans la forme intégrale de l'ETR et sont difficilement applicables à sa forme différentielle utilisée dans les méthodes DOM ou FVM. Les modèles Ck (Correlated-k) pallient à cette difficulté en modélisant directement le coefficient d'absorption.

- les *modèles à bandes larges* ou *Wide Band Models* (WBM) : afin de réduire le temps de calcul, des bandes plus larges de 10 à 1000 cm^{-1} sont considérées réduisant ainsi le nombre d'intégrations sur le spectre entier. Différentes fonctions sont utilisées pour représenter la forme du spectre dans ces bandes telles que le modèle rectangulaire ou le modèle exponentiel à large bandes :

$$\overline{\alpha_\lambda(\lambda)} = \frac{1}{\Delta\lambda} \int_0^\infty \left(\frac{S}{d} \right)_\lambda f(\lambda) d\lambda' \quad \overline{\alpha_\lambda(\lambda)} = \frac{1}{\Delta\lambda} \int_0^\infty (1 - e^{-\tau_\lambda}) d\lambda' \quad (3.17)$$

où S , d et f sont l'amplitude, la largeur et la fonction donnant la forme (rectangulaire ou exponentielle) de la bande. Le gain de temps de calcul est cependant réalisé au détriment de la précision. Comme les modèles à bandes étroites, les modèles à larges bandes souffrent des mêmes inconvénients.

Modak [76] a proposé un modèle calculant l'émissivité ε d'un mélange CO_2 , H_2O et suies. L'émissivité du mélange gazeux est approchée par un polynôme dont les coefficients sont calibrés grâce à des données expérimentales. Cette méthode présente l'avantage de fournir des résultats relativement précis pour un coût de calcul raisonnable. Le coefficient d'absorption est alors donné par :

$$\kappa_{gaz} = -\frac{1}{\tau} \ln(1 - \alpha) \text{ avec } \alpha = \varepsilon \left(\frac{T}{T_s} \right)^{0.65-0.2\zeta} \text{ et } \zeta = \frac{P_{H_2O}}{P_{H_2O} + P_{CO_2}} \quad (3.18)$$

où τ est une longueur d'atténuation moyenne du milieu, T_s la température des suies, P_{H_2O} et P_{CO_2} sont les pressions partielles de H_2O et CO_2 . L'épaisseur optique moyenne est raisonnable estimée à l'aide de la surface S_f de la flamme et de son volume V_f [77] selon :

$$\tau \simeq 3.6 \frac{V_f}{S_f} \quad (3.19)$$

- les *modèles globaux* : à l'opposé des méthodes précédentes, ils proposent une donnée (émissivité ou coefficient d'absorption) moyenne sur l'ensemble du spectre tel que le coefficient d'absorption moyen tel que proposé par la relation de Magnussen et Hjertager [69] (Eq. 3.20) ou la relation de Fletcher [84] (Eq. 3.21) :

$$\kappa_{gaz} = 0.1 X_P \quad (3.20)$$

$$\kappa_{gaz} = 0.28 e^{-T/1135} \quad (3.21)$$

L'effet du mélange peut toutefois être pris en compte plus précisément par des compositions de modèles de gaz gris (Weight Sum of Gray Gas, WSGG). L'ETR est résolue pour des gaz fictifs bien choisis et la luminance du mélange est reconstituée à partir de la luminance de chaque gaz via des coefficients de pondérations adéquats [77].

Quelque soit le modèle de rayonnement retenu, il est préférable de prendre en compte les inhomogénéités du milieu. En effet, le rayonnement reçu en un point provient de l'émission de gaz ou particules en un autre point où la température peut être très différente même si les différences de température rencontrées dans les incendies ne dépassent généralement pas les 1000 degrés.

3.2.2 Propriétés radiatives des suies

Contrairement à la phase gazeuse, le spectre d'émission des suies est continu. Les suies étant des particules, leur rayonnement peut être décrit par la théorie de Mie. Les grandeurs optiques qui nous intéressent peuvent être calculées par la résolution des équations de Maxwell-Boltzmann qui décrivent la diffusion d'une onde électromagnétique plane par une particule sphérique [77]. Les particules de suies étant plus petites que le rayonnement visible et infrarouge (de 1 à 100 nm), elles sont un cas limite de la théorie de Mie, la diffusion de Rayleigh pour laquelle le paramètre de taille x est très faible :

$$x = \frac{2\pi a}{\lambda} \ll 1 \quad (3.22)$$

où a est le rayon de la particule. Pour une particule, la théorie prévoit un facteur d'efficacité d'absorption ou d'émission proportionnel au paramètre de taille et un facteur d'efficacité de diffusion proportionnel au paramètre de taille à la puissance quatre, ce qui permet souvent de négliger cette dernière contribution [77] :

$$Q_{\lambda abs} \propto \frac{2\pi a}{\lambda} \quad Q_{\lambda diff} \propto \left(\frac{2\pi a}{\lambda}\right)^4 \ll Q_{\lambda abs} \quad (3.23)$$

Le coefficient d'absorption des suies est alors obtenu en intégrant la section efficace d'absorption de chaque particule sur l'ensemble de la population dont le diamètre suit une distribution $n(a)$:

$$\kappa_{\lambda} = \int_0^{\infty} Q_{\lambda abs} a^2 g(a) n(a) da \quad (3.24)$$

En introduisant la fraction volumique de suies f_v

$$f_v = \int_0^{\infty} \left(\frac{4}{3}\pi a^3\right) n(a) da \quad (3.25)$$

le coefficient d'absorption peut se réécrire en fonction de f_v et de la température :

$$\kappa_{suies} = C_s f_v T \quad (3.26)$$

où C_s est une constante dépendant des indices de réfraction et d'absorption, du rapport H/C, mais variant autour de 1226 mK^{-1} d'un milieu optiquement fin à un milieu optiquement épais [77]. Le coefficient d'absorption des suies ainsi modélisé donne donc une information sur l'ensemble du spectre indépendamment de la longueur d'onde.

3.3 Formation des suies

Les suies résultent d'une suite de phénomènes physico-chimiques allant de l'échelle moléculaire jusqu'à l'échelle macroscopique. A l'échelle moléculaire, la formation des suies est liée à la cinétique chimique, contrôlée par l'équilibre entre les vitesses de formations des suies et celles de leur oxydation. Dans une zone de réaction pauvre en oxygène, l'oxydation est incomplète. Au lieu de former des produits de combustion simples (comme CO_2 , H_2O ou CO) certains radicaux hydrocarbonés se recombinent et conduisent à la formation d'hydrocarbures insaturés stables (alcènes, alcynes, etc.). L'acétylène C_2H_2 et ses dérivés, ou des espèces fortement insaturées (Butadiène C_4H_6 , etc.) sont considérés comme les précurseurs principaux de la formation des suies, menant à la formation du premier cycle aromatique comme le benzène C_6H_6 ou le radical phényl C_6H_5 (Fig.3.2) qui initie le processus de formation des hydrocarbures aromatiques polycycliques.

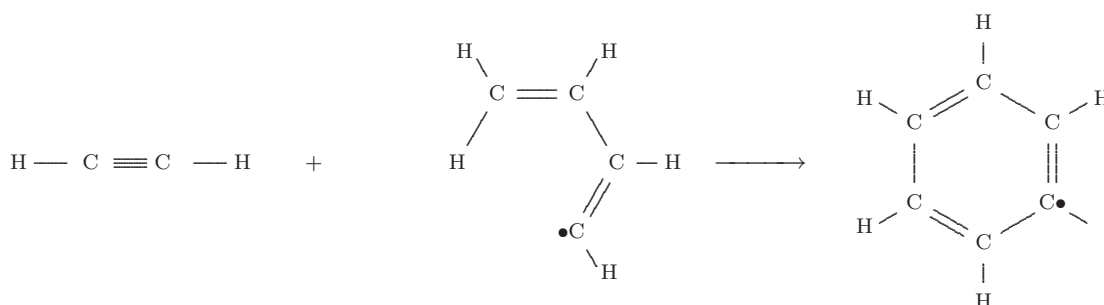


FIG. 3.2 – Exemple de formation du premier cycle benzénique

D'un seul noyau benzénique (1 nm) transparent, des suies constituées de plusieurs noyaux (10-100 nm) se forment par différents mécanismes dont le plus important est le mécanisme Hydrogen Abstraction - Carbon Addition (HACA) (Fig. 3.3). Ces suies seront oxydées en CO_2 et H_2O à leur passage dans la flamme à moins que la température et la concentration en oxygène ne soient pas assez élevées.

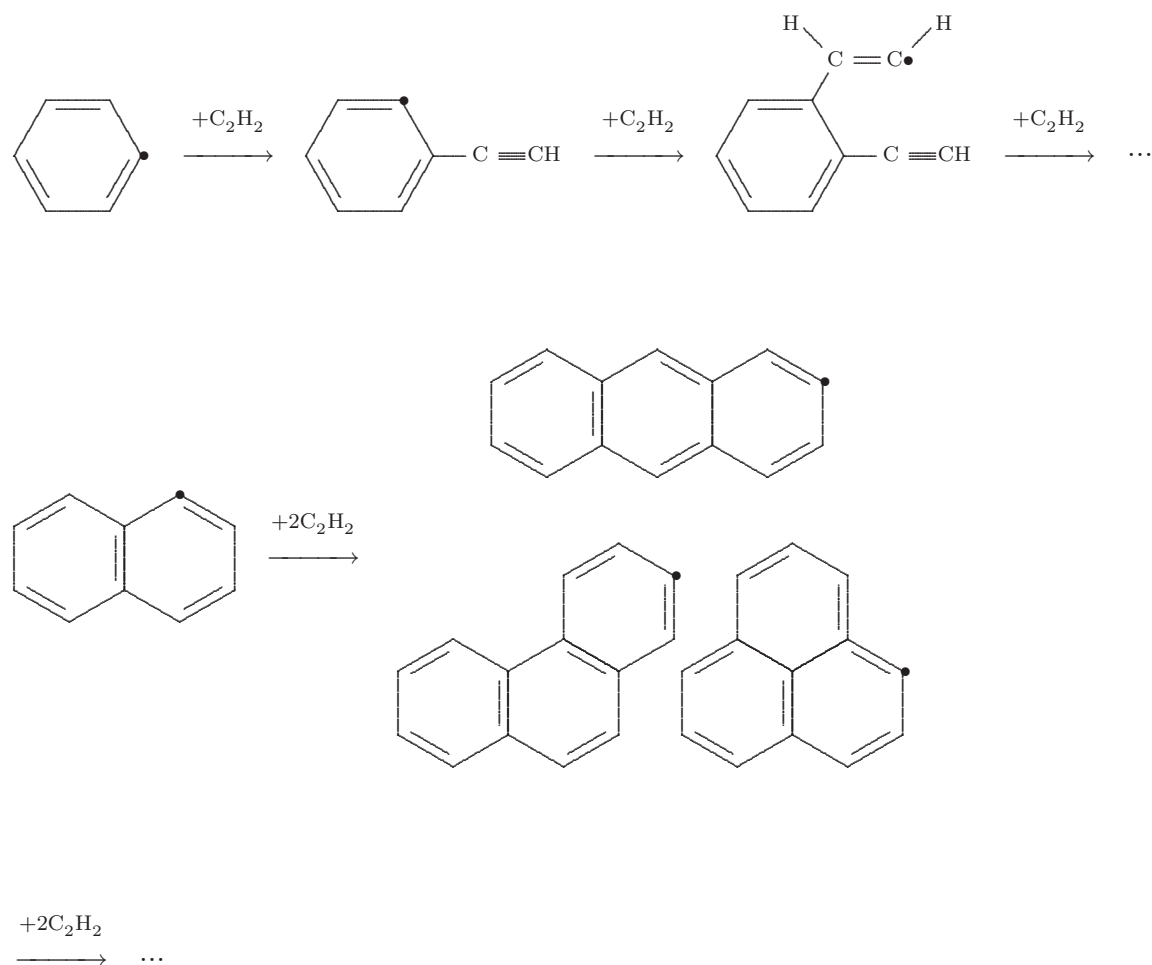


FIG. 3.3 – Exemple de mécanisme de formation des hydrocarbures aromatiques polycycliques (Hydrogen Abstraction - Carbon Addition)

Le passage de l'échelle moléculaire à l'échelle macroscopique, c'est-à-dire le processus de passage des hydrocarbures aromatiques polycycliques aux particules de suies est assez mal connu. Si elles ne sont pas oxydées, émettant cette lumière jaune, les suies grossissent par condensation surfacique et s'agglomèrent par coagulation pour former des particules de suies plus grosses qui quittent la flamme pour constituer les fumées. Lorsque leur taille atteint les longueurs d'onde du visible ($0.3 - 0.7 \mu m$), elles peuvent absorber et/ou réfléchir la lumière causant alors une réduction de la visibilité.

Pour modéliser ces phénomènes, trois types de modèles sont présents dans la littérature. Les modèles empiriques, surtout utilisés dans l'ingénierie de l'automobile pour les moteurs Diesel, sont des corrélations déterminant une richesse, une hauteur critique d'émission

des suies [51], ou le terme source réactif d'une équation pour des fractions massiques ou concentrations de suies en fonction des caractéristiques de la flamme et du combustible [54]. Ces modèles ne doivent être utilisés que dans des conditions similaires à leur établissement.

Les modèles semi-empiriques ont pour ambition de prendre en compte les différents phénomènes physiques régissant l'évolution des suies (nucléation, croissance, coagulation, oxydation). D'une manière générale, ils décomposent la formation des suies en une étape de formation de précurseurs puis une seconde étape de transformation en suies [51, 79, 115, 116] tenant plus ou moins compte de la chimie de formation et oxydation des suies.

Deux équations de transport sont alors résolues :

- une pour le nombre de précurseurs n ou son équivalent $\zeta_n = \frac{n}{\rho \mathcal{N}_0}$ adimensionné à l'aide de la densité du mélange et le nombre d'Avogadro $\mathcal{N}_0$,
- une pour la fraction volumique de suies f_v ou son équivalent $\zeta_s = \frac{\rho_s}{\rho} f_v$ adimensionné à l'aide de la densité du mélange et la densité des suies ρ_s .

$$\frac{\partial \rho \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \underline{u} \phi) = \nabla \cdot (\rho D \nabla \phi) + S_\phi \quad (3.27)$$

Dans la première version de son modèle, Moss *et al.* [79] utilisent une croissance de la surface linéaire en temps :

$$\begin{aligned} S_{\zeta_n} &= \alpha - \rho^2 \beta \zeta_n^2 \\ S_{\zeta_s} &= \delta + \mathcal{N}_0 \rho \gamma \zeta_n \end{aligned} \quad (3.28)$$

mais Syed *et al.* [115] préfèrent une croissance linéaire par rapport à la surface spécifique :

$$\begin{aligned} S_{\zeta_n} &= \alpha - \rho^2 \beta \zeta_n^2 \\ S_{\zeta_s} &= \delta + \rho \gamma \mathcal{N}_0^{1/3} \zeta_n^{1/3} \zeta_s^{2/3} \end{aligned} \quad (3.29)$$

avec les termes de :

$$\begin{array}{ll} \text{nucléation} & \alpha = C_\alpha \rho^2 T^{1/2} X_F e^{-T_\alpha/T} \\ \text{coagulation} & \beta = C_\beta T^{1/2} \\ \text{croissance de surface} & \gamma = C_\gamma \rho T^{1/2} X_F e^{-T_\gamma/T} \\ \text{nucléation} & \delta = 144 \alpha \end{array} \quad (3.30)$$

où X_F est la fraction molaire de combustible, ρ et T la densité et la température du mélange gazeux, C_α , C_β , C_γ , T_α et T_γ des constantes ajustées sur des expériences avec des combustibles à courte chaîne carbonée ($n_C < 3$) sur des flammes laminares (Tab. 3.1).

	$C_\alpha \text{ (m}^3\text{kg}^{-2}\text{K}^{-1/2}\text{s}^{-1}\text{)}$	$C_\beta \text{ (m}^3\text{K}^{-1/2}\text{s}^{-1}\text{)}$	$C_\gamma \text{ (m}^3\text{K}^{-1/2}\text{s}^{-1}\text{)}$	$T_\alpha \text{ (K)}$	$T_\gamma \text{ (K)}$
Méthane	$6.54 \cdot 10^4$	$1.3 \cdot 10^7$	0.1	$46.1 \cdot 10^3$	$12.6 \cdot 10^3$
Ethylène	$6 \cdot 10^6$	$2.25 \cdot 10^{15}$	$6.3 \cdot 10^{-14}$	$46.1 \cdot 10^3$	$12.6 \cdot 10^3$

TAB. 3.1 – Constantes pour le modèle de suies [80, 115]

La prise en compte de l'oxydation des suies par l'oxygène se fait par un terme additionnel dans l'équation pour la fraction volumique de suies :

$$S_{\zeta_s,ox} = -\varsigma \rho \mathcal{N}_0^{1/3} \zeta_n^{1/3} \zeta_s^{2/3} \omega_{ox} \text{ avec } \varsigma = \left(\frac{36\pi}{\rho_s^2} \right)^{1/3} \quad (3.31)$$

où le taux d'oxydation est modélisé par le modèle de Nagle et Strickland-Constable [81] :

$$\omega_{ox} = 120 \left[\frac{k_A p_{O_2} \chi}{1 + k_Z p_{O_2}} + k_B p_{O_2} (1 - \chi) \right] \quad (3.32)$$

avec

$$\begin{aligned} k_A &= 20 e^{-15098/T} \\ k_B &= 4.46 \cdot 10^{-3} e^{-7650/T} \\ k_T &= 1.51 \cdot 10^5 e^{-48817/T} \\ k_Z &= 21.3 e^{2063/T} \\ \chi &= \left[1 + \left(\frac{k_T}{k_B p_{O_2}} \right) \right]^{-1} \end{aligned} \quad (3.33)$$

Les modèles semi-empiriques contiennent de nombreuses constantes dépendant du combustible et des conditions d'expérience. Leur généralisation est donc délicate. Seuls les modèles à chimie détaillée peuvent espérer décrire de manière universelle le comportement des suies. En effet, ils décrivent la formation du premier cycle aromatique à partir de l'acétylène, la formation des hydrocarbures polycycliques aromatiques responsables de la croissance des suies par mécanisme HACA (Hydrogen Abstraction C_2H_2 Addition) ou par coagulation de deux aromatiques jusqu'à leur oxydation par les radicaux $OH\cdot$ ou l'oxygène au passage de la flamme. Cependant, ils n'ont été validés que sur des flammes laminares et surtout demandent une chimie détaillée.

3.4 Interaction avec les autres phénomènes physiques

Le rayonnement affecte les transferts d'énergie dans l'ensemble de l'écoulement. Il est donc en interaction avec tous les autres phénomènes physiques qui interviennent dans l'évolution des transferts d'énergie. Cela implique la réaction de combustion qui transforme l'énergie contenue dans les molécules en chaleur et la turbulence qui modifie les transferts de masse. L'effet de la turbulence sur la formation des suies est également évoqué car ces dernières jouent un rôle non négligeable dans l'évolution des propriétés radiatives du milieu. Le traitement de ces trois interactions est donc maintenant évoqué.

3.4.1 Interaction entre la combustion et le rayonnement

Le rayonnement de la phase gazeuse et des suies a pour conséquence de redistribuer l'énergie dans le milieu. Cet effet doit donc être pris en compte dans l'estimation de la température pour le calcul de la masse volumique. Pour un calcul sans pertes radiatives, l'enthalpie totale est un scalaire passif. Adimensionnée par les enthalpies du combustible h_F et de l'oxydant h_O :

$$h^*(z) = \frac{h - h_O}{h_F - h_O} \quad (3.34)$$

l'enthalpie réduite h^* satisfait la même équation que la fraction de mélange. La résolution de cette équation est donc inutile et la température est directement déduite de la fraction de mélange z :

$$T(z) = T_0 + \frac{1}{C_p}(h(z) - h_0) \text{ avec } h(z) = zh_F + (1 - z)h_O \quad (3.35)$$

Afin de considérer les pertes radiatives, une équation pour l'enthalpie totale doit être résolue. Elle prend comme terme source la divergence du flux radiatif (Eq. 3.13). La loi reliant l'enthalpie transportée et la fraction de mélange n'est plus linéaire mais linéaire par morceaux comme présentée sur la figure 3.4. Ici, le choix présenté fait porter les pertes radiatives sur les produits de combustion caractérisés par une fraction de mélange stœchiométrique z_{st} qui a priori rayonnent le plus. Un choix plus simple pourrait de faire porter les pertes radiatives sur le mélange complet caractérisé par la fraction de mélange z . La loi pour l'enthalpie en fonction des pertes radiatives s'écrit alors :

$$\begin{aligned} h(z) &= h_O + (h_s - h_O) \frac{z}{z_{st}} & \text{pour } z < z_{st} \\ h(z) &= h_s + (h_C - h_s) \frac{z - z_{st}}{1 - z_{st}} & \text{pour } z > z_{st} \end{aligned} \quad (3.36)$$

L'enthalpie à la stœchiométrie h_s caractérise donc les pertes radiatives et peut être reliée à l'enthalpie transportée et la fraction de mélange :

$$h(z) = \alpha(z) + \beta(z)h_s \quad (3.37)$$

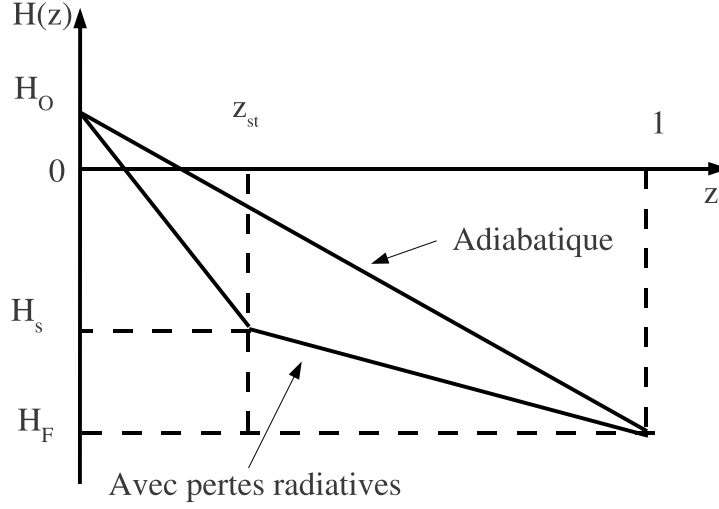


FIG. 3.4 – Prise en compte des pertes radiatives à travers l'enthalpie

où α et β sont des coefficients déduits de l'équation 3.36. La valeur de la température se déduit ainsi de l'équation 3.35 en remplaçant l'enthalpie transportée par l'enthalpie à la stœchiométrie h_s :

$$T(z, h_s) = T_0 + \frac{1}{C_p}(h_s(z) - h_0) \text{ avec } h_s(z) = \frac{h(z) - \alpha(z)}{\beta(z)} \quad (3.38)$$

Lorsque l'écoulement est turbulent, l'enthalpie à la stœchiométrie est déduite de l'enthalpie moyenne résolue par une équation de transport en prenant la moyenne de l'équation 3.37 :

$$\tilde{h} = \int_0^1 h(z)P(z)dz = \tilde{\alpha} + \tilde{\beta}h_s \quad (3.39)$$

La température moyenne s'écrit donc en fonction de l'enthalpie stœchiométrique selon :

$$\tilde{T} = \int_0^1 T(z, h_s)P(z)dz \quad (3.40)$$

3.4.2 Interaction entre la turbulence et le rayonnement

L'équation des transferts radiatifs a été écrite sans tenir compte de la turbulence. En effet, dans les écoulements turbulents, les fluctuations de concentrations et de température sont susceptibles d'affecter la propagation des rayons lumineux. A l'ETR doit donc être appliqué le processus de moyenne de la même manière qu'aux équations de transport pour les vitesses et les différents scalaires (ici, pour un gaz gris) :

$$\frac{\partial \bar{I}}{\partial s} = \bar{\kappa I_b} - \bar{\kappa I} \quad (3.41)$$

Cela a pour conséquence de faire apparaître deux corrélations : $\overline{\kappa I_b}$ et $\overline{\kappa I}$ dont la modélisation est mal maîtrisée. Si le parcours du rayon lumineux est grand devant l'échelle de turbulence (c'est-à-dire si le milieu est optiquement fin), le coefficient d'absorption et l'intensité lumineuse sont faiblement corrélés [77] :

$$\overline{\kappa I} = \overline{\kappa} \overline{I} + \overline{\kappa' I'} \sim \overline{\kappa} \overline{I} \quad (3.42)$$

Cette condition est globalement respectée sauf sur certaines parties du spectre et pour les flammes produisant peu de suies. En pratique, elle est toujours utilisée.

Cette condition est beaucoup moins bien respectée pour la corrélation liée au terme d'émission [77]. Cependant, dans le cas d'un mélange contenant des suies, le rayonnement de ces dernières domine. En décomposant le coefficient d'absorption selon l'équation 3.15, l'hypothèse de milieu optiquement fin peut être utilisée pour la partie concernant le gaz. Le coefficient d'absorption des suies (Eq. 3.26) fait tout de même apparaître une corrélation entre la fraction volumique de suies et la température qui reste à évaluer :

$$\overline{\kappa I_b} \sim \overline{\kappa} \overline{I_b} + C_s \frac{\sigma}{\pi} \overline{f_v T^5} \quad (3.43)$$

3.4.3 Interaction entre la turbulence et les suies

Dans les flammes turbulentes, les fluctuations de richesses sont susceptibles de modifier la formation des suies par rapport aux flammes laminares. Le processus de moyenne doit donc être appliqué aux équations de transport de la fraction massique de suies et du nombre de précurseurs (Eq. 3.27). Les flux turbulents scalaires sont fermés comme pour tous les scalaires selon le modèle de turbulence adopté. Le manque d'informations sur les corrélations entre les propriétés des suies amènent à négliger l'effet de la turbulence sur les termes de coagulation et de croissance [84, 115]. Ainsi, pour le modèle semi-empirique de Syed et al. [115] (Eq. 3.29), les termes sources moyens obtenus s'écrivent alors :

$$\begin{aligned} \overline{S_{\zeta_n}} &= \overline{\alpha} - \overline{\rho}^2 \overline{\beta} \tilde{\zeta}_n^2 \\ \overline{S_{\zeta_s}} &= \overline{\delta} + \overline{\rho} \overline{\gamma} \mathcal{N}_0^{1/3} \tilde{\zeta}_n^{1/3} \tilde{\zeta}_s^{2/3} \end{aligned} \quad (3.44)$$

Par contre, les grandeurs intervenant dans les termes de nucléation peuvent tous être écrits en fonction de la fraction de mélange. Par conséquent, les termes moyens peuvent être déterminés à l'aide d'un modèle statistique :

$$\overline{\alpha} = \frac{\overline{\delta}}{144} = \overline{\rho} \int \frac{\alpha(z)}{\rho(z)} \tilde{P}(z) dz \quad (3.45)$$

3.5 Modélisation du rayonnement et des suies dans l'incendie

Dans le cadre des incendies, le rayonnement émis par la flamme et les fumées est principalement affecté par la présence du dioxyde de carbone, de l'eau et des suies. D'une manière générale, les méthodes de résolution par flux sont les plus utilisées. En effet, elles donnent une information plus précise que les méthodes à zones et l'approximation $P-n$ qui est à proscrire dans les écoulements stratifiés rencontrés dans les incendies, et sont moins coûteuses que les méthodes statistiques. Les trois méthodes de flux sont équivalentes, les différences se situent dans la manière d'évaluer les propriétés radiatives du milieu et de les intégrer dans la résolution de l'ETR.

L'estimation des propriétés radiatives est plus précise à mesure que le spectre d'absorption du mélange est finement décrit. Ainsi, les méthodes à bandes sont les plus précises mais aussi les plus coûteuses. Quelques auteurs ont appliqué des modèles à bandes sur des configurations simples avec des résultats encourageants [73, 135]. Toutefois, les modèles globaux [36, 131], les modèles de compositions de gaz gris [16, 21, 91] ou les modèles de gaz gris [111, 123, 126] sont privilégiés pour la modélisation de l'incendie. Leur utilisation est justifiée par le fait que le rayonnement continu des suies est prépondérant par rapport au rayonnement des gaz ce qui tend à réduire l'erreur faite sur le traitement simplifié de la phase gazeuse.

Les modèles de suies les plus utilisés sont les modèles semi-empiriques [46, 66], afin de rester cohérents avec les modèles de combustion simplifiés utilisés. Les modèles à chimie détaillée sont toujours utilisés en accord avec un modèle de combustion à chimie détaillée et restent marginaux dans le cadre des simulations d'incendies.

Dans cette étude seront donc utilisés, la méthode de résolution des ordonnées discrètes (DOM), le modèle de rayonnement à larges bandes de Modak [76] ainsi que le modèle de suies semi-empirique de Syed et al. [115].

Chapitre 4

Extension d'un schéma incompressible pour les flammes turbulentes de diffusion à bas nombre de Froude

Toutes nos simulations ont été réalisées avec *Code_Saturne*, code de mécanique des fluides développé par EDF R&D au sein du département MFEE. Ce code à caractère généraliste permet de résoudre un grand nombre de type d'écoulements mais n'a jamais été utilisé pour les simulations d'incendies. Ici sont donc présentées les modèles physiques et de méthodes numériques déjà implémentés dans le code, ainsi que les adaptations nécessaires à la simulation des incendies. Enfin, une synthèse résume les modèles retenus pour nos simulations.

4.1 Présentation de *Code_Saturne*

La version de *Code_Saturne* utilisée est la version 1.3.3. Elle résout les équations de Navier-Stokes pour des écoulements incompressibles instationnaires sur tout type de maillage, structuré ou non, ainsi que les équations de tous scalaires. Une hypothèse de faible nombre de Mach est faite par défaut ; la masse volumique est donc calculée à la pression de référence. Un module compressible est disponible pour les écoulements supersoniques non réactifs.

Code_Saturne intègre des modélisations RANS et LES (limitée aux écoulements non réactifs) dont les modèles de turbulence $k - \varepsilon$, $k - \omega - SST$, $R_{ij} - \varepsilon$ *LRR* et *SSG* où les effets de la gravité sont pris en compte.

Code_Saturne intègre trois modèles de combustion pour les hydrocarbures gazeux : le modèle de flammelettes associé à une hypothèse de chimie infiniment rapide pour les

flammes de diffusion, le modèle Eddy-Break-Up pour les flammes de prémélange parfait et le modèle Libby-Williams-Poitiers pour les flammes de prémélange partiel où un temps chimique est considéré. *Code_Saturne* intègre également un module pour la combustion du charbon pulvérisé.

Code_Saturne intègre deux méthodes de résolution de l'équation des transferts radiatifs : la méthode des ordonnées discrètes et l'approche P-1. Les propriétés radiatives du mélange gazeux sont soit spécifiées par l'utilisateur à l'aide d'un coefficient d'absorption constant, soit calculées à l'aide du modèle de Modak [76].

4.1.1 Discrétisation spatiale

La méthode numérique utilisée dans *Code_Saturne* est de type volumes finis. Le domaine de calcul est divisé en volumes élémentaires hexaédriques ou tétraédriques. Les notations des grandeurs géométriques associées sont présentées sur la figure 4.1.

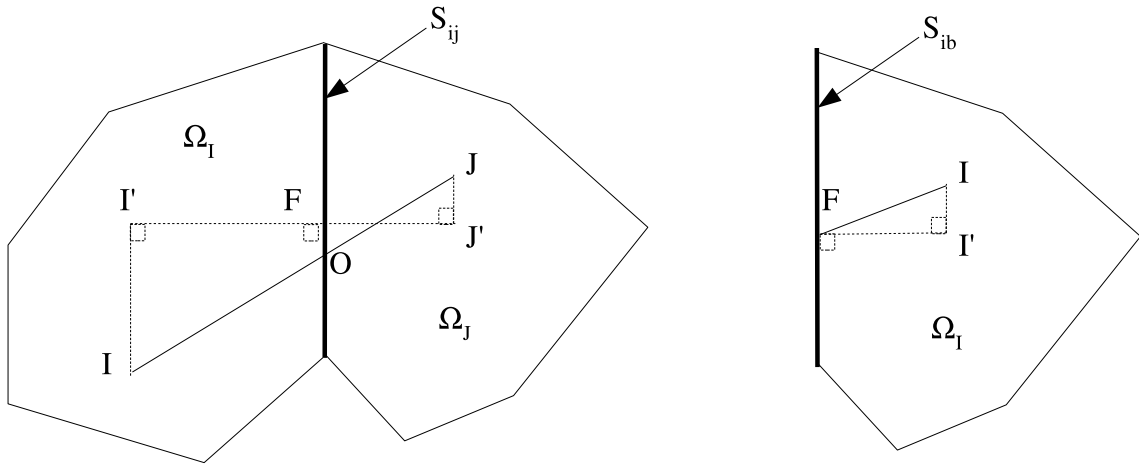


FIG. 4.1 – Définition des différentes entités géométriques pour les faces internes (gauche) et de bord (droite)

Code_Saturne utilise une formulation colocalisée, c'est-à-dire que toutes les variables sont résolues au centre des volumes élémentaires ce qui permet de ne considérer qu'un seul maillage contrairement aux formulations décalées où les variables scalaires et la pression sont résolues au centre des volumes et les vitesses sur leurs faces.

Les équations de transport écrites précédemment de manière locale et continue sont traitées sous leur forme intégrale sur chaque volume de contrôle Ω_I :

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega_I} \rho \phi d\Omega + \int_{\Omega_I} \nabla \cdot (\rho \underline{u} \phi) d\Omega = \int_{\Omega_I} \nabla \cdot (-J_\phi \nabla \phi) d\Omega + \int_{\Omega_I} S_\phi d\Omega \quad (4.1)$$

Les termes linéaires sont simplement approchés par une valeur moyenne sur le volume de contrôle :

$$\int_{\Omega_I} \rho \phi d\Omega = \rho_I \phi_I \Omega_I \quad \int_{\Omega_I} S_\phi d\Omega = S_{\phi I} \Omega_I \quad (4.2)$$

Les intégrales volumiques des termes de convection et diffusion sont transformées à l'aide du théorème de Green-Ostrogradsky en une intégrale surfacique des flux sur le bord $\partial\Omega_I$ de Ω_I de normale $\underline{n}$. Le terme de convection est alors calculé comme une somme de flux F_{ij} calculés aux faces des cellules purement internes et de flux F_{bik} calculés aux faces de bord du domaine Ω_I :

$$\int_{\Omega_I} \nabla \cdot (\rho \underline{u} \phi) d\Omega = \int_{\partial\Omega_I} \rho \underline{u} \cdot \underline{n} \phi dS = \sum_{j \in V(i)} (\rho \underline{u} \cdot \underline{n} S)_{ij} \phi_{f,ij} + \sum_{b \in V_b(i)} (\rho \underline{u} \cdot \underline{n} S)_{ib} \phi_b \quad (4.3)$$

$V(i)$ sont les cellules voisines de la cellule i et $V_b(i)$ les faces de bord de la cellule i , $(\rho \underline{u} \cdot \underline{n} S)_{ij}$ et $(\rho \underline{u} \cdot \underline{n} S)_{ib}$ les flux de masse, $\phi_{f,ij}$ et ϕ_b les valeurs de la variable, aux faces internes et de bord.

La valeur de la variable à la face interne dépend du schéma convectif choisi. Les deux schémas présents dans *Code_Saturne* sont le schéma décentré amont d'ordre 1 :

$$\begin{aligned} \phi_{f,ij} &= \phi_I \text{ si } (\rho \underline{u} \cdot \underline{n} S)_{ij} \geq 0 \\ \phi_{f,ij} &= \phi_J \text{ si } (\rho \underline{u} \cdot \underline{n} S)_{ij} < 0 \end{aligned} \quad (4.4)$$

et le schéma centré d'ordre 2 :

$$\phi_{f,ij} = \alpha_{ij} \phi_I + (1 - \alpha_{ij}) \phi_J + \frac{1}{2} [\nabla \phi_I + \nabla \phi_J] \cdot \underline{OF} \quad (4.5)$$

où α_{ij} est un coefficient de pondération géométrique $\alpha_{ij} = \frac{F_{J'}}{F_{I'}}$ et le dernier terme, un terme de reconstruction utilisé dans le cas de maillages non-orthogonaux.

Le terme de diffusion est calculé à l'aide d'un schéma centré :

$$\int_{\Omega_I} \nabla \cdot (-J_\phi \nabla \phi) d\Omega = \int_{\partial\Omega_I} -J_\phi \nabla \phi \cdot \underline{n} dS = \sum_{j \in V(i)} -J_{ij} \frac{\phi_{J'} - \phi_{I'}}{I' J'} S_{ij} + \sum_{b \in V_b(i)} -J_{ib} \frac{\phi_b - \phi_{I'}}{I' F} S_{ib} \quad (4.6)$$

4.1.2 Discrétisation temporelle

Les équations de transport écrites sont écrites sous une forme condensée où la dérivée temporelle a été réécrite en fonction de l'équation de continuité :

$$\rho \frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \underline{u} \phi) - \nabla \cdot (-J_\phi \nabla \phi) = \phi \nabla \cdot (\rho \underline{u}) - \phi \Gamma + S_\phi \quad (4.7)$$

Toutes les grandeurs intervenant dans cette équation sont discrétisées à l'aide d'un θ -schéma :

$$\Psi^{n+\theta_\Psi} = \theta_\Psi \Psi^{n+1} + (1 - \theta_\Psi) \Psi^n \quad (4.8)$$

En pratique, les schémas utilisés sont les suivants :

- les propriétés physiques φ (densité, viscosité, coefficient de diffusion) sont calculées explicitement à l'aide des variables résolues au pas de temps précédent ($\varphi^{n+1} = \varphi(\phi^n)$) :
- les flux de masses ($\rho \underline{u}$) sont explicités lors de la résolution des équations de Navier-Stokes et mis à jour pour le calcul des scalaires.
- les variables résolues ϕ (vitesses, scalaires) sont traitées de manière implicite dans leur équation de transport.
- les termes sources qui peuvent être linéarisés sont décomposés en une partie implicite $S_{\phi,i}$ et une partie explicite $S_{\phi,e}$, ce qui donne :

$$S_{\phi}^{n+1} = S_{\phi,e}(\phi^n, \varphi^n) + S_{\phi,i}(\phi^n, \varphi^n) \phi^{n+1} \quad (4.9)$$

Les équations de transport sont alors réécrites sous leur forme discrète en temps :

$$\begin{aligned} \frac{\rho}{\Delta t}(\phi^{n+1} - \phi^n) + \nabla \cdot (\rho \underline{u} \phi^{n+1}) - \nabla \cdot (-J_{\phi} \nabla \phi^{n+1}) - \phi^{n+1} \nabla \cdot (\rho \underline{u}) + \phi^{n+1} \Gamma \\ = S_{\phi,e}(\phi^n, \varphi^n) + S_{\phi,i}(\phi^n, \varphi^n) \phi^{n+1} \end{aligned} \quad (4.10)$$

4.1.3 Algorithmes de résolution

Chaque équation est résolue en considérant un incrément de variable $\delta\phi^{n+1}$ qui permet d'impliciter les termes de convection et diffusion même sur les maillages non orthogonaux :

$$\begin{aligned} \left[\frac{\rho}{\Delta t} + \nabla \cdot (\rho \underline{u}) - \Gamma - S_{\phi,i} \right] \delta\phi^{n+1} + \nabla \cdot [\rho \underline{u} \delta\phi^{n+1}] - \nabla \cdot [-J_{\phi} \nabla \delta\phi^{n+1}] = \\ - \nabla \cdot (\rho \underline{u} \phi^n) + \nabla \cdot (-J_{\phi} \nabla \phi^n) + [\nabla \cdot (\rho \underline{u}) - \Gamma] \phi^n \\ + S_{\phi,e} + S_{\phi,i} \phi^n \end{aligned} \quad (4.11)$$

$$\text{avec } \delta\phi^{n+1} = \phi^{n+1} - \phi^n$$

Cette résolution s'inscrit dans un algorithme général de résolution dont les principales étapes sont réalisées dans l'ordre suivant au cours d'un pas de temps :

- calcul des propriétés physiques ($\bar{\rho}, \mu, \mu_t, \dots$), les effets de la pression sur la densité sont négligés dans le cas où les écoulements sont à bas nombre de Mach. Dans le cas contraire, l'utilisation d'un module compressible est conseillé et n'est pas détaillé ici.
- résolution des équations de Navier-Stokes ($\bar{p}, \underline{\tilde{u}}$) par un algorithme SIMPLEC (Semi Implicit Method for Pressure-Linked Equation Corrected), les variations temporelles de densité dans l'équation de continuité sont négligées.
- résolution des équations pour les grandeurs turbulentes ($k, \widetilde{u_i'' u_j''}, \varepsilon$).
- résolution des équations pour les variables scalaires ($\tilde{Y}_i, \tilde{h}_t$).

4.1.4 Conditions limites standard

Dans *Code_Saturne*, les conditions limites sont écrites sous la forme générale :

$$\phi_b = A_b + B_b \phi_I \quad (4.12)$$

Les conditions disponibles sont :

- la condition de Dirichlet qui spécifie la valeur ϕ_{imp} de la variable :

$$\phi_b = \phi_{imp} \quad (4.13)$$

Elle est utilisée pour toutes les variables en entrée, les vitesses et les grandeurs turbulentes aux parois et toutes les grandeurs sur les frontières libres lorsque l'écoulement est entrant dans le domaine de calcul ($\phi_{imp} = 0$).

- la condition de Neumann qui spécifie le flux de variable à travers le bord $\frac{\partial \phi}{\partial n}$:

$$\phi_b = \frac{\partial \phi}{\partial n} I' F + \phi_I \quad (4.14)$$

Elle est utilisée pour toutes les variables sur les symétries ($\frac{\partial \phi}{\partial n} = 0$), les variables scalaires aux parois et toutes les variables sur les frontières libres lorsque l'écoulement est sortant ($\frac{\partial \phi}{\partial n} = 0$).

Pour plus de détails sur les méthodes numériques employées, on pourra se référer à la publication [2] ou à la documentation technique du code [101, 100].

4.2 Adaptation de *Code_Saturne* à la simulation de l'incendie

Code_Saturne a initialement été développé pour les écoulements thermohydrauliques rencontrés dans les centrales nucléaires, puis pour les écoulements réactifs (combustion, arc électrique) et les écoulements supersoniques non réactifs. Cet historique explique la construction du code, centré autour d'un noyau résolvant les équations de Navier-Stokes incompressibles et la turbulence, auquel ont été rajoutés les modules de physiques particulières.

Code_Saturne n'a jamais été utilisé pour les écoulements réactifs dominés par la gravité rencontrés dans l'incendie. Il est donc indispensable d'adapter certaines parties du code, notamment le traitement des conditions limites sur les frontières libres et le traitement de la dilatation liée à une masse volumique variable.

4.2.1 Conditions limites libres

Les frontières libres sont les frontières du domaine où les conditions limites sur les vitesses sont inconnues. Dans le cadre des incendies, ce type de frontière se rencontre fréquemment par exemple pour des panaches ou des flammes dominés par la gravité dans un milieu totalement ouvert (Fig. 4.2.a) ou un feu de compartiment comportant une ouverture (Fig. 4.2.b).

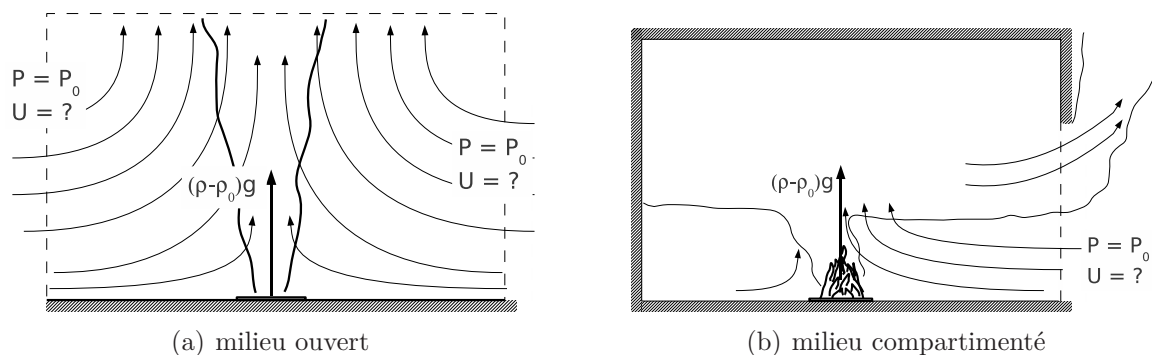


FIG. 4.2 – Entraînement d'air (—>) et conditions limites libres (- -)

L'entraînement d'air créé par le moteur qu'est le terme de flottabilité est alors couplé à la valeur de la vitesse aux frontières libres. Celle-ci ne peut être imposée sauf loin de la source de quantité de mouvement où elle peut être considérée comme nulle si le milieu est au repos. Ce problème ne se pose plus si le milieu est dominé par un vent traversier imposé par des conditions météorologiques ou une ventilation mécanique.

Dans *Code_Saturne*, les conditions limites par défaut sur les frontières libres imposent une vitesse nulle si l'écoulement est entrant. Cette condition n'est pas acceptable ou demande d'adopter un domaine de calcul très grand avec un coût de calcul plus important.

Une condition de Neumann homogène pourrait être adoptée (Eq. 4.15) assurant que la vitesse n'est pas modifiée au passage de la frontière libre.

$$\frac{\partial \underline{u}}{\partial n} = 0 \quad (4.15)$$

Cependant, dans cette étude, l'expérience a montré qu'une condition de Neumann homogène seule pouvait occasionner des divergences du calcul. Une condition de type mixte [34] est alors adoptée (Eq. 4.16). Elle permet de respecter une condition de Neumann homogène tout en permettant d'imposer une condition de Dirichlet.

$$\frac{\partial \underline{u}}{\partial t} + \underline{u} \frac{\partial \underline{u}}{\partial n} = 0 \quad \sim \quad \frac{\partial \underline{u}}{\partial n} = 0 \quad \text{et} \quad \underline{u}_F^{n+1} = \underline{u}_F^n \quad (4.16)$$

La valeur de la vitesse à la face de bord est alors simplement interpolée entre la cellule de bord et un point situé à une distance de la frontière L_∞ suffisamment grande pour que la vitesse puisse être considérée nulle (typiquement, une longueur de domaine) :

$$\underline{u}_F^{n+1} = \alpha \underline{u}_I^n + (1 - \alpha) \underline{u}_\infty \quad \text{avec} \quad \alpha = \frac{L_\infty}{I'F + L_\infty} \quad \text{et} \quad \underline{u}_\infty = 0 \quad (4.17)$$

La pression totale est imposée à une pression hydrostatique ce qui donne une pression mécanique nulle au bord.

$$P_F = P_0 + \rho_0 g \underline{x} \quad p = 0 \quad (4.18)$$

Les frontières étant suffisamment loin de la source, les scalaires turbulents sont imposés à des valeurs laminares et les scalaires décrivant la composition et l'énergie du milieu sont imposés pour de l'air à la température de référence.

4.2.2 Dilatation

Les écoulements rencontrés dans les incendies sont par nature instationnaires. La masse volumique varie en raison de la modification locale de la composition du mélange. Traiter les équations de Navier-Stokes sans tenir compte de cette variation temporelle n'est pas envisageable si l'on espère obtenir une bonne description des phénomènes transitoires observés (battements de la flamme, bouffées de gaz chauds, entraînement périodique). Il est donc nécessaire de revoir le traitement de l'équation de continuité en tenant compte de la dérivée temporelle de la densité afin de décrire la dilatation (ou contraction) de l'écoulement.

L'algorithme SIMPLEC utilisé dans *Code_Saturne* est une méthode à pas fractionnaires où le système couplé vitesse-pression est résolu en deux étapes.

L'étape de prédiction consiste en la résolution de l'équation de quantité de mouvement en considérant le champ de pression explicite (Eq. 4.19). La vitesse obtenue ne respecte pas l'équation de continuité. Elle est dite prédite et notée $\underline{u}^*$.

$$\frac{\rho^n(\underline{u}^* - \underline{u}^n)}{\Delta t} + \nabla \cdot [(\rho \underline{u})^n \otimes \underline{u}^{n+1}] = -\nabla p^n + \nabla \cdot \underline{\tau}^{n+1} + (\rho^n - \rho_0)g \quad (4.19)$$

L'étape de correction corrige la pression en imposant la contrainte de l'équation de continuité. A la quantité de mouvement prédite est ajouté l'effet du gradient de pression de l'incrément de pression $\delta p^{n+1} = p^{n+1} - p^n$. Associée à l'équation de continuité, le système obtenu :

$$\begin{cases} \frac{(\rho \underline{u})^{n+1} - (\rho \underline{u})^*}{\Delta t} = -\nabla \delta p^{n+1} \\ \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \underline{u})^{n+1} = \Gamma \end{cases} \quad (4.20)$$

permet d'obtenir une équation sur l'incrément de pression :

$$\nabla \cdot (-\Delta t \nabla \delta p^{n+1}) = \Gamma - \frac{\partial \rho}{\partial t} - \nabla \cdot (\rho \underline{u})^* \quad (4.21)$$

La dérivée temporelle de la densité est alors négligée. Pour tenir compte de la dilatation, deux méthodes sont envisagées :

- une méthode conservative traitant le terme de dilatation par différences finies ce qui donne pour l'équation de correction :

$$\nabla \cdot (-\Delta t \nabla \delta p^{n+1}) = \Gamma - \frac{\rho^{n+1} - \rho^n}{\Delta t} - \nabla \cdot (\rho \underline{u})^* \quad (4.22)$$

- une méthode non-conservative traitant le terme de dilatation par une dérivation de la loi d'état. Pour cela, le système 4.20 est écrit sous sa forme non-conservative :

$$\begin{cases} \rho^{n+1} \frac{\underline{u}^{n+1} - \underline{u}^*}{\Delta t} = -\nabla \delta p^{n+1} \\ \frac{D\rho}{Dt} + \rho^{n+1} \nabla \cdot (\underline{u})^{n+1} = \Gamma \end{cases} \quad (4.23)$$

donnant une nouvelle équation pour la pression :

$$\nabla \cdot \left(-\frac{\Delta t}{\rho^{n+1}} \nabla \delta p^{n+1} \right) = \frac{1}{\rho^{n+1}} \Gamma - \frac{1}{\rho^{n+1}} \frac{D\rho}{Dt} - \frac{1}{\rho^{n+1}} \nabla \cdot (\underline{u})^* \quad (4.24)$$

La dérivée particulaire de la densité est réécrite en fonction des variables résolues ϕ dont elle dépend, la valeur des dérivées particulières de ces variables étant tirée de leur équation de transport non-conservative :

$$\frac{1}{\rho} \frac{D\rho}{Dt} = \frac{1}{\rho} \sum_{i=1}^N \frac{\partial \rho}{\partial \phi_i} \frac{D\phi_i}{Dt} = \frac{1}{\rho^2} \sum_{i=1}^N \frac{\partial \rho}{\partial \phi_i} [\nabla \cdot (-J_{\phi_i}) + S_{\phi_i}] \quad (4.25)$$

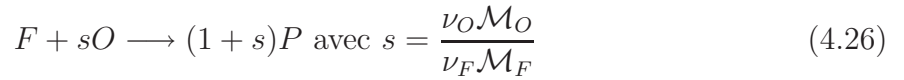
Pour ne pas compter plusieurs fois l'effet d'un phénomène sur la dilatation, on veillera à choisir des variables indépendantes. Les dérivées de la masse volumique par rapport à ces variables dépendent de la loi d'état utilisée. Les détails de leur calcul pour les lois d'état utilisées par la suite sont présentées en annexe E.

Ces deux méthodes sont évaluées dans cette étude sur plusieurs configurations pertinentes pour les incendies.

4.3 Synthèse du modèle

Pour cette première approche de la modélisation des incendies avec *Code_Saturne*, il a été choisi d'utiliser les modèles les plus simples. L'approche RANS est jugée suffisante pour appréhender les principaux effets des différents phénomènes physiques présents dans un incendie pour un coût de calcul modéré. Le modèle de turbulence adopté est le modèle $k - \varepsilon$ en tenant compte de l'effet de la gravité. Les différentes fermetures évoquées pour ce terme sont étudiées par la suite.

Le modèle de combustion turbulente retenu est un modèle de flammelettes associé à une hypothèse de chimie infiniment rapide. La réaction chimique est traitée à l'aide d'une seule étape irréversible :



Les fractions massiques, température et densité moyennes sont déduites des lois d'état linéaires par morceaux :

$$\begin{array}{ll} z < z_{st} \text{ (côté pauvre)} & z > z_{st} \text{ (côté riche)} \\ \left\{ \begin{array}{l} Y_F = 0 \\ Y_O = 1 - \frac{z}{z_{st}} \\ Y_P = 1 - Y_F - Y_O \end{array} \right. & \left\{ \begin{array}{l} Y_F = \frac{z - z_{st}}{1 - z_{st}} \\ Y_O = 0 \\ Y_P = 1 - Y_F - Y_O \end{array} \right. \end{array} \quad (4.27)$$

La pdf utilisée est constituée de deux pics de Dirac et d'un rectangle dont les amplitudes et les positions sont déterminées à l'aide de la fraction de mélange et de sa variance afin de limiter le coût de calcul lié au calcul des valeurs moyennes :

$$\tilde{P}(z) = D_0 \delta(z - z_0) + D_1 \delta(z - z_1) + h [\mathcal{H}(z - z_2) - \mathcal{H}(z - z_3)] \quad (4.28)$$

Les valeurs moyennes sont obtenues par intégration des lois d'états et de la pdf :

$$\begin{aligned} \tilde{Y}_i &= \int_0^1 Y_i(z) \tilde{P}(z) dz & \frac{1}{\tilde{\rho}} &= \int_0^1 \frac{\tilde{P}(z)}{\rho(z, h_s)} dz \\ \tilde{T} &= \int_0^1 T(z, h_s) \tilde{P}(z) dz & \tilde{h} &= \int_0^1 h(z) \tilde{P}(z) dz = \tilde{\alpha} + \tilde{\beta} h_s \end{aligned} \quad (4.29)$$

Le rayonnement est traité à l'aide du modèle de rayonnement à larges bandes de Modak [76] ainsi que le modèle de suies semi-empirique de Syed et al. [115]. Aucun modèle de suies n'étant présent dans la version standard de *Code_Saturne*, ce dernier a dû être implémenté. La méthode de résolution de l'équation des transferts radiatifs est la méthode des ordonnées discrètes (DOM).

Dans le cas où les pertes thermiques sont considérées dans les parois, l'équation de la chaleur monodimensionnelle est résolue dans la direction normale à la paroi dont les

propriétés sont considérées uniformes.

A l'exception de l'équation pour les transferts radiatifs, les équations qui régissent l'écoulement peuvent être écrites sous la forme :

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{\phi}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\underline{u}} \phi) = \nabla \cdot (-J_\phi) + S_\phi \quad (4.30)$$

où ϕ est la variable transportée, $-J_\phi$ son flux de diffusion et S_ϕ son terme source donnés dans le tableau 4.1.

ϕ	$-J_\phi$	S_ϕ
Masse 1	0	0
Vitesses $\tilde{\underline{u}}$	$-p\underline{\underline{I}} + \mu_{tot} (\nabla \tilde{\underline{u}} + {}^t \nabla \tilde{\underline{u}}) - \frac{2}{3} \mu_{tot} \nabla \tilde{\underline{u}} \underline{\underline{I}}$	$\bar{\rho} \underline{g}$
Energie cinétique turbulente k	$\mu_{tot} \nabla k$	$\mathcal{P} + \mathcal{G} - \bar{\rho} \varepsilon$
dissipation de k ε	$\mu_{tot} \nabla \varepsilon$	$\frac{\varepsilon}{k} [C_{\varepsilon 1} \mathcal{P} + (1 - C_{\varepsilon 3}) \mathcal{G}] - \bar{\rho} C_{\varepsilon 2} \varepsilon$
fraction de mélange $\tilde{z}$	$\left(\frac{\mu}{Sc} + \frac{\mu_t}{\sigma_t} \right) \nabla \tilde{z}$	0
variance de la fraction de mélange $\tilde{z}''^2$	$\left(\frac{\mu}{Sc} + \frac{\mu_t}{\sigma_t} \right) \nabla \tilde{z}''^2$	$2 \frac{\mu_t}{\sigma_t} \nabla \tilde{z} \nabla \tilde{z} - \frac{\bar{\rho}}{R_z} \frac{\varepsilon}{k} \tilde{z}''^2$
enthalpie $\tilde{h}$	$\left(\frac{\mu}{Pr} + \frac{\mu_t}{\sigma_t} \right) \nabla \tilde{h}$	$-\nabla \cdot \underline{q}_r$
densité de suies $\tilde{\zeta}_n$	$\left(\frac{\mu}{Sc} + \frac{\mu_t}{\sigma_t} \right) \nabla \tilde{\zeta}_n$	$\bar{\alpha} - \bar{\rho}^2 \bar{\beta} \tilde{\zeta}_n^2$
fraction volumique de suies $\tilde{\zeta}_s$	$\left(\frac{\mu}{Sc} + \frac{\mu_t}{\sigma_t} \right) \nabla \tilde{\zeta}_s$	$\bar{\delta} + \mathcal{N}_0^{1/3} \bar{\rho} \tilde{\zeta}_n^{1/3} \tilde{\zeta}_s^{2/3} - \bar{\rho} \varsigma \mathcal{N}_0^{1/3} \tilde{\zeta}_n^{1/3} \tilde{\zeta}_s^{2/3} \tilde{\omega}_{ox}$
	$\mu_{tot} = \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_t}$ $\mu_t = C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon}$	$\mathcal{P} = -\bar{\rho} \underline{\underline{R}} \nabla \tilde{\underline{u}}$ $\mathcal{G} = -\frac{1}{\bar{\rho}} \frac{\mu_t}{\sigma_t} \nabla \bar{\rho} \cdot \underline{g}$

TAB. 4.1 – Equations de transport résolues

Chapitre 5

Application aux panaches en milieu libre

Les flammes de convection naturelle rencontrées dans les incendies sont décrites par trois zones : une zone de panache, une zone de flamme intermittente et une zone de flamme persistante.

La zone de panache d'une flamme d'incendie est généralement décrite comme une colonne verticale ascendante de produits de combustion complète chauds. Cette zone non-réactive domine l'écoulement loin de la source de combustion, en particulier si la source est petite. Le panache est induit par des gradients de densité créés par les différences de température et de masse molaire. Cette zone, éloignée de la source est généralement turbulente, la transition depuis le régime laminaire ayant eu le temps de se produire. Ce comportement se retrouve dans les panaches thermiques où l'accélération du fluide est due à la différence de température entre l'air frais ambiant et l'air chaud du panache.

Les deux dernières zones sont également soumises à l'accélération des gaz chauds sous l'effet des forces de flottabilité. La colonne de gaz ascendants crée alors un écoulement radial centripète qui amène du fluide léger au milieu de fluide lourd. Le désalignement des centres de gravité des poches de densité crée un mouvement de rotation à l'origine des structures tourbillonnaires. Elles sont identiques à celles rencontrées dans les panaches d'hélium, mais seule la différence de masse molaire entre l'hélium et l'air ambiant est responsable de l'accélération du fluide.

Le champ lointain d'un panache thermique turbulent a été intensivement étudié et des lois de similitude des profils de température et de la vitesse ont été établies [45, 98, 113]. La compréhension de la dynamique du champ proche incluant les instabilités de l'écoulement ainsi que la transition d'un écoulement laminaire vers un écoulement turbulent est également un point fondamental dans le développement d'un incendie [98]. En effet ces instabilités sont responsables de l'entraînement d'air vers le foyer.

L'étude de ces deux types de panaches (air chaud et hélium) permet d'étudier les écoulements dominés par la gravité en dehors d'un cadre réactif. Ceci permet notamment d'étudier le comportement du modèle sur la prédiction de l'aéraulique et de la turbulence et en particulier, les différentes fermetures proposées pour le terme de gravité dans l'équation

pour la dissipation (voir p. 38).

Trois panaches non-réactifs sont étudiés :

- le panache de George et al. [38] : cette étude concerne le champ lointain d'un panache thermique généré par une injection d'air chaud à travers une source circulaire dans l'air ambiant. George et al. ont fourni un ensemble complet de mesures de la vitesse, de la température et des grandeurs turbulentes.

- le panache de Yokoi [134] : cette étude concerne le champ lointain d'un panache thermique issu d'une flamme de diffusion turbulente d'alcool. Bien que la source soit réactive, l'intérêt est porté sur le panache, non-réactif, où la combustion de l'alcool est finie. L'auteur a fourni des corrélations concernant la vitesse et la température. A la différence du panache de George et al. cette configuration présente des conditions en termes de nombre de Froude plus représentatives d'un incendie.

- le panache de O'Hern et al. [86] : cette étude concerne le champ proche d'un panache isotherme généré par l'injection d'hélium à travers une source circulaire à grande échelle. O'Hern et al. ont fourni un ensemble complet de mesures concernant la vitesse, la température et les grandeurs turbulentes. Cette expérience permet d'avoir une représentation réaliste de la génération de la turbulence par les forces de flottabilité en évitant les complexités liées à la combustion et au rayonnement. L'intérêt de considérer l'hélium réside dans le fait que le rapport de densité air/hélium est de 6 ce qui représente bien le rapport de densité entre l'air ambiant et les produits de combustion rencontrés dans les incendies.

5.1 Panache thermique stationnaire

Dans cette étude, l'expérience de George et al. [38] est simulée. Elle concerne le champ lointain d'un panache thermique stationnaire créé par une source circulaire, contrôlé par les forces de flottabilité. Les résultats numériques obtenus sont comparés avec les corrélations de Shabbir et George [107]. Chen et Rodi [20] ont considéré que le travail de George et al. comme le plus consistant des données expérimentales examinées. La synthèse réalisée par Heskestad [45], discutant la variété des valeurs maximales mesurées et les taux de propagation dans les expériences de panaches axisymétriques a également montré que les mesures des expériences d'Heskestad [43] étaient en bon accord avec les mesures de George et al. Pour le taux de propagation du panache, Heskestad [45] observe que les expériences de George et al. et Shabbir et George ont été considérées comme les plus fiables.

Nous avons examiné les approches SGDh et GGDh utilisées pour modéliser le terme de production de la turbulence lié aux effets gravitationnels G . Nous avons également étudié l'effet de la constante $C_{\varepsilon 3}$ intervenant dans l'équation de la dissipation de l'énergie cinétique turbulente car la valeur de cette constante est très controversée.

5.1.1 Description du cas

L'air chaud est injecté par un orifice circulaire dans l'air ambiant qui est au repos. La température de la source du panache est de 573.15 K et celle de l'air ambiant est de 302.15 K. Le diamètre D de la source est 0.0635 m. La vitesse d'injection de l'air chaud est de 0.67 m/s calculée à partir du flux de chaleur mesuré. L'intensité de la turbulence est de 0.5 %.

George et al. présentent des mesures expérimentales des profils moyens et fluctuants de la température et la vitesse axiale dans la région autosimilaire à $z/D = 11.81, 27.56$ et 43.31 au-dessus de la source. Ces conditions correspondent à un nombre de Reynolds de 870 et un nombre de Froude densimétrique de 1.23.

Comme l'écoulement évolue, le panache atteint un état dit autosimilaire où l'analyse adimensionnelle est applicable, c'est-à-dire que la vitesse axiale moyenne et la température peuvent être normalisées et représentées par un seul profil. Il est communément admis que ces profils ont une forme gaussienne. Dans ce travail nous utilisons les profils obtenus par Shabbir et George [107] :

$$\begin{aligned} wF_0^{-1/3}z^{1/3} &= 3.4 e^{-58\eta^2} \\ g\beta\Delta TF_0^{-2/3}z^{5/3} &= 9.4 e^{-68\eta^2} \end{aligned} \quad (5.1)$$

avec w la vitesse axiale, $F_0 = 10^6 \text{ cm}^4/\text{s}^3$ la flottabilité créée par la source, z la distance verticale, $\eta = r/z$ la variable de similitude (r la distance radiale à partir du centre du panache), g la gravité, $\beta = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial T}$ le coefficient d'expansion thermique et ΔT la différence entre la température moyenne locale et la température ambiante. Les composantes du tenseurs de Reynolds sont données par les profils :

$$\begin{aligned} \widetilde{w''w''}F_0^{-2/3}z^{2/3} &= \frac{1.1 + 200\eta^2}{(1 + 38\eta^2)^4} \\ \widetilde{u''u''}F_0^{-2/3}z^{2/3} &= \frac{0.65 + 67.35\eta^2 - 227.26\eta^4}{(1 + 30\eta^2)^4} \\ \widetilde{u''w''}F_0^{-2/3}z^{2/3} &= \frac{6.5 + 104.23\eta^3}{(1 + 24\eta^2)^3} \end{aligned} \quad (5.2)$$

u'' et w'' sont les fluctuations de vitesse radiale et axiale.

Les calculs sont effectués sur une configuration axisymétrique. Les conditions limites utilisées sont présentées sur la figure 5.1. Trois maillages structurés rectilignes non uniformes d'une dimension de 1 m sur 3 m sont utilisés. Les maillages sont réguliers au-dessus de la source c'est-à-dire pour $r < r_0$ et $z < 2r_0$ où r_0 est le rayon de la source et sont relâchés dans les deux directions radiale et axiale. Le tableau 5.1 présente le nombre de mailles global utilisé ainsi que le nombre de mailles et la taille de maille dans la zone régulière.

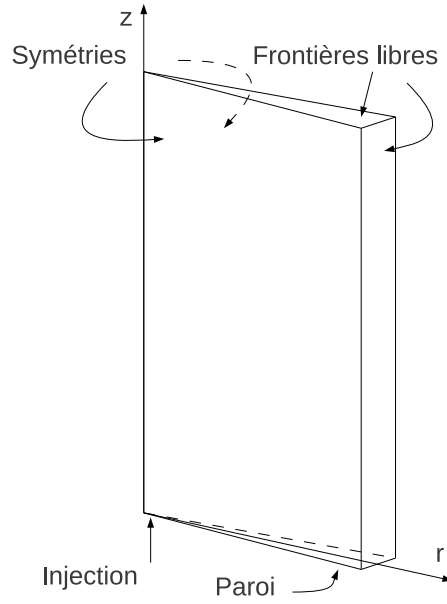


FIG. 5.1 – Conditions limites utilisés pour l'expérience de George et al.

Maillages	Nombre de mailles global	Nombre de mailles pour $r < r_0$ et $z < 2r_0$	Taille de maille $\Delta r = \Delta z$
M1	$20 \times 50 = 1000$	5×10	3.75 cm
M2	$40 \times 100 = 4000$	10×20	1.875 cm
M3	$80 \times 200 = 16000$	20×40	0.9375 cm
M4	$160 \times 400 = 64000$	40×160	0.469 cm

TAB. 5.1 – Discrétisation pour l'expérience de George et al.

La densité est calculée à l'aide de la loi des gaz parfaits, la température étant déduite de l'enthalpie qui est transportée :

$$\rho = \frac{P_0 \mathcal{M}_{air}}{RT} \text{ avec } T = \frac{h}{Cp_{air}} + T_0 \quad (5.3)$$

Les autres conditions de calcul sont rassemblées dans le tableau 5.2.

Conditions initiales	$P_0 = 101325 \text{ Pa}$	$k_0 = 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}^2$
	$T_0 = 302.15 \text{ K}$	$\varepsilon_0 = 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}^3$
Conditions d'injection	$r_0 = 0.03175 \text{ m}$	$I = 0.5 \%$
	$w = 0.67 \text{ m/s}$	$T = 573.15 \text{ K}$
Propriétés physiques	$\mu_{air} = 4.25 \cdot 10^{-5} \text{ kg/m.s}$ $C_{p_{air}} = 1219 \text{ J/kg.K}$	

TAB. 5.2 – Conditions de calcul pour l'expérience de George et al.

5.1.2 Modélisation du terme de flottabilité G

On rappelle l'équation pour l'énergie cinétique turbulente :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}k) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\tilde{u}_j k) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + P + G - \bar{\rho}\varepsilon \quad (5.4)$$

et l'équation pour la dissipation de l'énergie cinétique turbulente :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\tilde{u}_j \varepsilon) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{k} P + C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{k} (1 - C_{\varepsilon 3}) G - \bar{\rho} C_{\varepsilon 2} \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (5.5)$$

ainsi que les formes SGDH et GGDH du terme de flottabilité G :

$$\begin{aligned} G_{SGDH} &= -\frac{1}{\bar{\rho}^2} \frac{C_\mu}{\sigma_t} \frac{k^2}{\varepsilon} \frac{\partial \bar{\rho}}{\partial x_i} \left(\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial x_i} + \rho_0 g_i \right) \\ G_{GGDH} &= -\frac{3}{2\bar{\rho}} \frac{C_\mu}{\sigma_t} \frac{k}{\varepsilon} \widetilde{u_i'' u_k''} \frac{\partial \bar{\rho}}{\partial x_k} \left(\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial x_i} + \rho_0 g_i \right) \end{aligned} \quad (5.6)$$

avec $C_{\varepsilon 3} = 0.8$ et $\sigma_t = 0.85$.

La principale différence entre les deux modèles est la prise en compte par l'approche GGDH de la variation transverse de la densité, alors que le modèle SGDH ne considère que le gradient de densité longitudinale pour un panache vertical. Van Maele et Merci [68] ont étudié l'effet du gradient de la pression ainsi que l'approximation de Boussinesq ($\rho \sim \rho_\infty$) sur les résultats en utilisant les deux modèles SGDH et GGDH dans la configuration de George et al.. Ils ont montré que le gradient de pression peut être négligé. Cette simplification est raisonnable du fait que la vitesse du panache est trop faible pour créer des gradients de pression significatifs. En supposant que la densité moyenne est la même que la densité de référence, l'effet est négligeable sur les résultats obtenus en utilisant SGDH contrairement au GGDH [68]. Avec l'approximation de Boussinesq, le terme source de flottabilité devient faible en particulier dans les régions où la densité de l'écoulement diffère considérablement de la densité de référence. Cela signifie donc que l'énergie cinétique turbulente et la viscosité turbulente deviennent également très faibles.

En conséquence, la vitesse axiale du panache reste élevée en raison d'un faible mélange et d'une faible contrainte de cisaillement turbulent, ce qui réduit l'étalement du panache. L'effet de l'approximation de Boussinesq est significatif dans le champ proche de la source du panache, mais négligeable dans le champ lointain [68]. Ces résultats suggèrent donc que l'approximation de Boussinesq peut être utilisée pour des écoulements où les différences de densité sont faibles. Toutefois, si la modélisation CFD s'étend du champ lointain à la source de la flottabilité comme dans les incendies, l'approximation de Boussinesq n'est pas recommandée [68].

L'effet de l'hypothèse de Boussinesq a été testé pour les deux expressions SGDH et GGDH (Fig. 5.2) avec le maillage M3. La figure 5.2 montre la distribution radiale de la vitesse axiale ainsi que celle de la température du panache à différentes hauteurs de l'écoulement. Les résultats obtenus sont en accord avec les conclusions de Van Maele et Merci [68] à savoir que le gradient de pression peut être négligé. Par conséquent, les expressions du G , en SGDH et GGDH utilisées dans la suite de cette étude sont :

$$\begin{aligned} G_{SGDH} &= -\frac{1}{\rho^2} \frac{C_\mu}{\sigma_t} \frac{k^2}{\varepsilon} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} \rho_0 g_i \\ G_{GGDH} &= -\frac{3}{2\bar{\rho}} \frac{C_\mu}{\sigma_t} \frac{k}{\varepsilon} \widetilde{u_i'' u_k''} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_k} \rho_0 g_i \end{aligned} \quad (5.7)$$

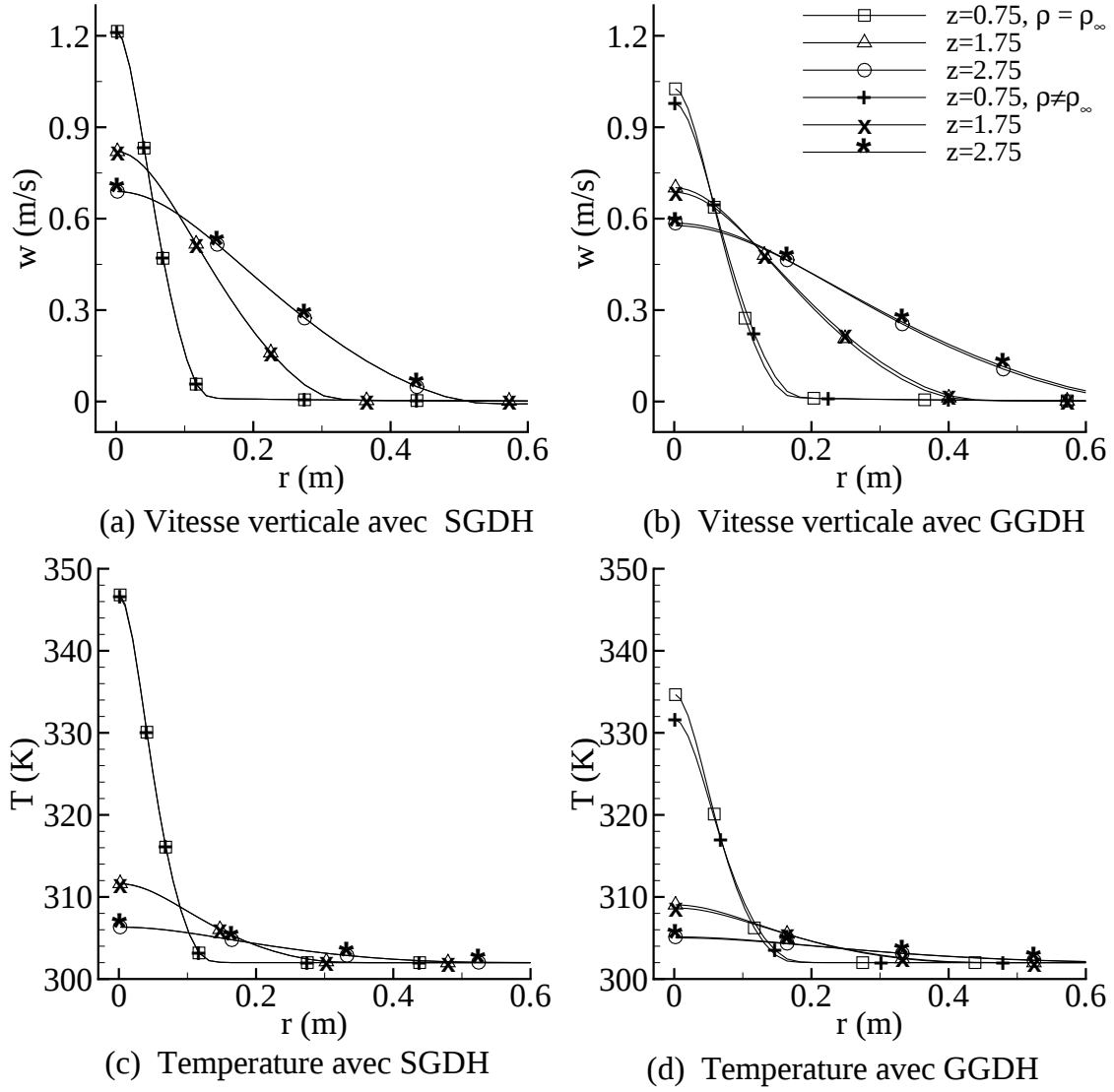


FIG. 5.2 – Effet de l'approximation de Boussinesq pour SGD et GGD
à $z = 0.75, 1.75$ et 2.75 m

5.1.3 Discussions

Les corrélations obtenues expérimentalement ne sont valables que dans la région auto-similaire du panache. Sur la figure 5.3, les profils normalisés sont présentés pour la vitesse moyenne axiale et le terme de flottabilité pour les trois hauteurs. Pour $z = 1.75$ et 2.75 m les profils radiaux de la vitesse ainsi que de la flottabilité coïncident ce qui signifie que le panache a atteint l'état autosimilaire. On considère alors la position $z = 1.75$ m pour discuter les résultats.

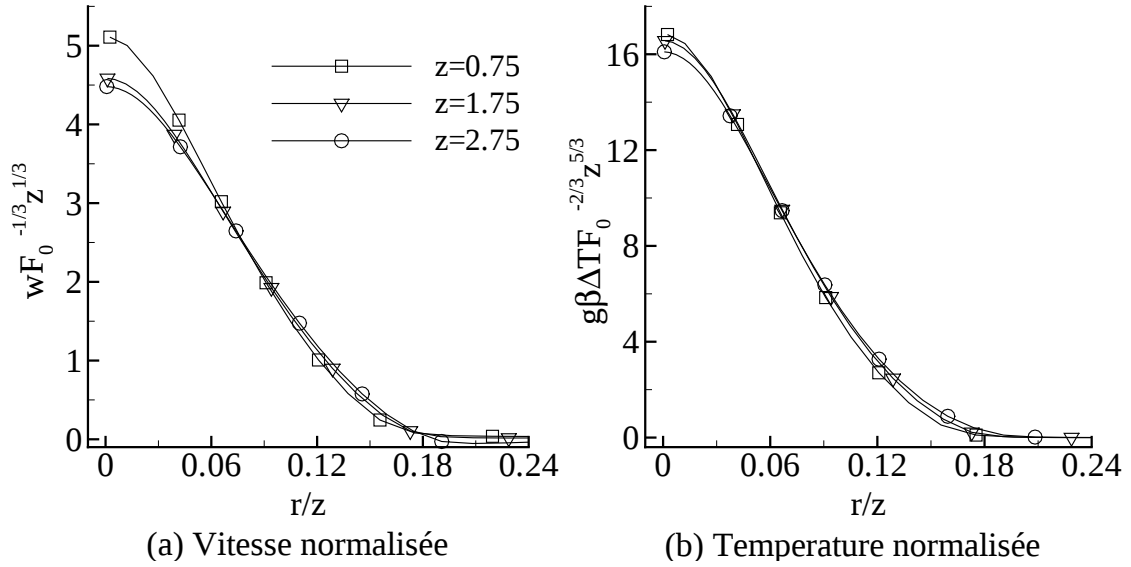


FIG. 5.3 – Profils de vitesse axiale et température moyennes normalisées à $z = 0.75, 1.75$ et 2.75 m

Sensibilité au maillage

Afin d'analyser la dépendance des résultats au maillage, des simulations ont été réalisées avec quatre maillages (Tab. 5.3). La figure 5.4 présente la distribution radiale de la vitesse axiale et de la flottabilité normalisées à $z = 1.75$ m. Les résultats montrent une dépendance très faible au maillage.

La sensibilité au maillage a également été analysée à partir des valeurs axiales maximales de la vitesse et du terme de flottabilité normalisés et des paramètres $l_{w/2}$, $l_{\Delta T/2}$ (Tab. 5.3). Ces deux derniers paramètres représentent la demi-largeur normalisée du panache, définie par la position où la valeur de la vitesse et du terme de flottabilité normalisés vaut la moitié de sa valeur axiale. Les grandeurs $l_{w/2}$ et $l_{\Delta T/2}$ sont capitales car elles permettent de caractériser l'étalement du panache. Les différences entre les résultats des quatre maillages sont négligeables. Au contraire les coûts de calcul sont considérablement affectés par le

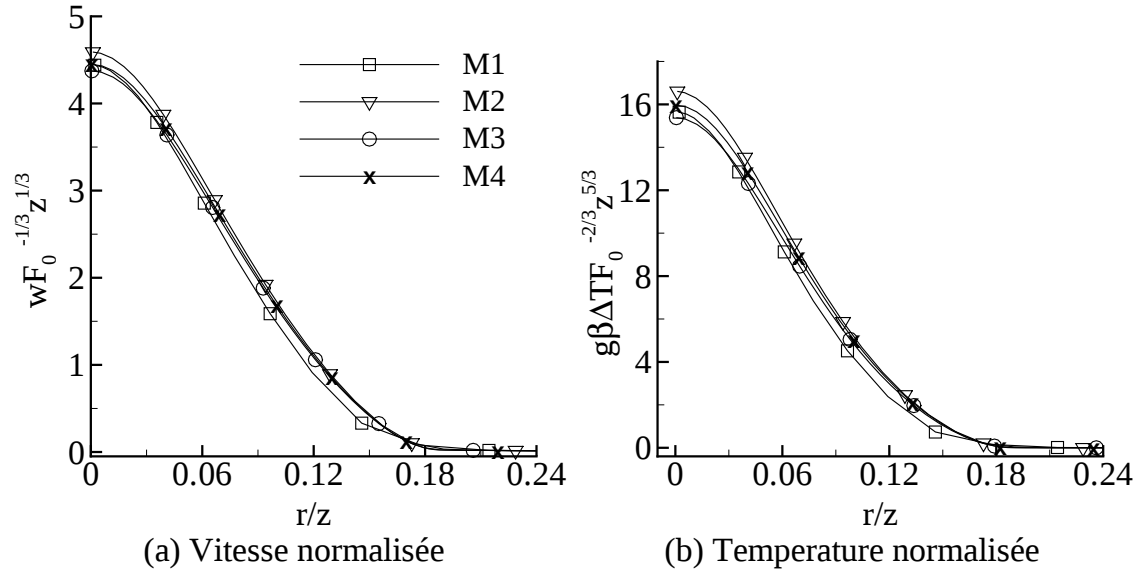


FIG. 5.4 – Distribution moyenne radiale de la vitesse axiale et de la température à $z = 1.75$ m pour les quatre maillages

nombre de mailles, variant de 3 min pour le maillage le plus grossier à 40 h pour le plus fin. On considérera donc par la suite le maillage M3.

z (m)	Maillage (Δr)	$(wF_0^{-1/3} z^{1/3})_c$	$l_{w/2}$	$(g\beta\Delta TF_0^{-2/3} z^{5/3})_c$	$l_{\Delta T/2}$	Temps CPU
1.75	M1 (3.75 cm)	4.29	0.085	13.84	0.076	3 min
	M2 (1.875 cm)	4.36	0.092	14.1	0.083	30 min
	M3 (0.9375 cm)	4.14	0.094	12.85	0.085	3 h
	M4 (0.469 cm)	4.19	0.095	13.1	0.085	40 h

TAB. 5.3 – Sensibilité au maillage : valeurs maximales sur l'axe, ouverture du panache et temps de calcul

Influence du terme de gravité : SGDH vs GGDH

La figure 5.5 montre une comparaison entre les distributions radiales de la vitesse axiale et de la flottabilité normalisées obtenues avec les formulations SGDH et GGDH et les résultats expérimentaux de Shabbir et George [107]. Le modèle SGDH surestime

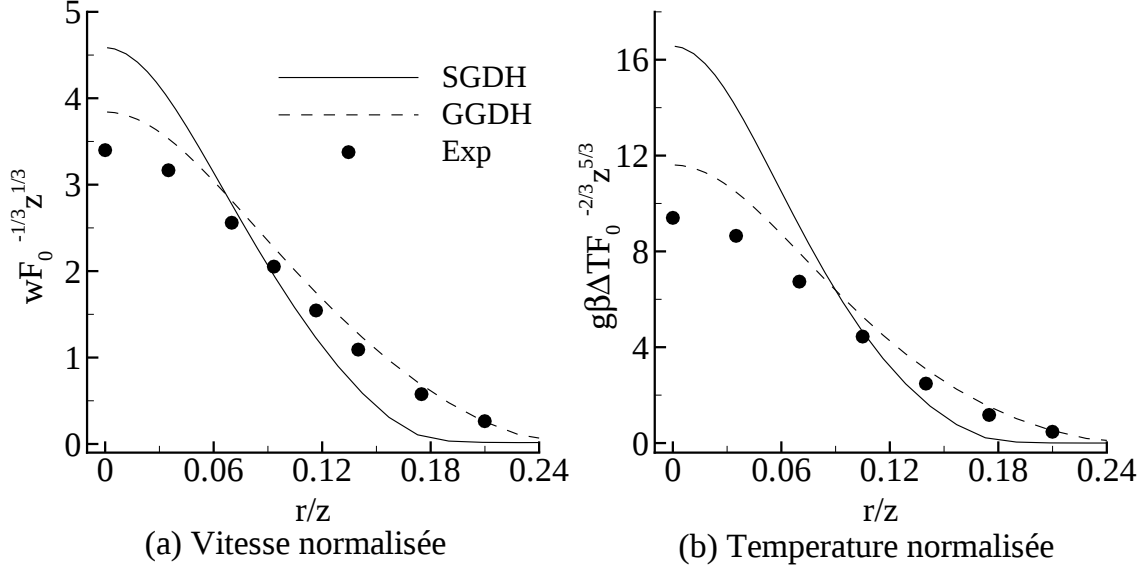


FIG. 5.5 – Profils de vitesse axiale et température moyennes normalisées pour les fermetures SGDH et GGDH

les grandeurs le long de l'axe et les sous-estime lorsqu'on s'en écarte ($r/z > 0.08$). Cette constatation a été également tirée par Nam et Bill [82]. Pour remédier à ce problème ces auteurs ont proposé de modifier les valeurs des constantes du modèle $k-\varepsilon$ (C_μ et σ_t). L'utilisation du modèle GGDH conduit à des améliorations significatives des résultats, permettant d'obtenir un accord relativement satisfaisant avec les données expérimentales. La comparaison avec les principales grandeurs caractéristiques du panache est résumée dans le tableau 5.4. Le modèle GGDH surestime la vitesse axiale et la flottabilité le long de l'axe d'environ 10 et 25 %. La demi-largeur du panache est quant à elle bien prédite (3 % d'écart environ).

La figure 5.6 montre la contribution du terme G dans la production totale de l'énergie turbulente ($P+G$). Ces résultats montrent clairement que la contribution du terme de production de turbulence par les forces de flottabilité est sous-estimée par l'approche du gradient simple. Les implications sont immédiates sur les tenseurs de Reynolds comme le montrent les digrammes de la figure 5.7. Le modèle $k-\varepsilon$ a été développé dans le cadre d'une turbulence isotrope et n'inclut naturellement pas l'anisotropie des tenseurs de Reynolds qui sont fortement présents dans les applications où les forces de flottabilité dominent. Cela explique que les écarts avec l'expérience restent importants, malgré une nette amélioration due à l'introduction de la formulation du gradient généralisé.

	$(wF_0^{-1/3}z^{1/3})_c$	$l_{w/2}$	$(g\beta\Delta TF_0^{-2/3}z^{5/3})_c$	$l_{\Delta T/2}$
George et al [38]	3.4	0.112	9.1	0.104
Shabbir et George [107]	3.5	0.112	9.35	0.1
<i>Code_Saturne</i> (SGDH)	4.59	0.083	16.6	0.075
<i>Code_Saturne</i> (GGDH)	3.84	0.109	11.6	0.097

TAB. 5.4 – Valeurs maximales de la vitesse et de la flottabilité sur l’axe et ouverture du panache

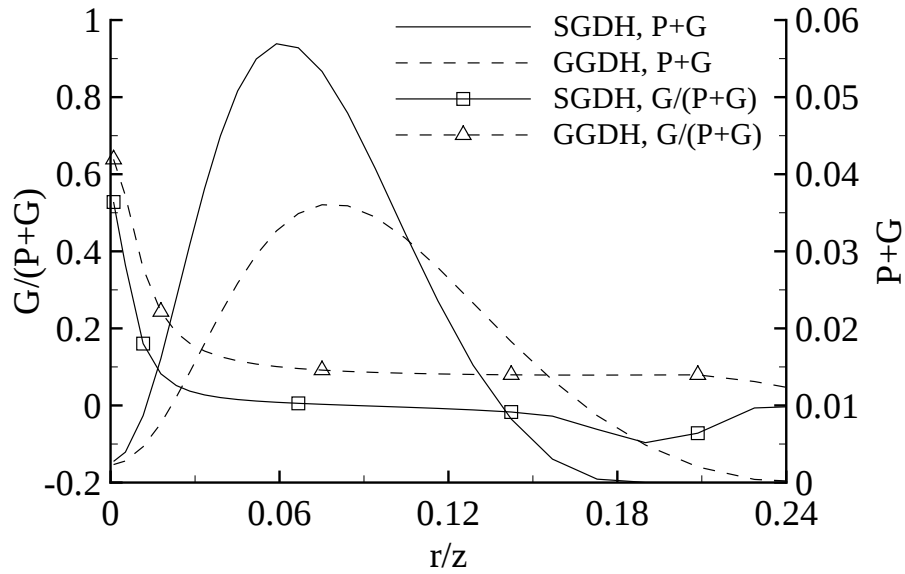


FIG. 5.6 – Production de l’énergie cinétique turbulente : contribution des forces de flottabilité $G/(P + G)$ et production totale $P + G$

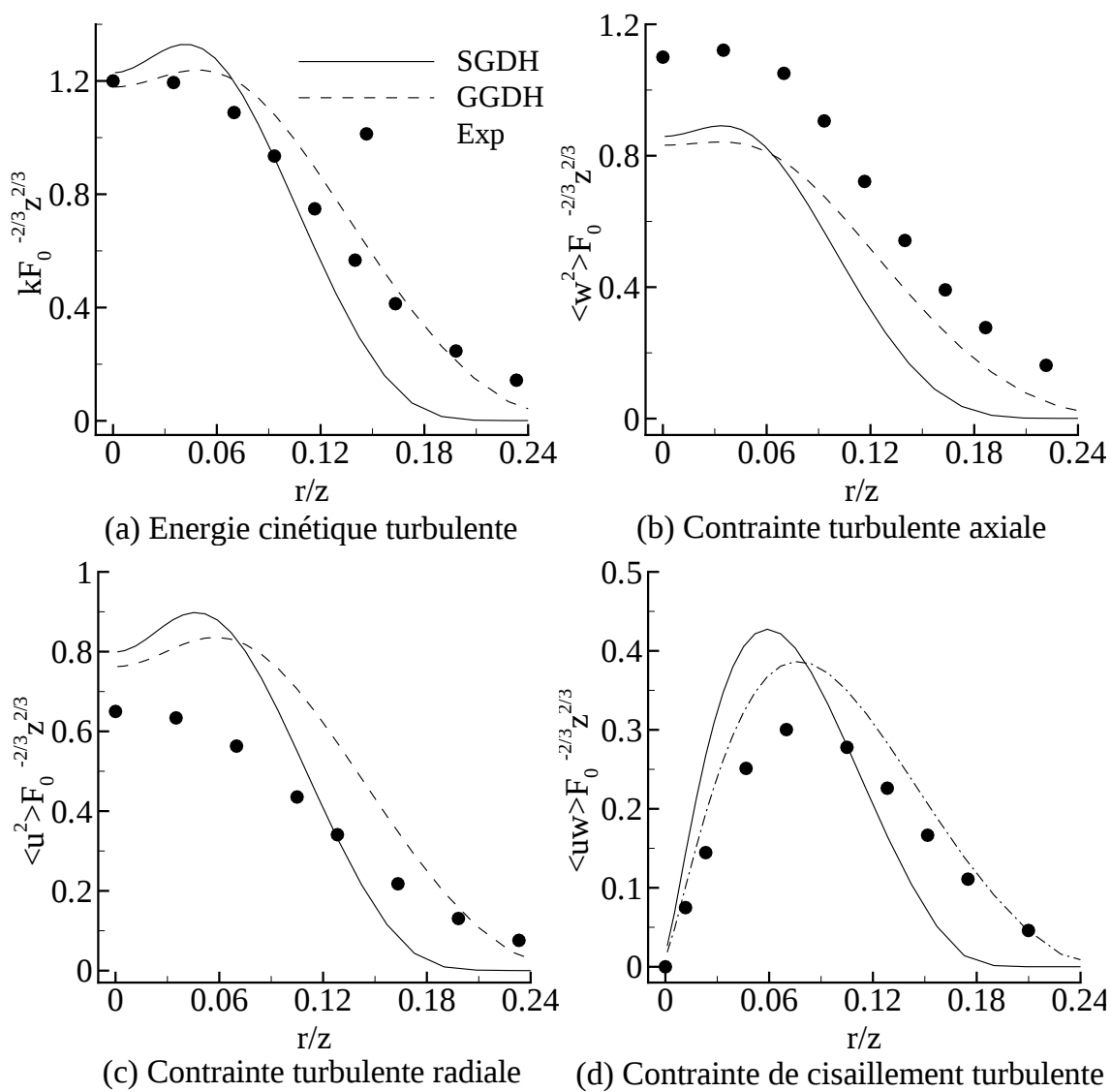
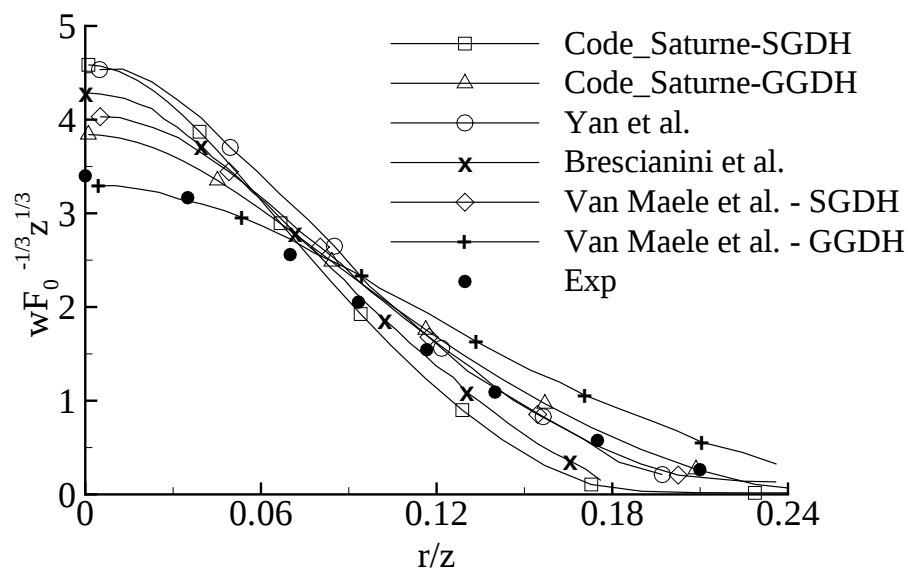


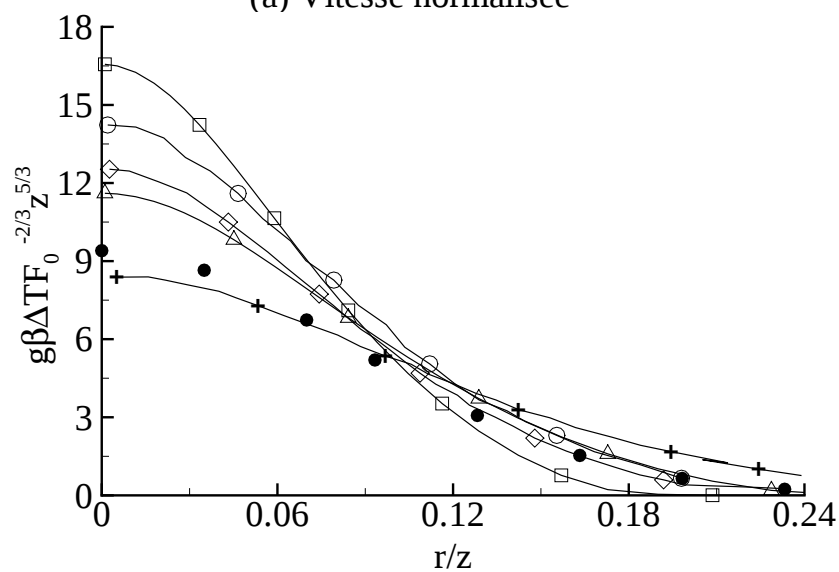
FIG. 5.7 – Distribution radiale des grandeurs turbulentes normalisées à $z = 1.75$ m.

Comparaison avec la littérature

Les résultats obtenus avec *Code_Saturne*, ont été comparés avec d'autres travaux de la littérature basés sur le modèle $k - \varepsilon$ (Fig. 5.8). Les travaux de Van Maele et Merci [68] sont basés sur la même formulation du problème que celle utilisée dans la présente étude, ces auteurs ayant utilisé le logiciel FLUENT pour effectuer les simulations. Bresciannini et Delichatsios [15] et Yan et Holmstedt [131] ont utilisé l'hypothèse du gradient simple. Ces résultats montrent clairement que l'hypothèse du gradient simple n'est pas suffisante pour modéliser proprement les écoulements contrôlés par les forces de flottabilité. Avec le SGDH, les résultats de Van Maele et Merci [68] présentent une sous-estimation de l'énergie turbulente le long de l'axe tandis que les simulations de *Code_Saturne* présentent quant à eux une surestimation de cette grandeur. Les meilleurs résultats sont obtenus par *Code_Saturne* et par Van Maele et Merci [68] en utilisant l'hypothèse du gradient généralisé (GGDH). Les différences entre ces deux travaux sont difficiles à expliquer. Elles peuvent être dues à l'utilisation de différentes méthodes numériques dans la résolution des équations aux dérivées partielles. Il est important de noter que les résultats obtenus avec *Code_Saturne* (GGDH) présentent un accord moins satisfaisant que ceux de Van Maele et Merci [68] près de l'axe mais représentent mieux les expériences lorsque l'on s'éloigne de l'axe avec notamment une bonne prédiction de la demi-largeur du panache. Toutefois, une étude approfondie de la littérature montre que les meilleurs résultats ont été obtenus par le modèle hybride développé par Yan et Holmstedt [131] (non représenté sur la figure 5.8). Ce modèle hybride est une variante du modèle $k - \varepsilon$ et incorpore également les modifications du terme de flottabilité via l'approche GGDH. La différence est qu'il utilise la formulation algébrique de Davidson [29] pour les tensions de Reynolds et que le flux turbulent thermique $\widetilde{\rho u_i'' T''}$ dans l'équation de l'énergie est également traité par l'approche GGDH.



(a) Vitesse normalisée

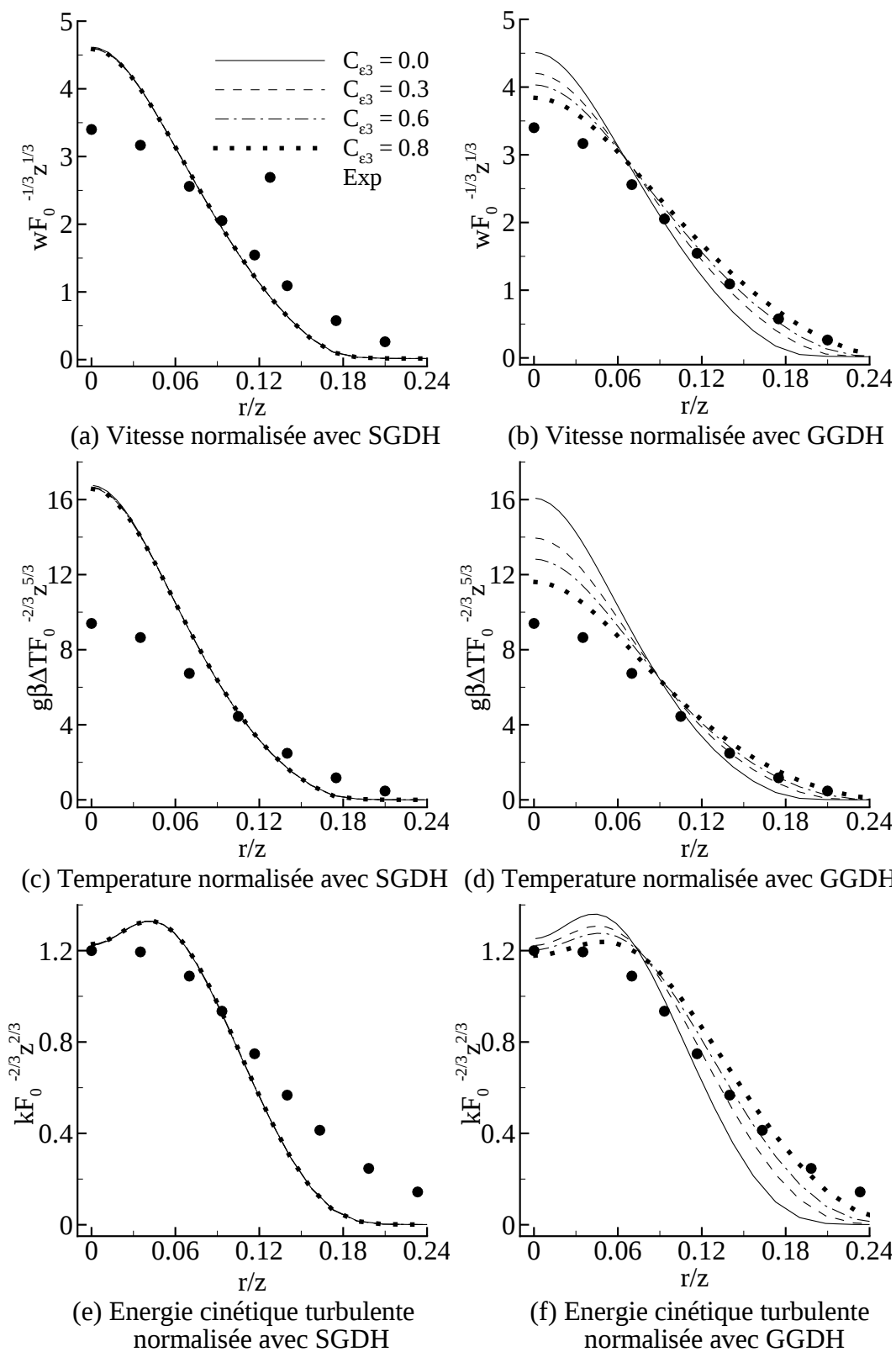


(b) Temperature normalisée

FIG. 5.8 – Comparaison de la distribution radiale de la vitesse et la flottabilité normalisées avec d'autres modèles de la littérature

Effet de $C_{\varepsilon 3}$ sur les grandeurs moyennes

Les résultats précédents ont été obtenus en prenant une valeur de 0.8 pour la constante $C_{\varepsilon 3}$. Devant la grande variété de valeurs utilisées dans la littérature, une étude sur son influence est réalisée. Les résultats pour la vitesse axiale, la température et l'énergie cinétique turbulente normalisées sont présentés sur la figure 5.9. Dans le cadre du SGDH, il apparaît que cette constante ne joue pas un rôle fondamental. Par contre elle a un effet crucial lorsque le GGDH est utilisé, ce qui est en accord avec les conclusions de Worthy et al. [129]. En effet, une augmentation de la valeur de cette constante conduit à une diminution de la production du taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente ε . Par conséquent, la viscosité turbulente est plus élevée ce qui conduit à une dissipation plus importante. Il en résulte que l'étalement du panache devient plus important (Fig. 5.9). Si la valeur de 0.8 permet d'approcher au mieux les résultats expérimentaux, il semble prématuré de conclure sur la valeur optimale de la constante $C_{\varepsilon 3}$.

FIG. 5.9 – Influence de la constante $C_{\epsilon 3}$ avec SGD et GGD

5.1.4 Effet de la dilatation thermique

Dans ce paragraphe l'influence des variations temporelles de la densité est évaluée en utilisant les deux approches proposées (p. 91). La première approche (A1) utilise l'équation de continuité sous forme conservative et consiste à évaluer la dérivée temporelle de la densité via un schéma d'Euler d'ordre 1. La seconde approche (non conservative) traite la dérivée temporelle de la densité en utilisant la loi d'état. Les deux approches ne conduisant pas aux mêmes résultats, une variante de la seconde approche (A3) a été introduite pour comprendre si les différences proviennent de l'utilisation d'une forme non conservative de l'équation de continuité ou de l'introduction de la loi d'état. Pour cela une forme non conservative de l'équation de continuité est utilisée et un schéma d'Euler d'ordre 1 évalue la dérivée temporelle de la densité :

$$\frac{1}{\rho} \frac{D\rho}{Dt} = \frac{1}{\rho^{n+1}} \frac{\rho^{n+1} - \rho^n}{\Delta t} + \underline{u}^n \cdot \nabla \rho^{n+1} \quad (5.8)$$

La première constatation est que la prise en compte de la dérivée temporelle de la densité conduit à une solution périodique oscillante (Fig. 5.11). La figure 5.10 présente la distribution radiale de la vitesse et de la flottabilité pour le SGDH et le GGDH. L'approche A1 conduit à des résultats relativement proches de la solution stationnaire. Néanmoins, les différences sont plus marquées dans le cas du SGDH où l'on note une augmentation de la vitesse et de la température. L'approche A2 conduit dans les deux cas à une solution différente de la solution stationnaire, une comparaison entre A2 et A3 montrant que ces différences sont majoritairement imputables à l'utilisation d'une forme non conservative de l'équation de continuité. Par conséquent, l'utilisation d'un schéma conservatif est recommandée ou l'amélioration de l'algorithme numérique pour la formulation non conservative est indispensable.

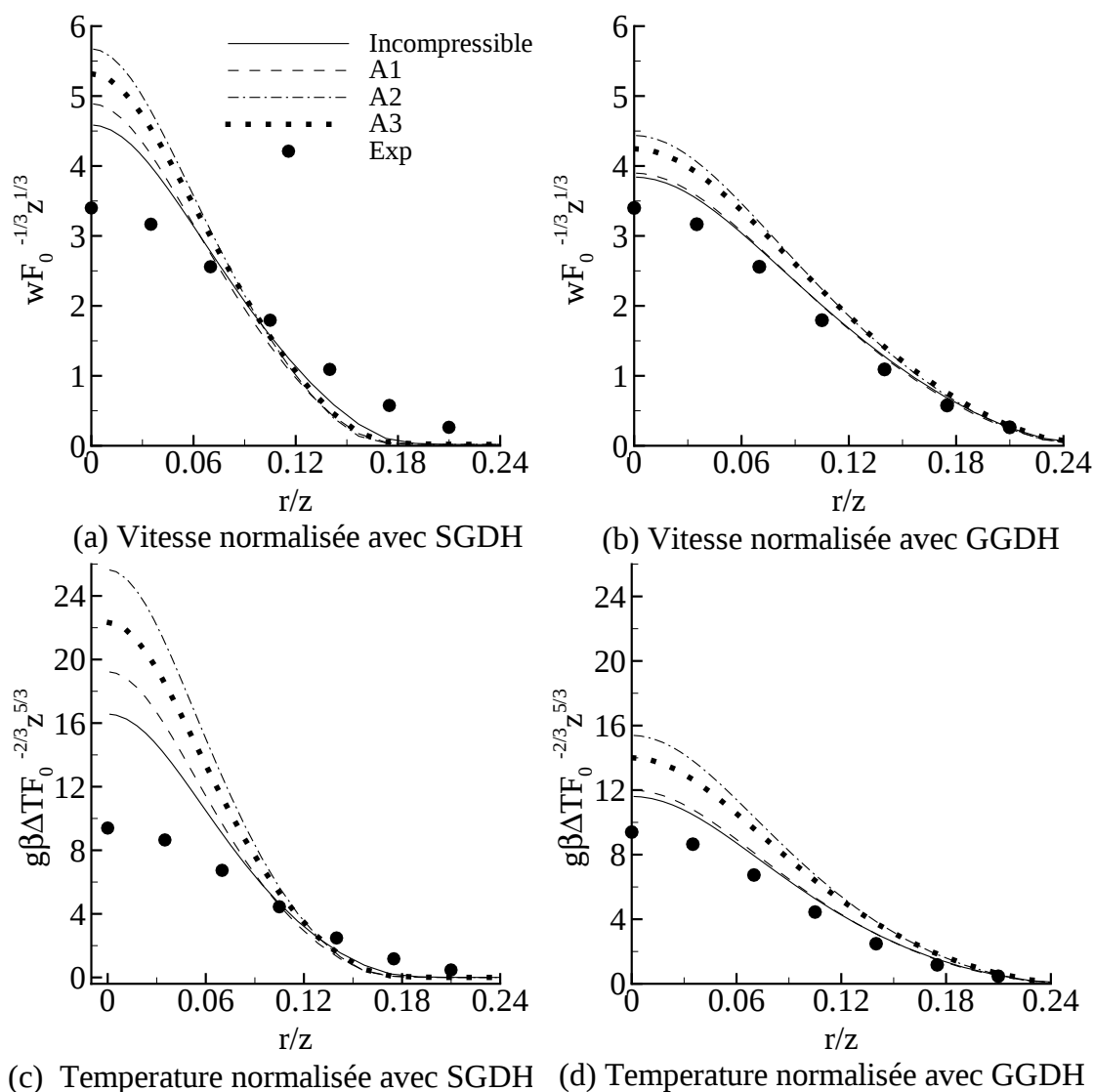


FIG. 5.10 – Comparaisons des différentes approches du traitement du terme de dilatation. A1 : Euler sous la forme conservative, A2 : Dérivation de la loi d'état, A3 : Euler sous la forme non conservative.

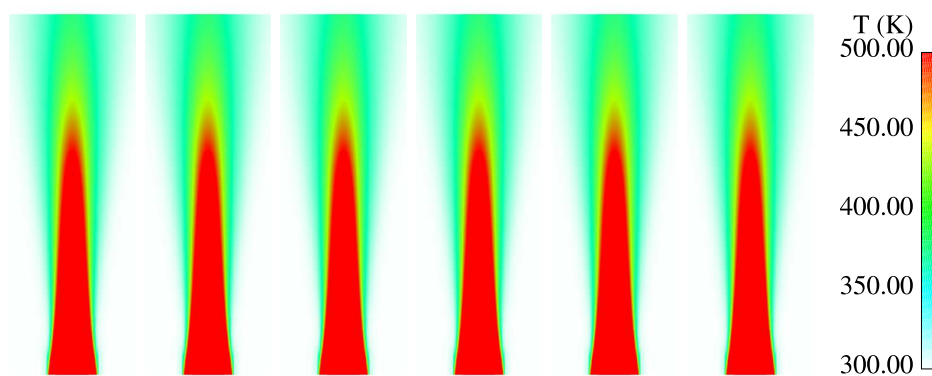
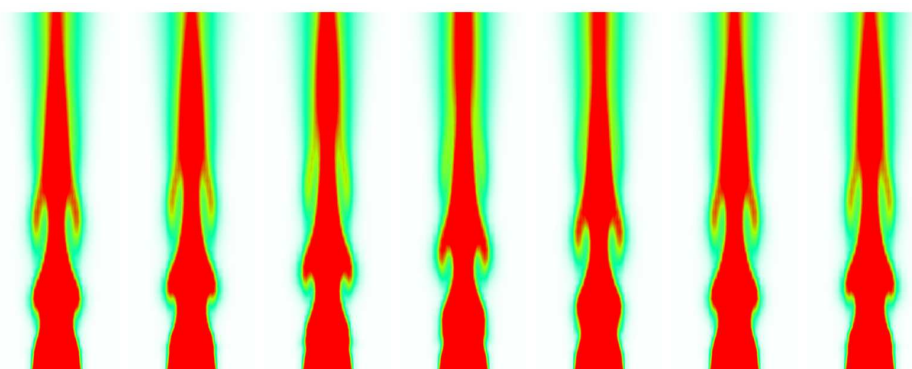
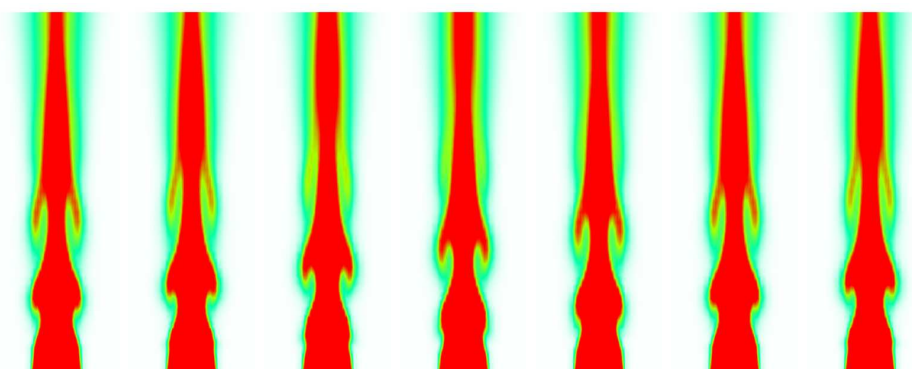
(a) Calcul incompressible $\Delta t = 0.27 s$ (b) Approche A1 Euler conservative $\Delta t = 0.27 s$ (c) Approche A2 Dérivation de la loi d'état $\Delta t = 0.27 s$

FIG. 5.11 – Champs instantanés de température comparant les trois approches du traitement de la dilatation.

5.1.5 Conclusions sur l'étude d'un panache thermique stationnaire

Les conclusions suivantes peuvent être tirées de l'étude du panache de George et al. :

- l'approximation de Boussinesq sur le terme de production turbulente dû aux forces de flottabilité peut être utilisée pour modéliser le comportement de l'écoulement dans le champ lointain où les différences de densité sont faibles. Plus près de la source, où les différences de densité sont plus sensibles, cette approximation doit être utilisée avec précaution.

- l'utilisation de l'approche du GGDH produit de meilleures prédictions que le SGDH.

- la constante $C_{\varepsilon 3}$ n'a aucun effet sur SGDH tandis que GGDH est très sensible à la valeur de cette constante. Dans le cadre de la présente étude, la valeur optimale de cette constante est de 0.8.

- une étude des différents modèles de la littérature a montré que les meilleures prédictions ont été obtenues en utilisant les modèles $k-\varepsilon$ plus sophistiqués notamment le modèle de Yan et Holmstedt [131] ou encore le modèle ASM de Hossain et Rodi [47].

- l'introduction du terme instationnaire dans l'équation de continuité conduit à une solution oscillante. Deux hypothèses sont possibles pour expliquer l'apparition de ce phénomène. La première est que les structures les plus grandes sont capturées par le modèle. La seconde est que les algorithmes ne sont pas suffisamment robustes pour obtenir une solution convergée.

5.2 Panache thermique à bas nombre de Froude

Cette étude est basée sur le travail d'Hara et al. [41]. Les auteurs évaluent la précision des prédictions numériques d'un panache thermique dans un milieu ouvert utilisant le modèle de turbulence standard $k - \varepsilon$ dans le code STAR-CD 3.05C. Ce travail a été inscrit dans le cadre de « Guideline benchmarking CFD Predictions of the Indoor Smoke Movement ». Cette étude comporte la sensibilité au maillage, la comparaison avec des données expérimentales (corrélations de Yokoi [134]) et l'évaluation du modèle de turbulence. Les corrélations de Yokoi concernent la température et la vitesse et se présentent sous la forme du produit de la distribution verticale et la distribution horizontale :

$$\begin{aligned} w &= 0.8333 f_1(z) f_2(z) \\ \Delta T &= 0.423 f_3(z) f_4(z) \end{aligned} \quad (5.9)$$

avec

$$\begin{aligned} f_1(z) &= \left[\frac{g\dot{Q}}{C_p \rho T_0} \right]^{1/3} C^{-4/9} z^{-1/3} \\ f_2(x, z) &= (1 + 0.9174 \zeta^{3/2} + 0.399 \zeta^3 + 0.1077 \zeta^{9/2}) e^{-1.4617 \zeta^{3/2}} \\ f_3(z) &= \left[\frac{T_0 \dot{Q}^2}{C_p^2 \rho^2 g} \right]^{1/3} C^{-8/9} z^{-5/3} \\ f_4(x, z) &= (1 + 0.9383 \zeta^{3/2} + 0.4002 \zeta^3 + 0.09398 \zeta^{9/2}) e^{-1.4617 \zeta^{3/2}} \end{aligned} \quad (5.10)$$

f_1 est la vitesse axiale le long de l'axe de la source, elle croît avec le taux d'énergie libérée $\dot{Q}$ à une puissance de $1/3$ et décroît avec la hauteur z à une puissance de $-1/3$. f_3 est la température axiale le long de l'axe de la source, elle croît avec le taux d'énergie libérée $\dot{Q}$ à une puissance de $1/3$ et décroît avec la hauteur z à une puissance de $-5/3$. f_2 et f_4 représentent la distribution horizontale de la vitesse et la température respectivement. $\zeta = x/(zC^{2/3})$ est la distance horizontale adimensionnée à partir du centre de la source. Yokoi [134] a déterminé deux types de corrélations à partir de la constante $C^{2/3}$. Dans le cadre d'une source ponctuelle (SP), $C^{2/3}$ vaut 0.062 afin de décrire le champ lointain, tandis que dans le cadre d'une source circulaire $C^{2/3}$ vaut 0.1 pour représenter le champ proche.

5.2.1 Conditions de calcul

Les calculs sont effectués dans une configuration tridimensionnelle. Pour des raisons de symétrie, seulement un quart du domaine est utilisé comme domaine de calcul. Les conditions limites utilisées sont présentées sur la figure 5.12. Les conditions de calculs sont présentées dans le tableau 5.5. Quatre maillages structurés rectilignes non uniformes sont utilisés.

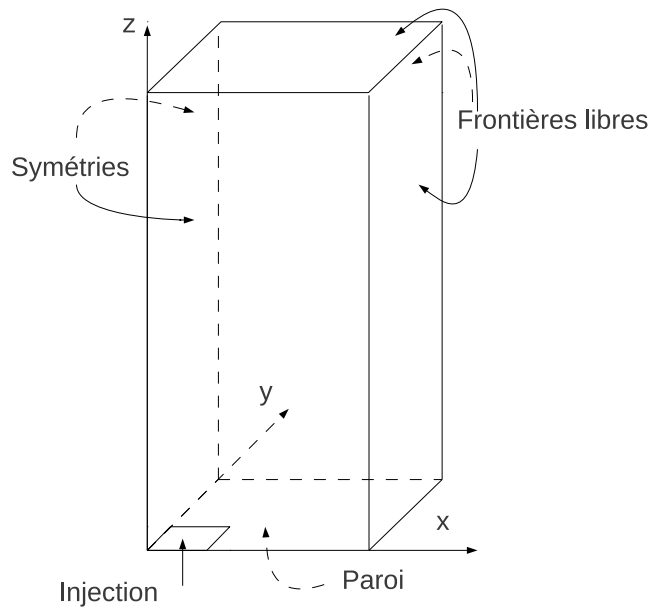


FIG. 5.12 – Conditions limites pour l'expérience de Yokoi

Conditions initiales	$P_0 = 101325 \text{ Pa}$ $T_0 = 302.15 \text{ K}$	$k_0 = 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}^2$ $\varepsilon_0 = 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}^3$
Conditions d'injection	$r_0 = 0.1875 \text{ m}$ $\dot{Q} = 8.6378 \text{ kW}$	$\Delta T = 800 \text{ K}$
Propriétés physiques	$\rho_{air}(T_0) = 1.17 \text{ kg/m}^3$ $\mu_{air} = 4.25 \cdot 10^{-5} \text{ kg/m.s}$	$Cp_{air} = 1219 \text{ J/kg.K}$
Maillages	$x \times y \times z$	
M1	$6 \times 6 \times 7 = 252$	
M2	$12 \times 12 \times 13 = 1872$	
M3	$24 \times 24 \times 26 = 14976$	
M4	$48 \times 48 \times 52 = 119808$	

TAB. 5.5 – Conditions de calcul pour l'expérience de Yokoi

5.2.2 Sensibilité au maillage

La figure 5.13 représentent les profils radiaux de la vitesse et de la température à $z = 10, 20, 40, 60 r_0$ pour les quatre maillages (Tab. 5.5).

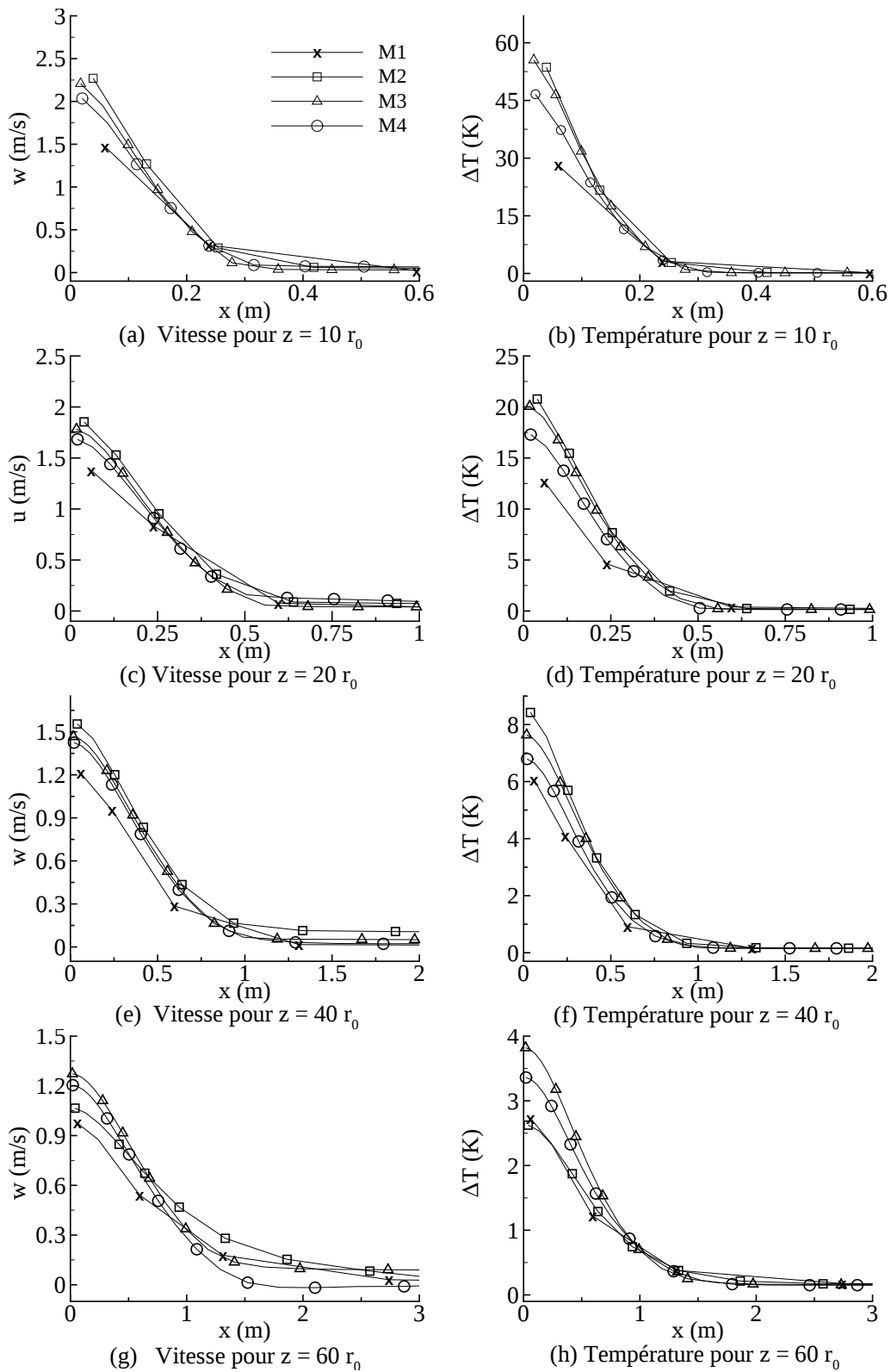


FIG. 5.13 – Distribution radiale de la vitesse et de la température à $z = 10, 20, 40, 60 r_0$ pour les quatre maillages

Elle montre que le maillage le plus grossier (M1) produit des résultats extrêmement différents des autres. La vitesse est moins sensible au maillage tandis que la température montre une sensibilité plus marquée près de l'axe. Le maillage M3 est utilisé pour discuter les résultats.

5.2.3 Discussions

Les résultats sont comparés avec les corrélations expérimentales de Yokoi relatives à une source circulaire et ponctuelle (Figs. 5.14 et 5.15).

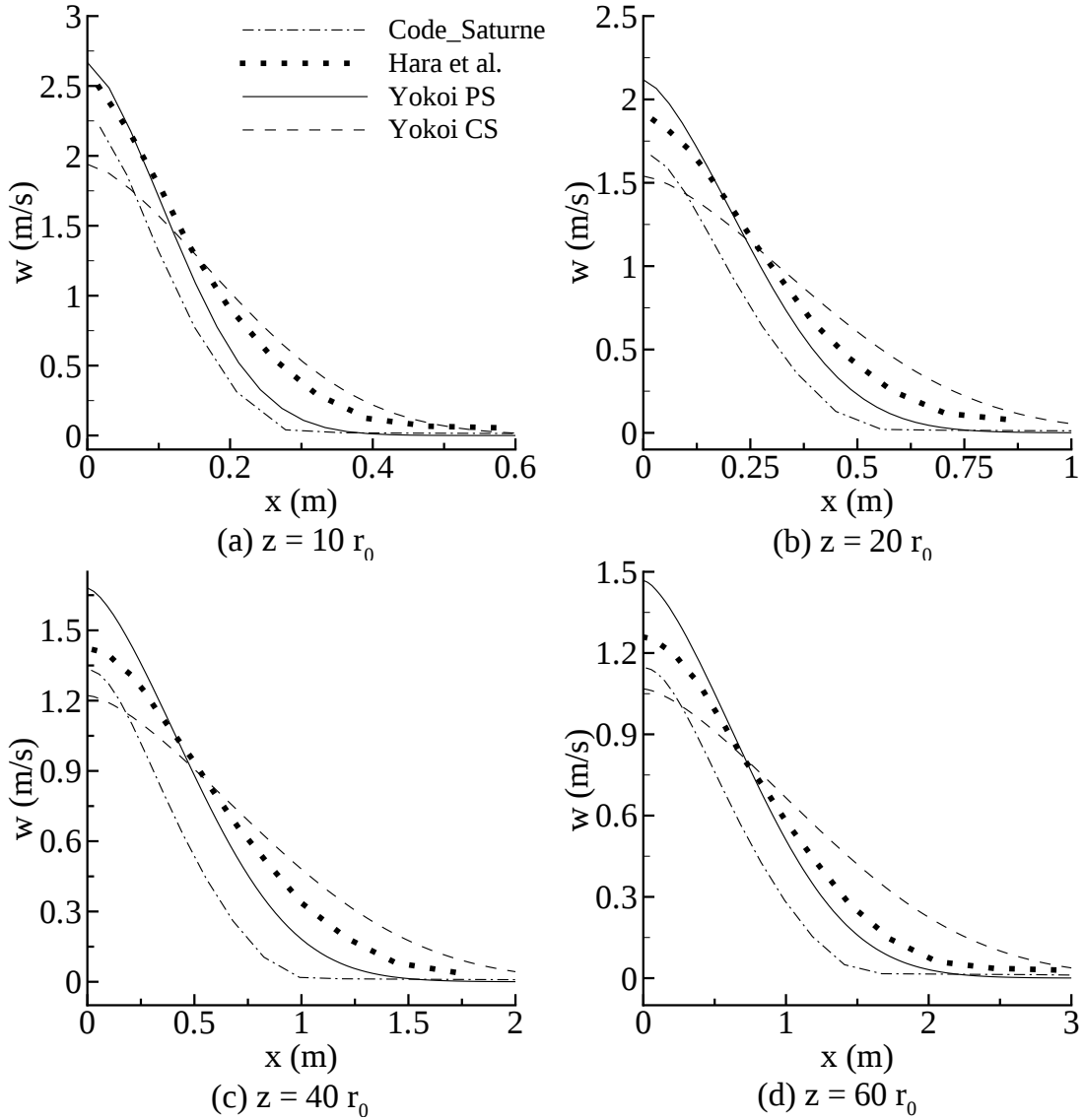
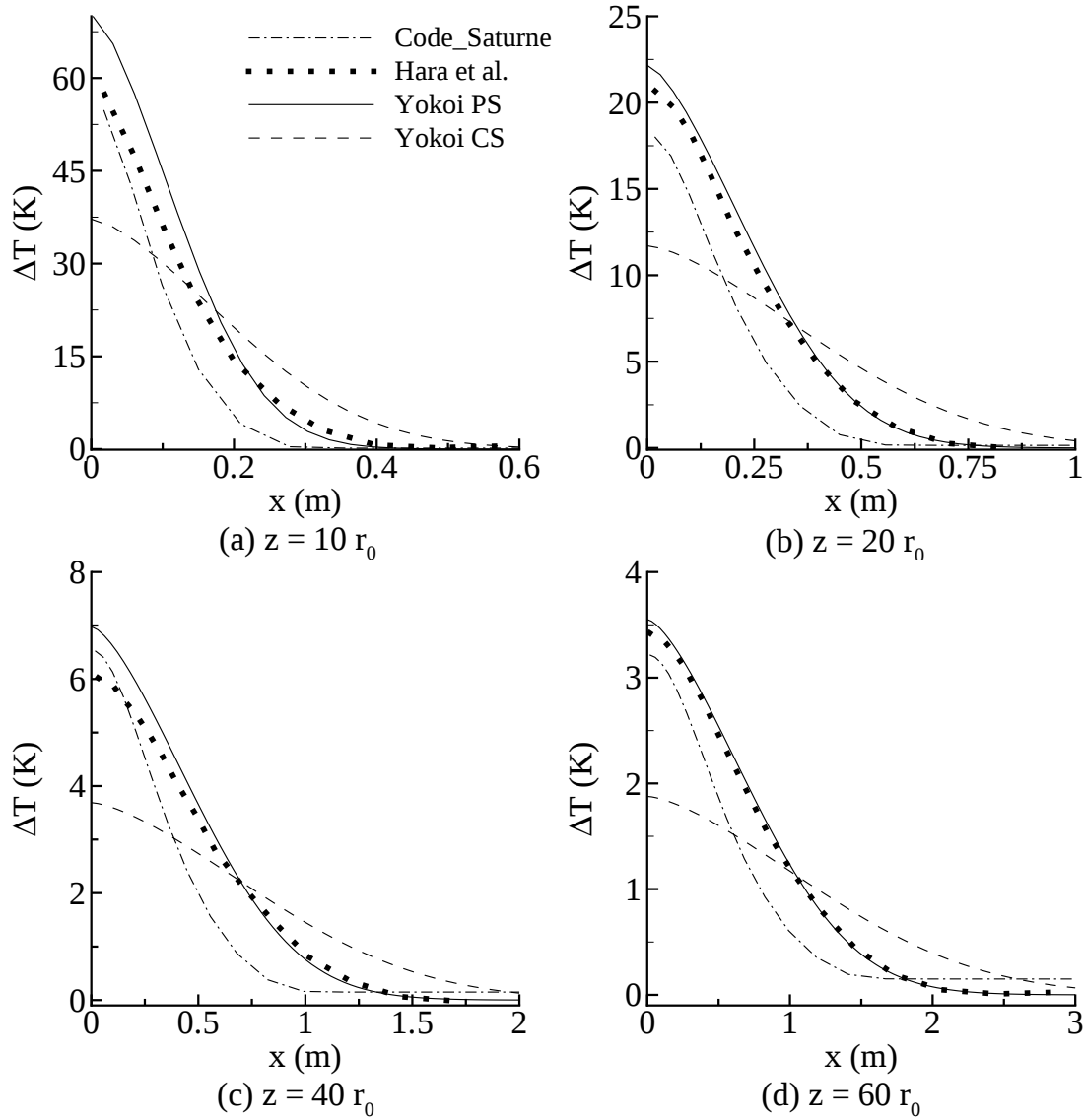


FIG. 5.14 – Distribution radiale de la vitesse à $z = 10, 20, 40, 60 r_0$

FIG. 5.15 – Distribution radiale de la température à $z = 10, 20, 40, 60 r_0$

Comme mentionné par Hara et al. [41], les corrélations de Yokoi pour une source circulaire sont valides pour des hauteurs comprises entre 4 et $10 r_0$, c'est-à-dire au voisinage de la source (champ proche). Au fur et à mesure que l'on s'éloigne de la source, la dimension finie de cette dernière affecte de moins en moins l'écoulement de sorte que, dans le champ lointain, la source peut être approchée par une source ponctuelle [98]. Par conséquent la corrélation de Yokoi (Eqs. 5.9) concernant la source ponctuelle devient valide loin de la source. Les résultats présentés sur les figures 5.14 et 5.15 concernent des hauteurs z supérieures ou égales à $10 r_0$. On s'attend donc à ce que les simulations soient en bon accord avec les corrélations de la source ponctuelle. Cette observation est vérifiée par le modèle

numérique.

Afin d'examiner les caractéristiques turbulentes le long de l'axe du panache, la distribution axiale de l'énergie turbulente k et son taux de dissipation ε sont représentées sur la figure 5.16. Les deux simulations sont en bon accord dans le champ lointain. Dans le champ

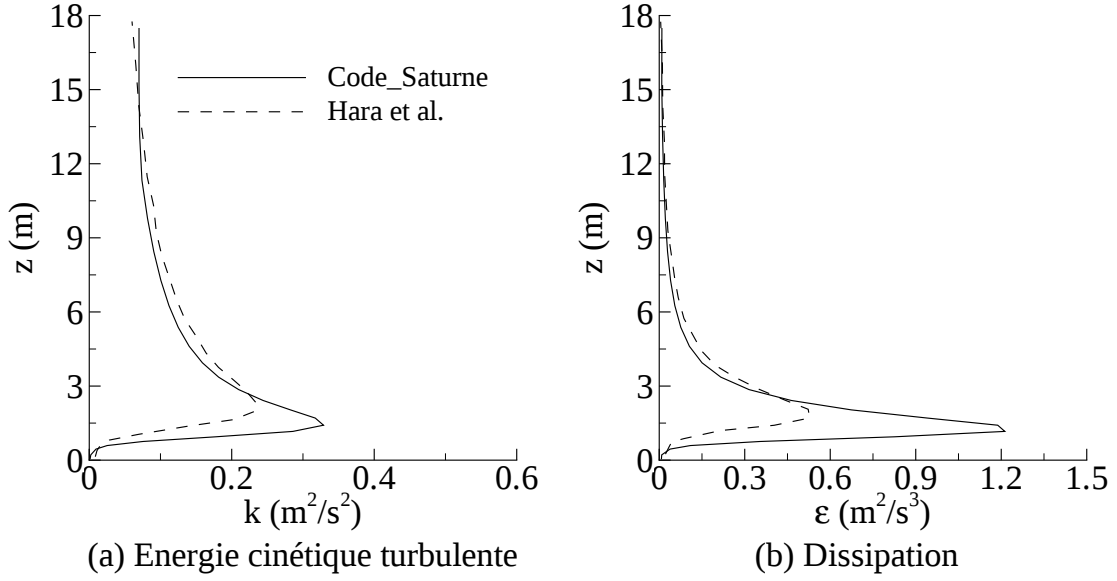


FIG. 5.16 – Distribution de l'énergie turbulente k et son taux de dissipation ε le long de l'axe du panache

proche, un accord qualitatif est observé. Néanmoins des différences quantitatives notables existent entre les deux simulations dans cette région de l'écoulement. L'énergie cinétique et le taux de dissipation calculés par *Code_Saturne* sont plus élevés que ceux prédit par Hara et al. [41]. Les différences entre les simulations effectuées par *Code_Saturne* et celles d'Hara sont difficiles à expliquer dans la mesure où les mêmes modèles physiques et les mêmes maillages sont utilisés entre les deux études. Il est plausible de penser qu'elles sont dues à l'utilisation de différentes méthodes numériques.

La dynamique des panaches issus d'un feu peut être prédite par des corrélations développées d'une manière théorique afin de fournir une représentation précise et complète des données expérimentales. Les corrélations développées par Quintiere et ses collaborateurs [98] sont reconnues comme valides par la communauté des feux. Elles sont ici utilisées pour vérifier la validité des simulations numériques pour la vitesse, la température ainsi que l'entraînement d'air le long de l'axe du panache. Ces corrélations s'expriment comme suit

pour le champ lointain :

$$\begin{aligned}\frac{w}{(gz_c)^{1/2}} &= 4.17 \left(\frac{z}{z_c} \right)^{-1/3} \\ \frac{T - T_\infty}{T_\infty} &= 10.58 \left(\frac{z}{z_c} \right)^{-5/3}\end{aligned}\tag{5.11}$$

où $z_c = \left(\dot{Q} / \rho_\infty C_p T_\infty \sqrt{g} \right)^{2/5}$ est la longueur caractéristique adimensionnée du panache.

Dans le champ proche de la région de la flamme, le taux d'entraînement d'air est exprimé comme suit :

$$\frac{\dot{m}_e}{\rho_\infty \sqrt{g} D^{5/2}} = 0.17 Q_D^{*1/3} \left(\frac{z}{D} \right)^{-5/6}\tag{5.12}$$

où $Q_D^* = \dot{Q} / \rho_\infty C_p T_\infty \sqrt{g} D D^{2/5}$ est la puissance adimensionnée.

La figure 5.17 montre que les prédictions numériques sont en bon accord avec les corrélations mentionnées ci-dessus (Eqs. 5.11 et 5.12) en ce qui concerne la vitesse et la température dans le champ lointain. L'entraînement d'air est quant à lui correctement prédit loin de la source mais il est largement sous-estimé dans le champ proche.

5.2.4 Conclusions sur l'étude d'un panache thermique à bas nombre de Froude

Cette étude a montré que les prédictions obtenus avec *Code_Saturne* sont satisfaisantes dans le champ lointain mais le champ proche est moins bien décrit ($z = 10 r_0$). La sensibilité au maillage est plus prononcée dans cette étude que sur celle de George et al.

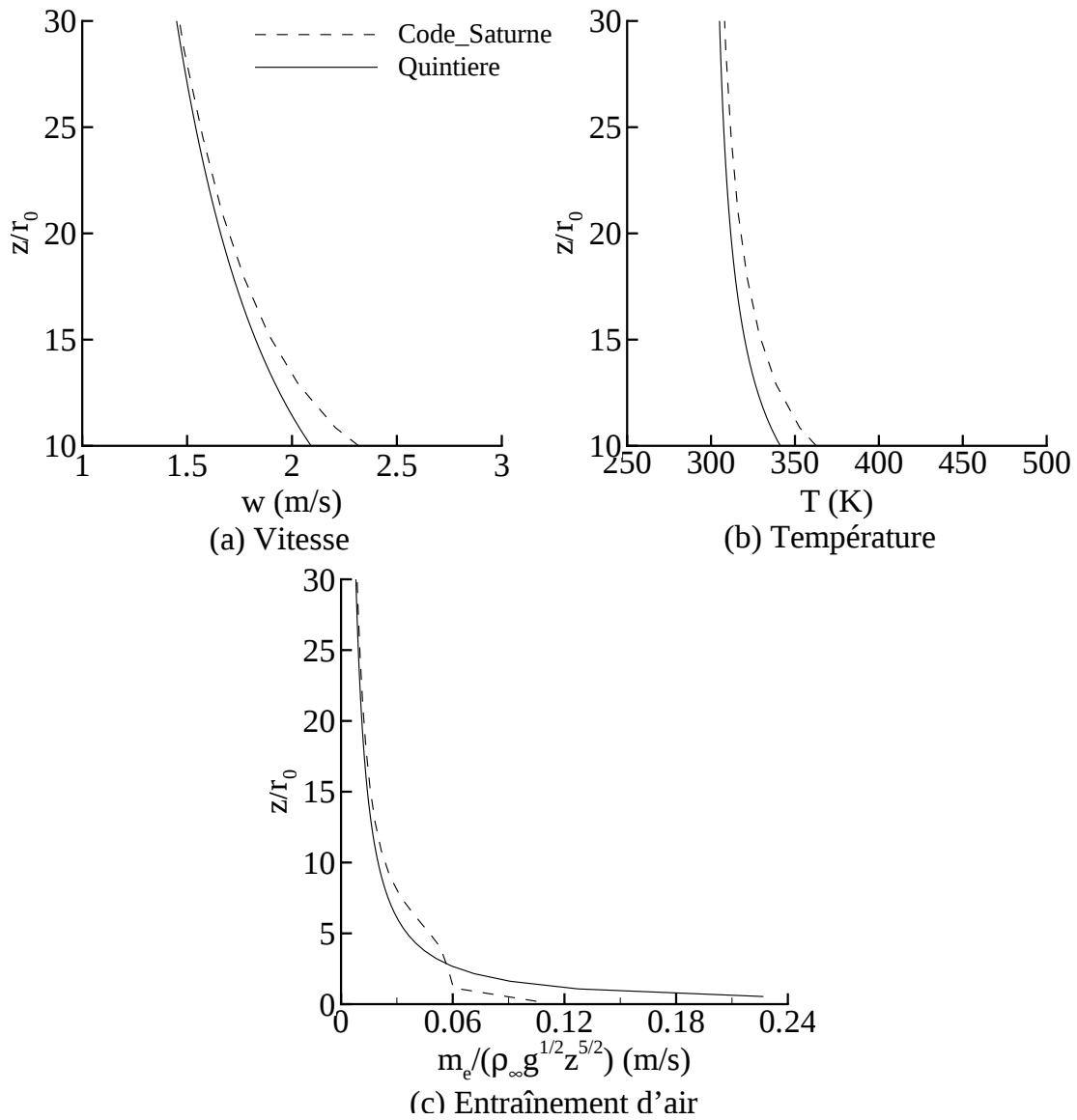


FIG. 5.17 – Comparaison des simulations avec les corrélations de Quintiere [98] : (a) Distribution axiale de la vitesse, (b) Distribution axiale de la température, (c) Entraînement d'air adimensionné du champ lointain en fonction de la hauteur adimensionnée.

5.3 Panache d'hélium instationnaire

L'expérience de O'Hern et al. [86] est maintenant simulée. Elle concerne le champ proche d'un panache d'hélium turbulent créé par une source circulaire dominé par les forces de flottabilité. Les résultats numériques sont comparés avec les données expérimentales fournies par O'Hern et al., qui sont la vitesse, la température, la fraction massique d'hélium et les grandeurs turbulentes, moyennées au sens de Favre.

5.3.1 Description du cas

Les expériences ont été menées dans le Fire Laboratory for Accreditation of Models by Experimentation (FLAME) du Sandia National Laboratory dans l'optique d'examiner les caractéristiques des panaches à grande échelle et de fournir des données pour la validation des codes CFD. Dans une chambre de dimension $6.1 \times 6.1 \times 7.3$ m alimentée en air, est placée une source d'hélium au milieu d'une plaque plane circulaire (Fig. 5.18).

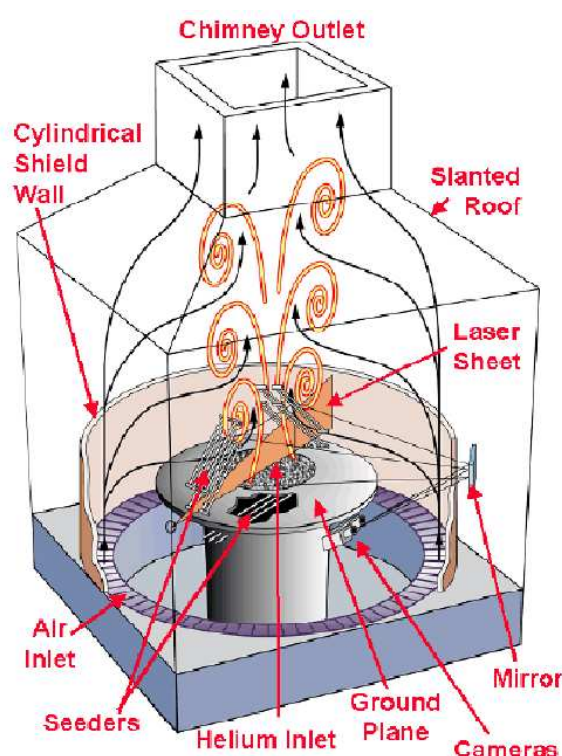


FIG. 5.18 – Schéma de l'installation FLAME de Sandia.

- Le mélange gazeux est composé de 96.4 % d'hélium, 1.7 % d'acétone et 1.9 % d'oxygène par volume. Pour les mesures laser, l'acétone a été utilisé pour repérer la fluorescence des gaz, tandis que l'oxygène a été ajouté pour éteindre la phosphorescence de l'acétone.
- La masse molaire du mélange gazeux est de 5.45 g/mol.

- La température du mélange est de 284.15 K tandis que celle de l'air est de 286.15 K.
- Le diamètre de la source du mélange est de 1 m.
- La vitesse moyenne d'injection du mélange est de 0.325 m/s.
- L'écoulement à la sortie de la source est laminaire.
- La source est placée au centre d'une plaque plane circulaire de 2 m de diamètre. Cette plaque est placée à 2.45 m au-dessus du sol. Un co-courant d'air, issu d'une source de 0.60 m placé au sol à une distance de 2.3 m, est utilisé pour alimenter la chambre en air. La vitesse d'injection du co-courant d'air est de 0.15 m/s. Le nombre de Reynolds de la source est 3200 et le nombre de Froude densimétrique de 0.12.
- O'Hern et al. [86] présentent des mesures expérimentales moyennées au sens de Favre pour la vitesse, la température, la fraction massique d'hélium et les caractéristiques turbulentes de l'écoulement à des hauteurs de 0.2, 0.4, et 0.6 m au-dessus de la source.
- Les grandeurs moyennes et turbulentes sont mesurées par la technique de vélocimétrie par image de particule (PIV) et par fluorescence induite par nappe laser (PLIF). Plus de détails sur la technique expérimentale peuvent être trouvés dans la référence [86].

Les calculs sont effectués dans une configuration axisymétrique en utilisant l'approche « dilatable » présentée précédemment. Les conditions limites utilisées sont présentées sur la figure 5.19. Les conditions de calcul sont résumées dans le tableau 5.6.

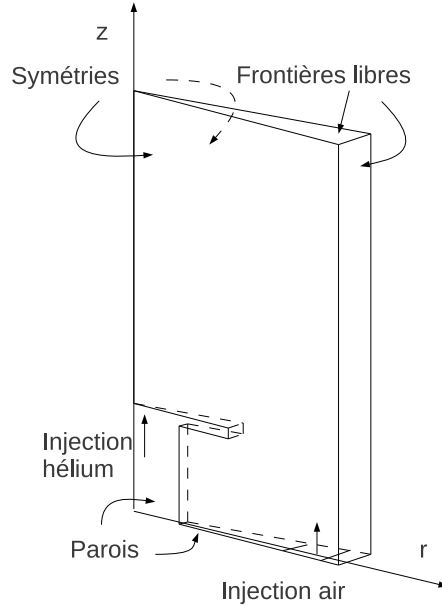


FIG. 5.19 – Conditions limites pour l'expérience de O'Hern et al.

La fraction massique d'hélium est transportée et la densité est calculée à l'aide de la loi des gaz parfaits :

$$\frac{1}{\bar{\rho}} = \frac{\tilde{Y}_{He}}{\rho_{He}} + \frac{1 - \tilde{Y}_{He}}{\rho_{Air}} \quad (5.13)$$

Conditions initiales	$P_0 = 101325 \text{ Pa}$ $T_0 = 286.15 \text{ K}$	$k_0 = 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}^2$ $\varepsilon_0 = 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}^3$
Conditions d'injection Entrée d'hélium	$r_0 = 0.5 \text{ m}, W_{He} = 0.325 \text{ m/s}$ $T_{He} = 284.15 \text{ K}$	$I = 0.5 \%$
Conditions d'injection Entrée d'air	$r_i = 2.3 \text{ m}, r_e = 2.9 \text{ m},$ $W_{Air} = 0.15 \text{ m/s}, T_{Air} = 286.15 \text{ K}$	$k = 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}^2$ $\varepsilon = 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}^3$
Propriétés physiques	$\rho_{He} = 0.23 \text{ kg/m}^3$ $\rho_{Air} = 1.22 \text{ kg/m}^3$	$\mu = 4.25 \cdot 10^{-5} \text{ kg/m.s}$

TAB. 5.6 – Conditions de calcul pour l'expérience de O'Hern et al.

Quatre maillages structurés rectilignes non uniformes d'une dimension de 3 m sur 5 m sont utilisés. Les maillages sont réguliers au-dessus de la source, pour $r < 2r_0$ et $z < 2r_0$ puis sont relâchés dans les deux directions radiale et axiale. Le tableau 5.7 présente le nombre de mailles global utilisé ainsi que le nombre de mailles et la taille de maille dans la zone régulière.

Maillages	Nombre de mailles global	Nombre de maille pour $r < 2r_0$ et $z < 2r_0$	Taille de maille $\Delta r = \Delta z$
M1	$50 \times 50 = 2500$	34×34	3 cm
M2	$75 \times 75 = 5625$	50×50	2 cm
M3	$135 \times 135 = 18225$	100×100	1 cm
M4	$235 \times 235 = 55225$	200×200	0.5 cm

TAB. 5.7 – Discrétisation pour l'expérience de O'Hern et al.

Les résultats sont présentés sous formes de profils moyens obtenus sur 50 s de simulation à partir du moment où le régime permanent est établi, ce qui représente en moyenne 70 bouffées lachées.

5.3.2 Sensibilité au maillage

A mesure que l'on augmente la densité du maillage, l'instationnarité des grandes structures est de plus en plus marquée. Ceci peut être expliqué par le fait que l'écoulement est mieux résolu, en particulier, l'amortissement des instabilités de l'écoulement par la diffusion numérique liée à la discrétisation est réduit. Cet effet a également été constaté par Nicolette et al. [83]. Les instabilités capturées par les différents maillages sont visibles sur la figure 5.20.

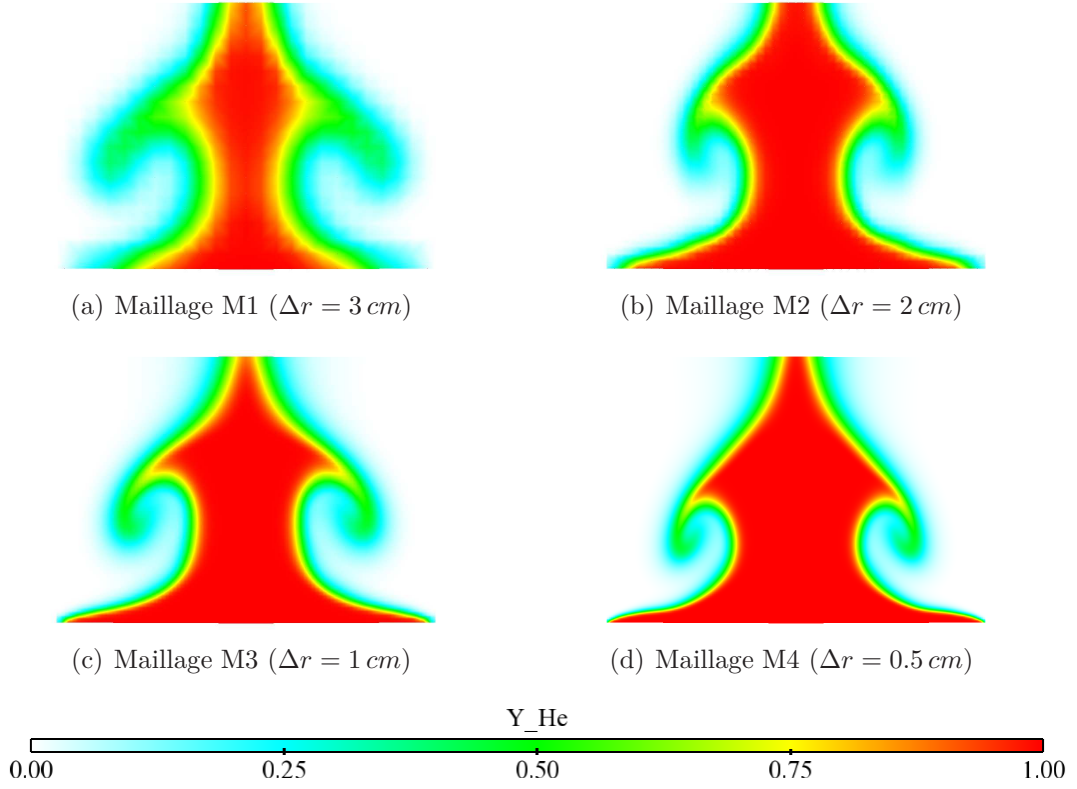


FIG. 5.20 – Sensibilité au maillage sur la dynamique de l'écoulement : champ de fraction massique d'hélium.

Les instabilités sont créées au bord de la source et génèrent des structures tourbillonnaires qui permettent la pénétration de l'écoulement au centre du panache. La concentration en hélium est donc périodiquement plus faible et l'effet de la convection naturelle est moindre. Les vitesses verticales et concentrations moyennées au sens de Favre sont alors réduites, le mélange hélium-air étant favorisé par la présence de ces structures (Fig. 5.21). Ce comportement illustre bien le couplage entre la composition du mélange et la quantité de mouvement.

Les conséquences pour les valeurs moyennes sont visibles sur les différentes prédictions représentées sur la figure 5.21. Les effets sont beaucoup plus marqués près de l'axe où la concentration en hélium est la plus importante. Pour $r > 0.15$ m, la sensibilité au maillage est moindre. Par la suite les calculs seront effectués avec le maillage M3 qui représente un compromis raisonnable entre les résultats obtenus et le temps de calcul.

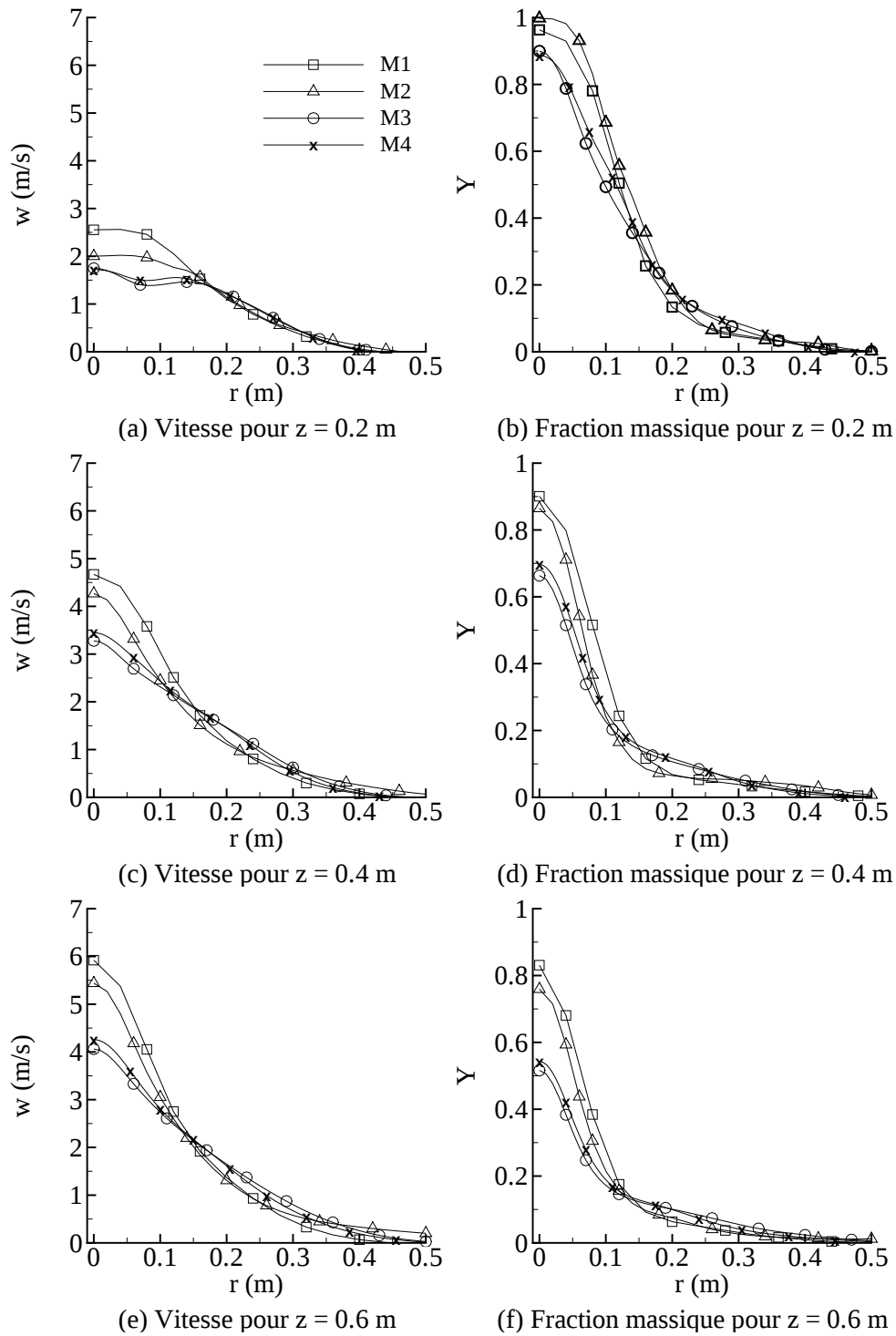


FIG. 5.21 – Sensibilité au maillage sur les profils radiaux de la vitesse verticale w et sur la fraction massique d'hélium Y à $z = 0.2, 0.4$ et 0.6 m.

5.3.3 Effet de la dilatation sur les grandeurs moyennes

Les deux approches dilatable instationnaire, Euler conservative A1 et non conservative A2 sont comparées sur la figure 5.22 avec la version incompressible de *Code_Saturne*.

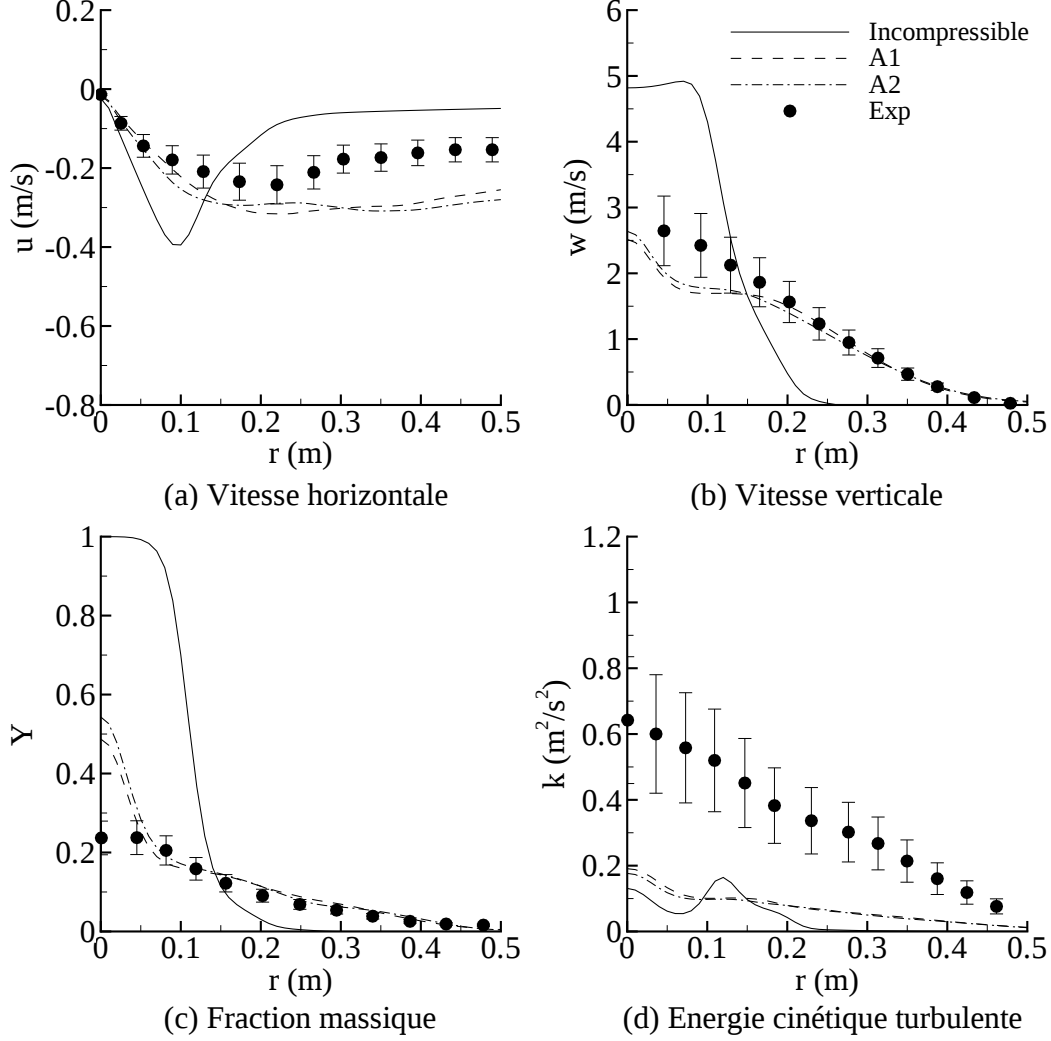


FIG. 5.22 – Comparaison entre l'approche incompressible, dilatable Euler conservative A1 et dilatable non conservative A2 : profils radiaux des vitesses radiales u , axiales w , de la fraction massique Y et de l'énergie cinétique turbulente k à $z = 0.4$ m.

Au contraire des constatations faites sur le panache lointain de George et al., les différences entre les deux approches dilatables sont minimales et considérables avec l'algorithme incompressible. En effet, alors que dans le champ lointain du panache de George et al., la solution attendue est une solution stationnaire, dans le champ proche, l'écoulement est fortement instationnaire, d'où la nécessité de traiter la dilatation des gaz dans l'équation de

continuité. La figure 5.23 présente des vues instantannées de l'écoulement calculé avec l'approche incompressible et l'approche dilatable. La prise en compte de la dilatation permet de capter les basses fréquences de l'écoulement, indispensable pour pouvoir espérer représenter correctement le mélange par la dynamique de l'écoulement dans le champ proche de ce type de panache et par la suite dans le champ proche des flammes à bas nombre de Froude.

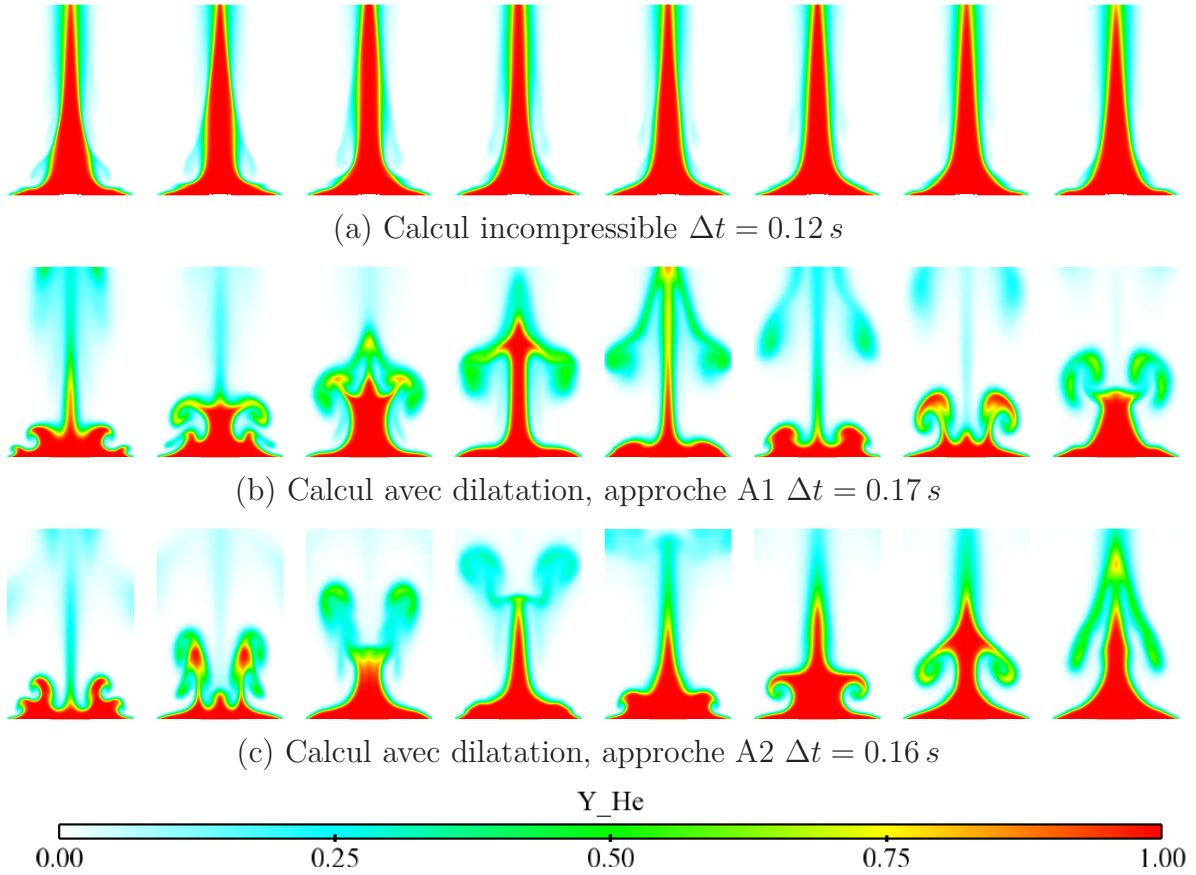


FIG. 5.23 – Effet de la dilatation sur la dynamique de l'écoulement : champ de fraction massique d'hélium.

Les deux approches dilatables bien que différentes permettent de retrouver la même solution moyenne. La perte éventuelle de conservativité de l'approche A2 est alors compensée par la précision de la méthode qui s'affranchit de l'évaluation du terme de dilatation entre deux pas de temps de l'approche A1. Les résultats suivants ont été obtenus par l'approche A1 mais auraient pu l'être avec l'approche A2.

5.3.4 Discussions

Dans cette configuration proche de la source, les différences entre la densité locale et celle du milieu ambiant sont très importantes, le rapport ρ_∞/ρ est de l'ordre de 6. L'effet de l'approximation de Boussinesq sur les prédictions des caractéristiques de l'écoulement s'est montré plus marqué que dans le cas du panache de George et al. [38] discuté précédemment. L'approximation de Boussinesq doit être utilisée avec précaution dans le champ proche et n'est pas utilisée dans cette étude.

Dans le cadre de cette étude, une analyse de sensibilité à la valeur de la constante $C_{\varepsilon 3}$ a été effectuée pour les deux approches SGDH et GGDH ($C_{\varepsilon 3} = 0, 0.3, 0.6$). Il a été observé que la valeur de $C_{\varepsilon 3}$ a un grand impact sur le comportement du panache (Fig. 5.24), notamment, pour $C_{\varepsilon 3} = 0.6$, le panache est totalement stationnaire. Ces calculs préliminaires ont montré que les meilleurs résultats sont globalement obtenus pour une valeur de $C_{\varepsilon 3}$ de 0.3 (Fig. 5.25). Cette constante demeurera inchangée dans la suite de ce paragraphe. Utilisant le modèle $k-\varepsilon$ dans CFX 10.0 pour la même configuration, Chung et Devaud [24] ont également mis en évidence que les résultats dépendent fortement du choix de la constante $C_{\varepsilon 3}$. Ils ont montré que le meilleur accord avec les données expérimentales est obtenu avec $C_{\varepsilon 3}$ de 0.3 pour SGDH et $C_{\varepsilon 3}$ de 0.23 pour GGDH.

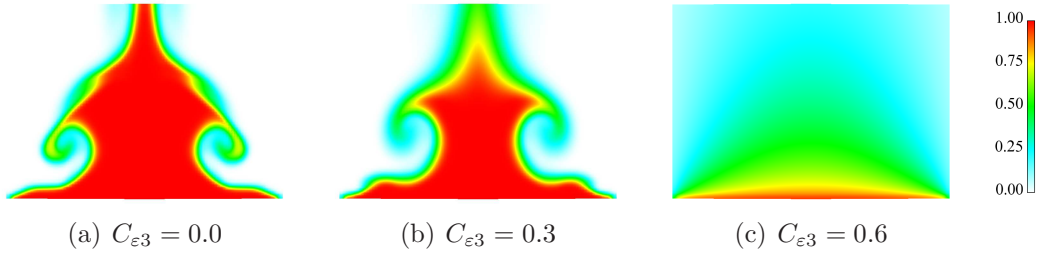


FIG. 5.24 – Effet de $C_{\varepsilon 3}$: champ instantané de fraction massique d'hélium

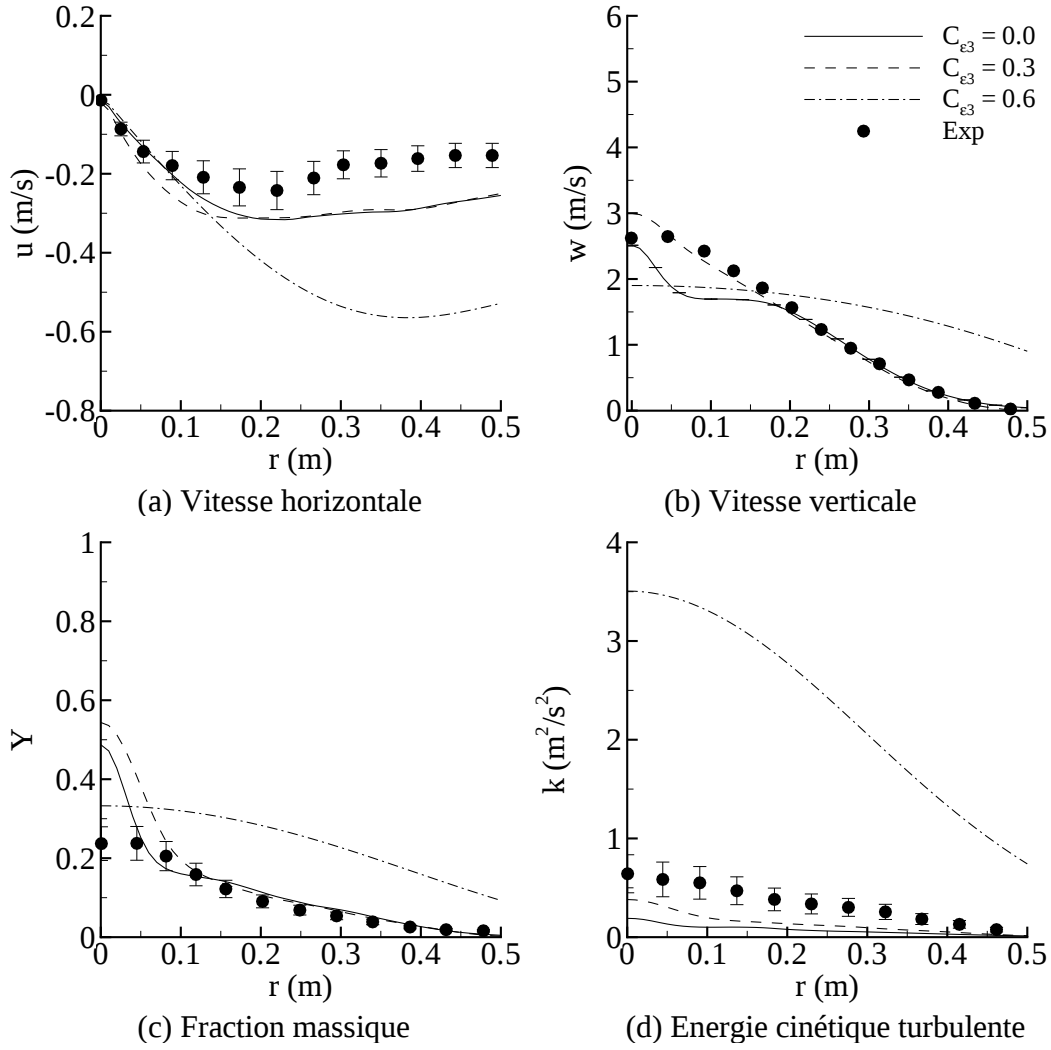


FIG. 5.25 – Effet de $C_{\epsilon 3}$ sur les profils radiaux des vitesses radiale u , verticale w , de la fraction massique d'hélium Y et de l'énergie turbulente k à $z = 0.4\text{m}$.

Dans l'étude de George et al. [38] concernant le champ lointain d'un panache, les résultats ont montré que l'approche GGDH est plus affectée par la valeur de la constante $C_{\varepsilon 3}$ que l'approche SGDH. Dans le cadre du présent cas qui traite le champ proche du panache, le même effet de $C_{\varepsilon 3}$ est observé sur les deux approches. Cette différence de comportement peut être expliquée par d'une part par un rapport de densité plus important qui apparaît dans l'expression de G , et d'autre part par le fait que la part de production de turbulence par les forces de flottabilités est plus importante (Figs. 5.26, 5.27) que dans le cas de George et al. .

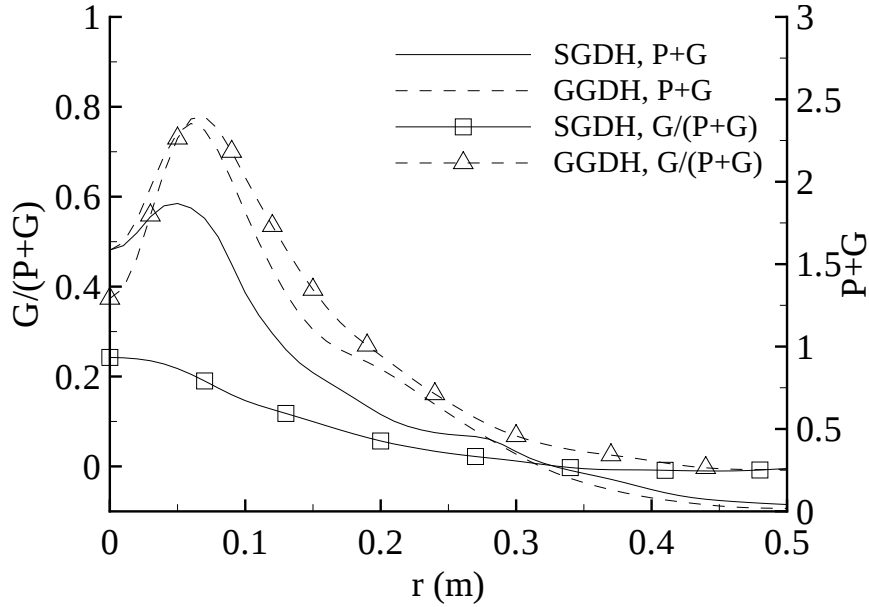


FIG. 5.26 – Production d'énergie cinétique turbulente à $z = 0.4$ m : contribution de la flottabilité $G/(P + G)$ et production totale $P + G$.

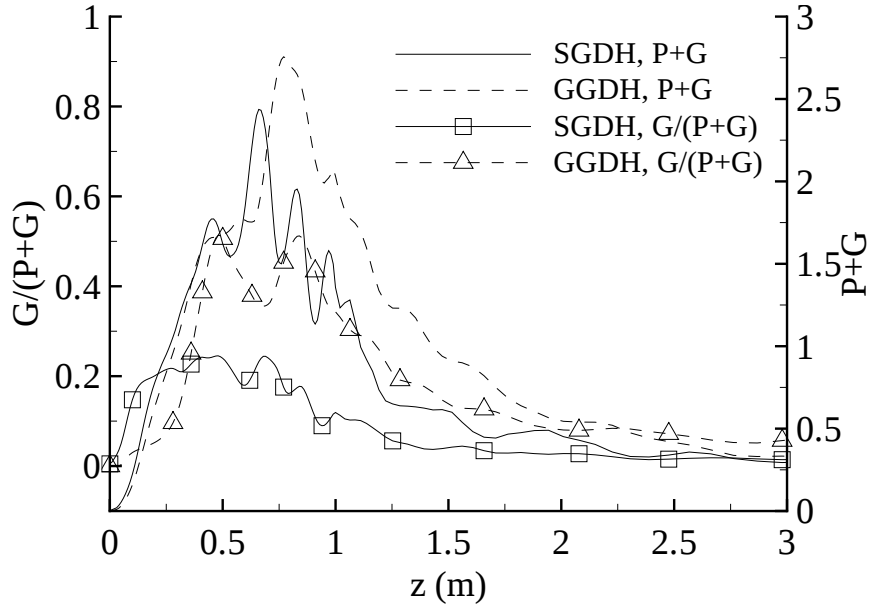


FIG. 5.27 – Production d'énergie cinétique turbulente le long de l'axe : contribution de la flottabilité $G/(P + G)$ et production totale $P + G$.

La figure 5.28 présente les profils radiaux de la vitesse de l'écoulement à différentes positions au-dessus de la source. Les prédictions montrent que le modèle capture bien la tendance des données expérimentales. Près de la source, les résultats montrent un effet d'entraînement d'air dans le panache (Fig. 5.28.a). Les différences entre SGD H et GGD H sont négligeables (Figs. 5.28.a-c). Cette analyse a également été établie par Chung et Devaud [24]. La vitesse axiale w est en bon accord avec les données expérimentales en utilisant SGD H (Figs. 5.28.d-f). A $z = 0.2$ m, les profils sont quasiment confondus. La valeur maximale de w près de l'axe augmente à mesure que l'on s'éloigne de la source mais elle reste dans la plage des incertitudes expérimentales. L'approche GGD H montre une grande surestimation de la vitesse au voisinage de l'axe.

La figure 5.29 montre les profils de la fraction massique d'hélium Y et de l'énergie cinétique turbulente k . Près de l'axe la fraction massique prédite est beaucoup plus grande que celle mesurée. A $z = 0.2$ m, la valeur maximale est maintenue à 0.806 pour SGD H et 0.915 pour GGD H. La fraction massique d'hélium se dilue plus rapidement dans l'expérience que dans les simulations ce qui affecte bien entendu les résultats lorsque l'on s'éloigne de la source. A $z = 0.2$ m, l'énergie cinétique turbulente k est raisonnablement prédite avec SGD H près de l'axe ($r < 0.1$ m). Cependant, ce résultat n'a aucun impact sur la surestimation de la fraction massique d'hélium. Lorsque l'on s'éloigne de l'axe, le modèle SGD H sous-estime sa valeur tandis que l'approche GGD H améliore les prédictions de k mais la surestimation de Y est maintenue. L'évolution de l'énergie cinétique turbulente lorsque l'on s'éloigne de la source est bien capturée puisque le panache est plus turbulent en champ

lointain qu'en champ proche [98]. Pour $r > 0.15$ m, la vitesse axiale et la fraction massique montrent un bon accord avec l'expérience pour les deux approches SGDH et GGDH. Il en résulte que les instabilités liées aux différences de la masse volumique sont bien décrites.

En général, le modèle surestime la propagation verticale du panache mais sous-estime la diffusion horizontale (Tab. 5.8). Ceci a lieu quelque soit le niveau de turbulence donc de diffusion turbulente et le calcul est très peu influencé par la diffusion laminaire (pour un nombre de Schmidt variant de 0.2 à 1, résultats non présentés ici).

z (m)		Y_{max}	$r(Y_{max}/2)$ (m)	w_{max} (m/s)	$r(w_{max}/2)$ (m)	k_{max} (m ² /s ²)	$r(k_{max}/2)$ (m)
0.2	Exp	0.413	0.175	1.531	0.275	0.635	0.248
	SGDH	0.806	0.105	1.625	0.262	0.285	0.138
	GGDH	0.915	0.128	1.919	0.23	0.206	0.24
0.4	Exp	0.244	0.156	2.64	0.231	0.642	0.239
	SGDH	0.506	0.08	3.063	0.19	0.383	0.1
	GGDH	0.718	0.09	3.835	0.115	0.435	0.115
0.6	Exp	0.128	0.174	3.04	0.232	0.876	0.221
	SGDH	0.395	0.075	3.684	0.18	0.423	0.15
	GGDH	0.521	0.08	4.502	0.15	0.576	0.24

TAB. 5.8 – Valeurs maximales des grandeurs caractéristiques et de demi-largeur du panache de O'Hern et al.

Bien évidemment, ces quatre grandeurs (u , w , Y et k) sont liées. La sur-prédiction de la vitesse verticale au centre du panache est à relier à la surestimation de l'entraînement d'air à travers la conservation de la masse. L'excès de quantité de mouvement azimutale est convertie en quantité de mouvement verticale. L'hélium est alors concentré au centre du panache et transporté plus rapidement, donc plus loin dans le panache, qu'il ne l'est dans l'expérience, ce qui explique la sur-prédiction de la fraction massique d'hélium au centre du panache. Le mélange est toutefois bien reproduit sur les bords du panache comme l'atteste la bonne prédiction de la vitesse et de la concentration pour un rayon supérieur à 0.15 m. Pourtant, la sur-prédiction de l'entraînement d'air ne suffit pas à expliquer la forte concentration en hélium. En effet, la sous-prédiction de la densité qui en résulte alimente le moteur qu'est la convection naturelle, principal responsable de la propagation verticale du panache. Le fort couplage entre la concentration en hélium et la quantité de mouvement rend alors difficile la détermination du premier responsable de la déviation des résultats.

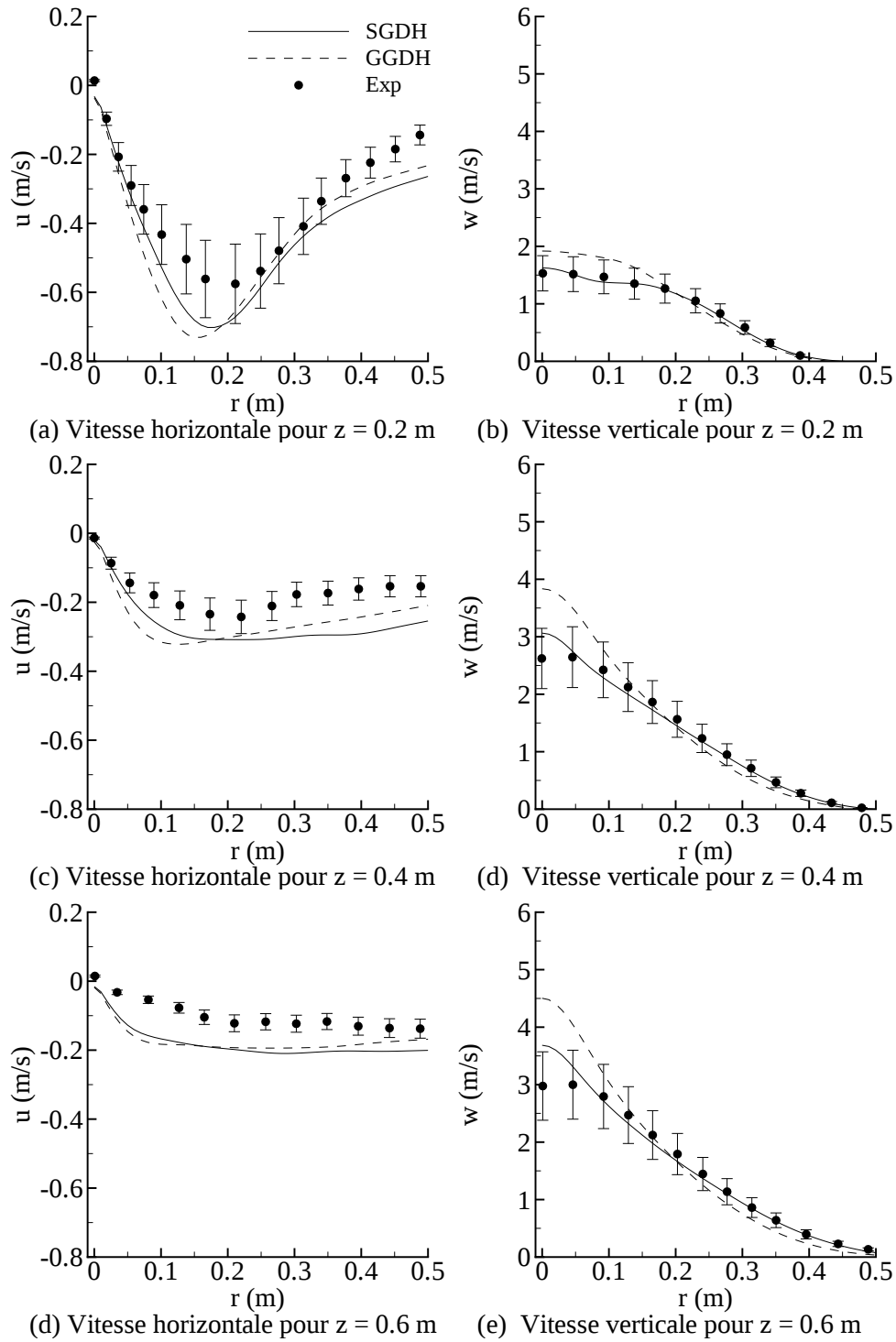


FIG. 5.28 – Comparaison entre l'approche du gradient simple et l'approche du gradient généralisé : profils radiaux des vitesses radiales u et axiales w à différentes hauteurs.

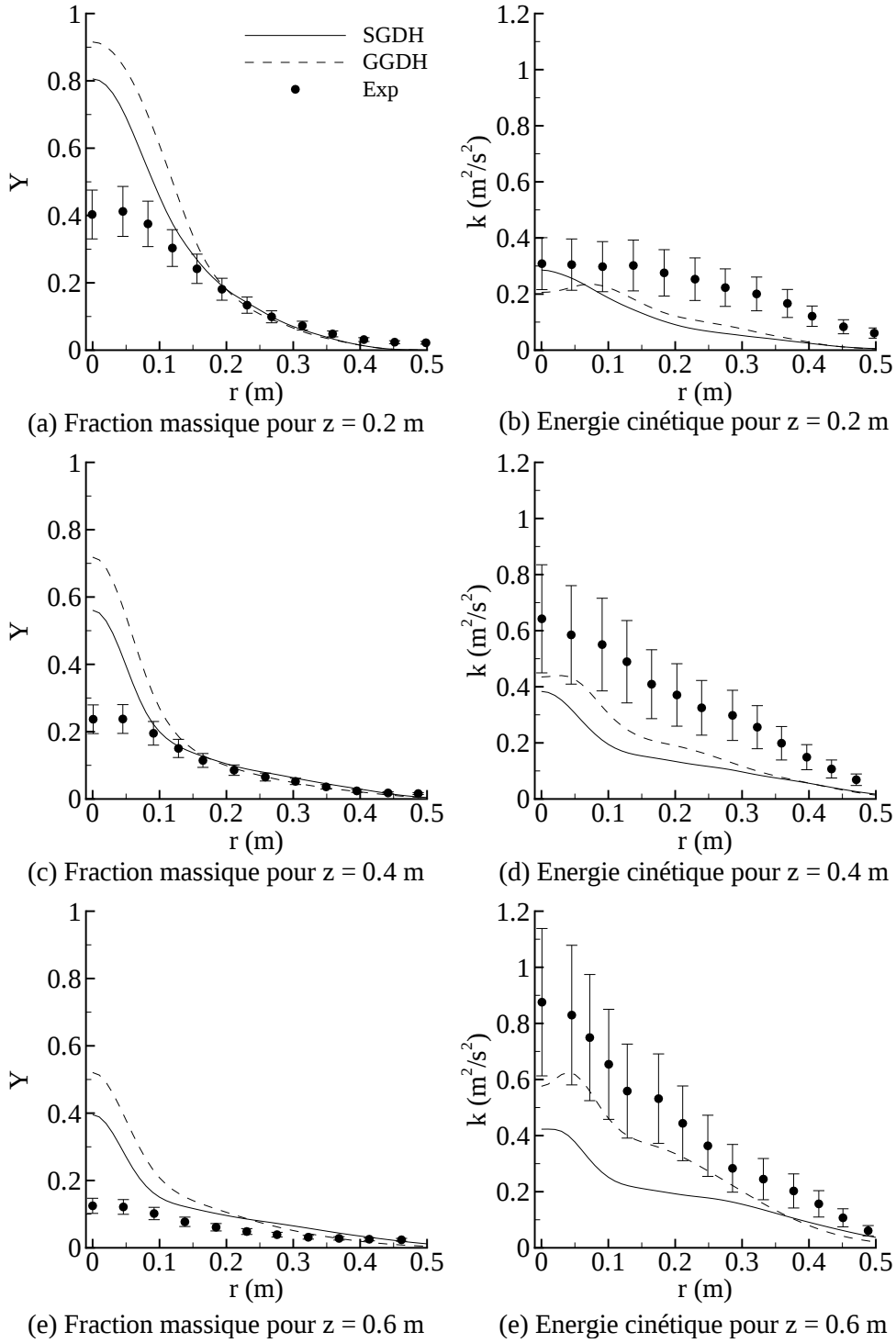


FIG. 5.29 – Comparaison entre l'approche du gradient simple et l'approche du gradient généralisé : profils radiaux de la fraction massique d'hélium Y et de l'énergie cinétique turbulente k .

La sous-prédiction de l'énergie cinétique turbulente pourrait en partie expliquer la sur-prédiction de la concentration en hélium. En effet, une faible turbulence est synonyme d'une faible dissipation et d'une faible viscosité turbulente. Le micro-mélange turbulent et la diffusion latérale du panache qui en résulte est alors sous-estimé. Cependant, le gain de turbulence apporté par le gradient généralisé ne permet pas d'augmenter le mélange par la turbulence. Au contraire, la concentration en hélium est même plus importante ce qui impacte également la propagation verticale du panache et l'entraînement d'air. En fait, on constate que la viscosité turbulente prédite par le GGDH dans les premières hauteurs ($z < 0.2$ m) est plus faible que celle prédite par le SGDH. La fraction massique d'hélium est moins diffusée ce qui explique la plus forte concentration. Contrairement au cas du panache de George et al. [38] (champ lointain), l'introduction du gradient généralisé n'améliore donc pas significativement les prédictions dans le champ proche. Cette observation a également été faite par Chung et Devaud [24].

La figure 5.30 présente une vue plus globale de la vitesse verticale le long de l'axe dans tout le panache. La prédiction globale de la vitesse est raisonnable permettant d'affirmer

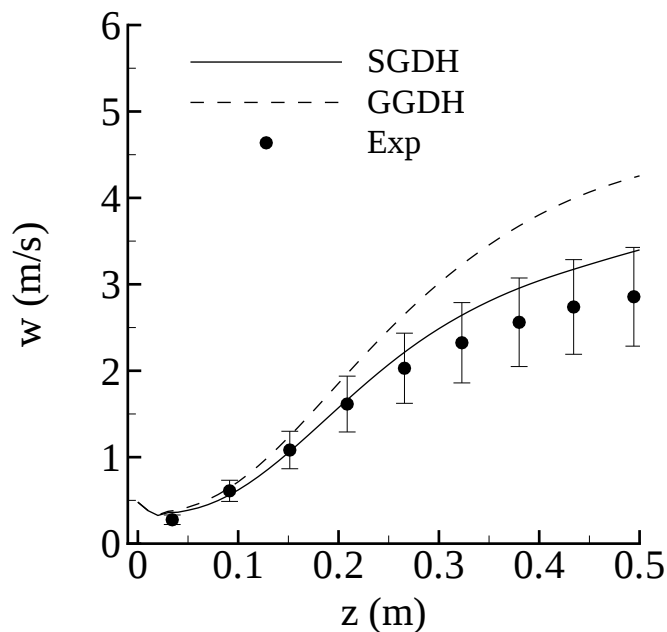


FIG. 5.30 – Vitesse verticale le long de l'axe.

que la transition laminaire-turbulent est relativement bien reproduite. En effet, outre le fait que la turbulence est tout le temps sous-prédite, son évolution suit celle relatée par les données expérimentales. L'énergie cinétique turbulente augmente bien le long du panache.

Ces dernières constatations suggèrent que le mélange par la dynamique de l'écoulement

est le principal responsable des écarts par rapport à l'expérience. Ceci est confirmé par la variance créée dans le domaine. L'évolution de la variance de la fraction massique d'hélium le long de l'axe est représentée sur la figure 5.31. Celle-ci est nulle dans les premières hauteurs et atteint un niveau maximale comparable à celui observé dans l'expérience mais à une hauteur bien supérieure à celle observée.

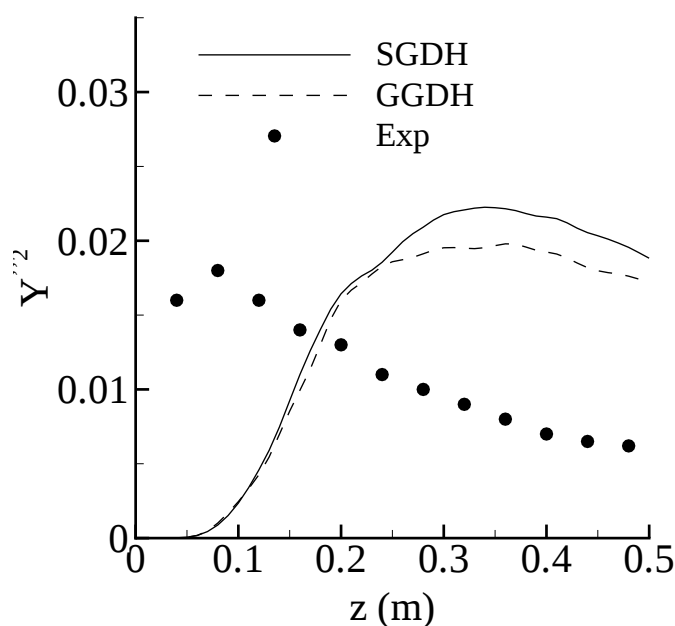


FIG. 5.31 – Variance de la fraction massique d'hélium le long de l'axe.

La variance est contrôlée par le gradient de fraction massique ainsi que la turbulence. Bien que sous-estimée, nous avons vu que la turbulence est raisonnablement bien prédite par le modèle. En revanche, la fraction massique d'hélium est très surestimée et sa dilution par l'air ambiant se produit pour des hauteurs supérieures à celles constatées dans l'expérience. Alors que la turbulence est suffisamment forte pour dissiper une éventuelle variance créée par le gradient de la moyenne, la forte concentration en hélium donne un gradient très faible près de la source. Le maximum du gradient de fraction massique est situé plus haut dans le panache, ce qui impacte directement la valeur de la variance créée. On retrouve encore l'impact d'un mélange sous-estimé sur les résultats.

Ces résultats sont d'une importance considérable pour la prédiction des feux. Ils suggèrent d'une part que les grandeurs scalaires, telles que la fraction de mélange, ne sont pas bien prédites au voisinage de l'axe, que les fluctuations de concentrations qui joueront un rôle dans l'évolution de la réaction chimique de combustion sont sous-prédites et que l'entraînement d'air, qui dans le cas d'un incendie assure l'apport d'oxygène vers la zone de réaction, est également mal prédit.

5.3.5 Conclusions sur l'étude d'un panache d'hélium instationnaire

Dans cette partie, le champ proche d'un panache a été étudié. Cette étude a permis de mettre en évidence plusieurs points :

- les différences entre les deux approches dilatable instationnaire sont minimales et leur utilisation est indispensable pour traiter ce type d'écoulement.

- les résultats sont fortement dépendants de la densité de mailles notamment près de l'axe. En accord avec les observations de Nicolette et al. [83] et de Tiezen et al. [118], il est de plus en plus difficile d'obtenir une solution convergée lorsque la densité de maille augmente.

- les résultats sont très sensibles à la constante de flottabilité $C_{\varepsilon 3}$. Bien que la meilleure valeur de cette constante permette d'obtenir des niveaux de turbulence satisfaisants par rapport à l'expérience, cela ne permet pas d'obtenir des valeurs de la fraction massique d'hélium et de sa variance en accord avec l'expérience en particulier près de la source du panache.

- les différences entre les deux approches SGDh et GGDh sont très faibles car il subsiste une forte hypothèse de turbulence isotrope. Il serait intéressant d'améliorer le calcul des flux turbulents à l'aide d'une fermeture GGDh [131], d'un modèle algébrique [47] ou en les transportant.

A la vue de cette étude, il apparaît que l'on prédit mal le comportement du panache près de la source, en particulier, la fraction massique d'hélium et par conséquent sa variance. Cet aspect est fondamental dans la modélisation des feux et peut avoir un impact non négligeable sur les prédictions dans le cas de flammes d'incendies.

Chapitre 6

Application aux flammes turbulentes de diffusion à bas nombre de Froude

Après avoir étudié le comportement du code sur la dynamique et la turbulence développées dans des écoulements non réactifs proches de ceux rencontrés dans un incendie, nous abordons maintenant le traitement de configurations caractéristiques du feu. Deux expériences sont simulées, un feu de nappe en milieu ouvert et un feu de compartiment.

Les feux de nappe en milieu ouvert sont très utilisés par les expérimentateurs car ils permettent d'étudier le comportement de la flamme sans les interactions induites par la présence des parois du compartiment. Les expériences concernent le plus souvent des flammes de moyennes puissances réalisables en laboratoire. Les combustibles utilisés sont soit des hydrocarbures liquides comme l'heptane soit des combustibles gazeux injectés à travers des brûleurs poreux. Cette dernière méthode permet d'obtenir un débit de combustible réaliste par rapport aux débits de pyrolyse rencontrés dans les feux tout en évitant son interaction avec le flux radiatif émis par la flamme. La simulation de ce type d'expérience permet de vérifier que le code prédit correctement la dynamique de l'écoulement, la turbulence générée par la flamme, la bonne représentation de la combustion et des transferts radiatifs dans la flamme. Bien que le code prédit relativement bien les écoulements dans les panaches, l'introduction de la combustion et du rayonnement amène de nouvelles difficultés concernant la sensibilité au maillage, la prédiction de la turbulence et le rayonnement de la flamme.

Le feu de compartiment étudié est largement présent dans la littérature car l'essai est relativement simple, d'échelle moyenne et est assez représentatif des phénomènes rencontrés dans une configuration réelle. Il permet de tester la représentation des couplages induits par la présence des parois tels que le rayonnement de la couche de fumées piégée dans le compartiment, le rayonnement des parois et l'entraînement d'air à travers l'ouverture, paramètres clés dans l'évolution des feux de compartiment.

6.1 Feu de nappe en milieu ouvert

Le but de cette section est de confronter les résultats obtenus par *Code_Saturne* aux résultats expérimentaux de Gengembre et al. [37]. La configuration est relative à des feux de nappe générés par un brûleur de propane de 30 cm de diamètre dans un espace libre. Le débit de combustible est réglé pour fournir trois puissances de 15.8, 22.9 et 37.9 kW. Les résultats fournis sont les vitesses, températures et fractions massiques des espèces majoritaires le long de l'axe. Des profils radiaux de la température sont également disponibles. Les flux radiatifs émis par la flamme sont fournis pour différentes positions par rapport à la flamme.

6.1.1 Conditions de calculs

Pour les simulations, un domaine de calcul tridimensionnel de taille $2.4 \times 2.4 \times 1.5$ m a été considéré. Les conditions limites utilisées sont présentées sur la figure 6.1.

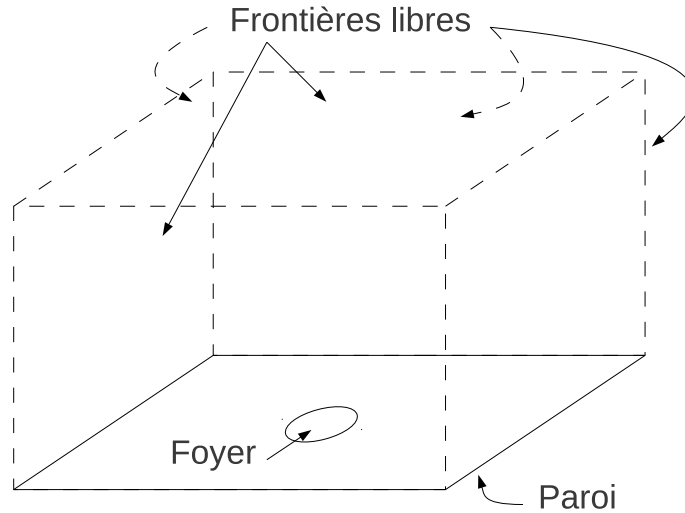


FIG. 6.1 – Conditions limites pour l'expérience de Gengembre et al.

Un modèle de flammelettes avec une hypothèse de chimie infiniment rapide est utilisé demandant le transport de la fraction de mélange et de sa variance. Pour les calculs avec rayonnement, la méthode des ordonnées discrètes est utilisée avec 128 directions. Le modèle de rayonnement utilise les régressions de Modak [76] qui fournit un coefficient d'absorption moyen dépendant des fractions massiques de CO_2 , H_2O et de la fraction volumique de suies. Le modèle de suies utilisé est le modèle de Moss et al. [80]. Les conditions de calculs sont résumées dans le tableau 6.1.

Quatre maillages rectilignes non uniformes ont été utilisés. Les maillages sont réguliers au-dessus du brûleur c'est-à-dire pour $(x, y, z) < D$ puis sont relâchés dans les trois directions. Le tableau 6.2 présente le nombre de mailles global ainsi que le nombre de mailles

Conditions initiales	$P_0 = 101325 \text{ Pa}$ $T_0 = 303.15 \text{ K}$ $z = z''^2 = 0$	$k_0 = 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}^2$ $\varepsilon_0 = 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}^3$ $f_{vs} = n_s = 0$
Conditions d'injection	$D = 0.30 \text{ m},$ $\dot{Q} = 15.8, 22.9 \text{ ou } 37.9 \text{ kW}$ $z = 1$ $z''^2 = 0$	$k_{inj} = 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}^2$ $\varepsilon_{inj} = 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}^3$ $f_{vs} = 0$ $n_s = 0$
Propriétés physiques	$\mu = \mu_{air}(T)$	$C_p = C_p(f, T)$

TAB. 6.1 – Conditions de calcul pour l'expérience de Gengembre et al.

et la taille de maille dans la zone régulière.

Maillages	Nombre de mailles global	Nombre de maille pour $x < D, y < D$ et $z < D$	Taille de maille $\Delta x = \Delta y = \Delta z$
M1	$24 \times 24 \times 28 = 16128$	$10 \times 10 \times 10 = 1000$	3 cm
M2	$30 \times 30 \times 35 = 31500$	$15 \times 15 \times 15 = 3375$	2 cm
M3	$90 \times 90 \times 60 = 486000$	$30 \times 30 \times 30 = 27000$	1 cm
M4	$130 \times 130 \times 90 = 1521000$	$60 \times 60 \times 60 = 216000$	0.5 cm

TAB. 6.2 – Discrétisation pour l'expérience de Gengembre et al.

Les résultats présentés sont des moyennes réalisées sur 20 secondes à partir du moment où le régime permanent est atteint soit 20 secondes de simulation.

6.1.2 Sensibilité au maillage

La figure 6.2 présente les profils axiaux de vitesse et de température pour les différents maillages. Les résultats montrent que le comportement de la solution est intensément sensible au maillage. Le diagnostic de cette dépendance est très complexe du fait qu'on est en présence d'une configuration qui fait intervenir un nombre important de phénomènes physiques fortement couplés.

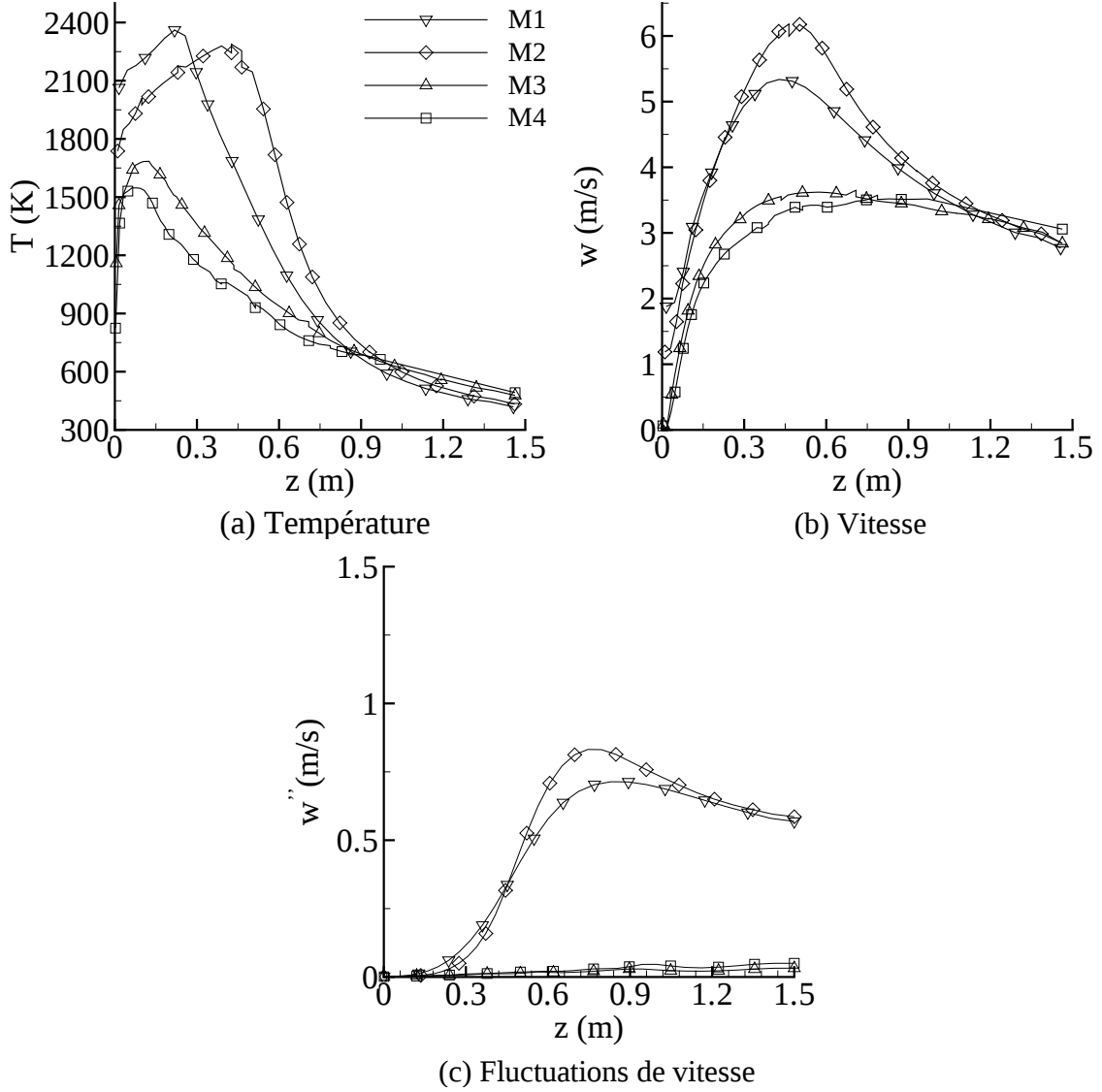


FIG. 6.2 – Profils moyens axiaux de température, de vitesse et de fluctuations pour les quatre maillages ($\dot{Q} = 22.9 \text{ kW}$)

Comme le panache d'hélium de O'Hern et al. [86] précédemment discuté, la flamme de Gengembre et al. comme toutes les flammes turbulentes de diffusion sont des phénomènes

fondamentalement stationnaires. Leur résolution est donc fortement liée à la discrétisation utilisée. La tendance présentée par la figure 6.2 peut se décomposer en deux parties caractérisées par la position et le niveau du maximum de température et fluctuations de vitesse moyennes.

Pour une taille de maille supérieure à 2 cm, la position du maximum de température augmente, la température maximale gardant une valeur constante. Pour les maillages plus fins, cette position varie peu, en revanche, la valeur de la température maximale diminue fortement (Fig. 6.2.a). Concernant la vitesse (Fig. 6.2.b), la position du maximum ne suit pas d'évolution particulière. Par contre, le niveau des fluctuations de vitesse est nul pour les maillages les plus fins (Fig. 6.2.c). Le changement de comportement entre une taille de maille de 2 et 1 cm peut s'expliquer en observant la production de turbulence (Fig. 6.3) et la dynamique de la flamme (Fig. 6.4).

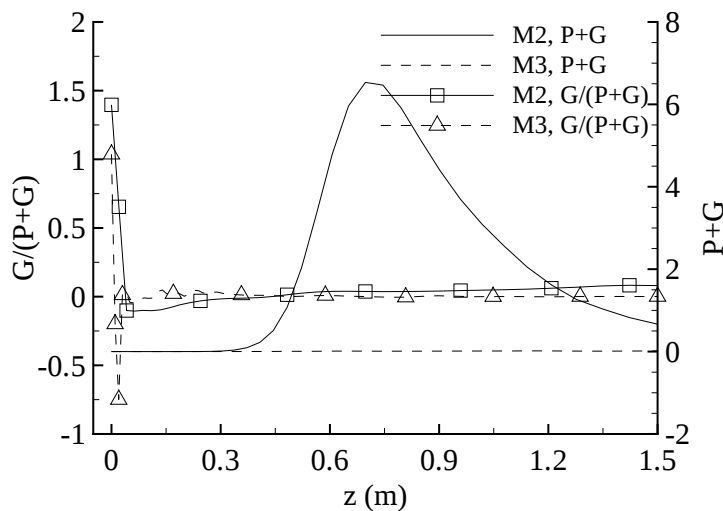


FIG. 6.3 – Production d'énergie cinétique turbulente le long de l'axe pour les maillages M2 et M3 : contribution de la flottabilité $G/(P+G)$ et production totale $P+G$.

Qualitativement, on constate que la production de turbulence dans la zone de flamme ($z < 0.3$ m) est nulle quelque soit le maillage et augmente dans la zone intermittente. Cette observation a déjà été faite sur le panache d'hélium. A l'inverse, pour les deux maillages, la contribution de la flottabilité ne s'observe que dans la zone de flamme alors qu'elle joue un rôle dans tout le panache d'hélium.

Quantitativement, dans la zone près de la source, la contribution de la flottabilité est bien supérieure à celle observée dans le panache d'hélium. En revanche, rapidement, celle-ci devient nulle, ce qui n'est pas aussi marqué que pour le panache d'hélium. Pour les maillages grossiers, la production maximale de turbulence est bien supérieure à celle observée dans le panache d'hélium. En revanche, pour les maillages fins, celle-ci est nulle. Ce comportement n'est pas encore expliqué mais permet de comprendre la dynamique de la flamme (Fig. 6.4) et donc les résultats moyens obtenus.

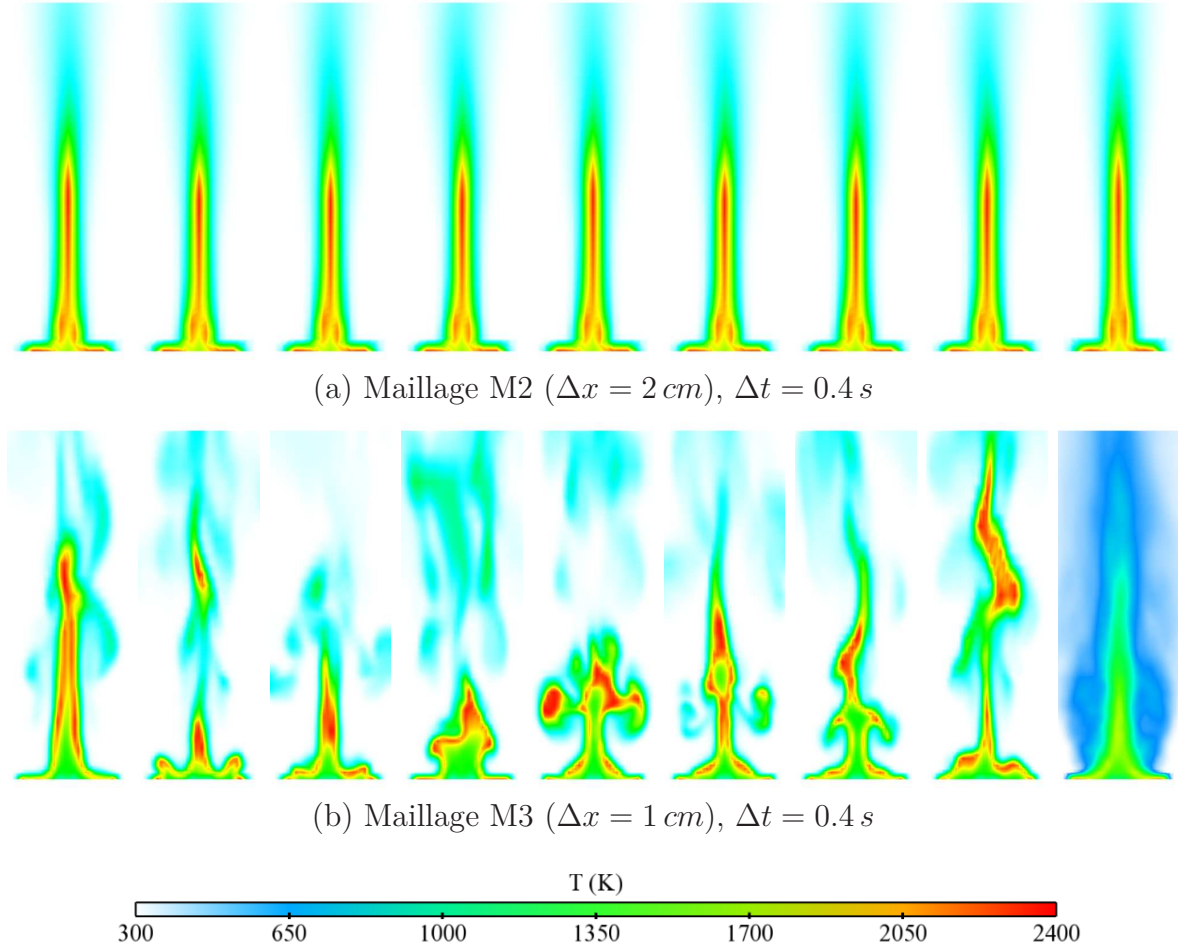


FIG. 6.4 – Champs **instantanés** et **moyens** (dernière image) de température pour les maillages M2 de 2 cm et M3 de 1 cm ($\dot{Q} = 22.9 \text{ kW}$).

Pour les maillages grossiers (M1 et M2), la flamme est globalement stationnaire du fait d'une forte diffusion par la turbulence. Les oscillations observées ne concernent que le panache. Pour les maillages les plus fins, la flamme passe dans un régime d'oscillations différent car la turbulence n'est pas assez importante pour amortir les instabilités de l'écoulement. Dans ce cas, la température moyenne est plus basse en raison du passage intermittent des produits de combustion et de l'air frais entraîné par la flamme.

Ces deux types d'oscillations ont été observés par Cetegen et al. [18]. Les auteurs ont étudié la dynamique d'une flamme de diffusion de propane de 0.8 kW à 2.4 kW stabilisée sur une source de diamètre allant de 2.5 à 10.2 cm. Selon le diamètre utilisé, les oscillations de la flamme sont de deux modes différents : un mode dit variqueux et un mode dit sinueux (Fig. 6.5).

Dans le mode variqueux, on observe successivement des contractions et dilatations de

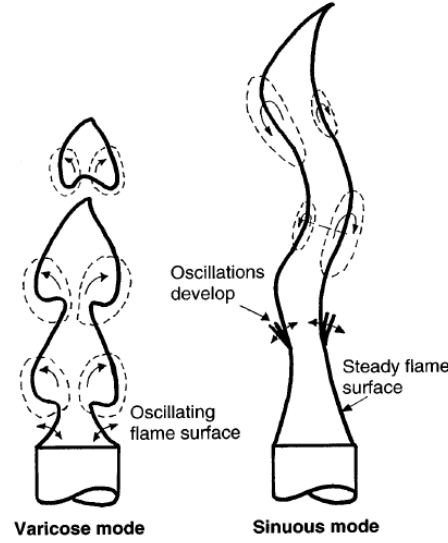


FIG. 6.5 – Les deux modes d’oscillations d’une flamme turbulente de diffusion

l’écoulement près de la source. Il se forme alors des structures toroïdales axisymétriques qui se détachent à une distance de deux diamètres environ. Dans le mode sinueux, la flamme ondule autour de son axe vertical au-dessus d’une zone où la flamme est stable. Cetegen et al. [18] ont montré que le régime d’oscillation est dépendant du nombre de Richardson quantifiant le rapport entre les forces de flottabilité et les forces inertielles :

$$Ri = \frac{\Delta\rho g D}{\rho w^2} \quad (6.1)$$

Pour les grands nombres de Richardson, la flamme se contracte rapidement sous l’effet des forces de flottabilité de la même manière que le panache d’hélium de O’Hern et al. alors que cet effet est faible dans le cas de nombres de Richardson faibles. Le mode sinueux n’est quasiment jamais observé sur des panaches d’hélium car la flottabilité est maximale près de la source favorisant le mode variqueux [18]. En revanche, si les conditions d’injection le permettent (plus faible diamètre, plus forte vitesse d’injection), le temps de mélange est suffisamment grand pour que la réaction chimique soit retardée et que la flottabilité soit maximale plus loin de la source. Dans ce cas, la flamme est canalisée par l’air ambiant entraîné et les oscillations sont de plus faible amplitude.

Dans notre étude, le nombre de Richardson est de l’ordre de 10^5 , le mode attendu est alors le mode variqueux observé sur les maillage les plus fins. Wen et al. [127] montrent également ce type d’oscillations sur une flamme de méthanol de 24.6 kW.

Ces résultats suggèrent que le modèle de turbulence dégénère sur une solution laminaire et que l’on retrouve l’énergie cinétique turbulente dans les fortes instabilités observées. Pour vérifier cette hypothèse, les fluctuations de vitesse liées aux instabilités résolues $u''_{i,res}$ sont ajoutées aux fluctuations de vitesse liées à la turbulence $u''_{i,turb}$ pour calculer les fluctuations

totales de vitesse u_i'' :

$$u_i'' = u_{i,res}'' + u_{i,turb}'' = \sqrt{(\tilde{u}_i - \langle \tilde{u}_i \rangle)^2} + \sqrt{\frac{2}{3}k} \quad (6.2)$$

avec $\langle . \rangle$ la moyenne temporelle, et sont comparées aux fluctuations de vitesse mesurées (Fig. 6.6) pour les maillages M2 et M3.

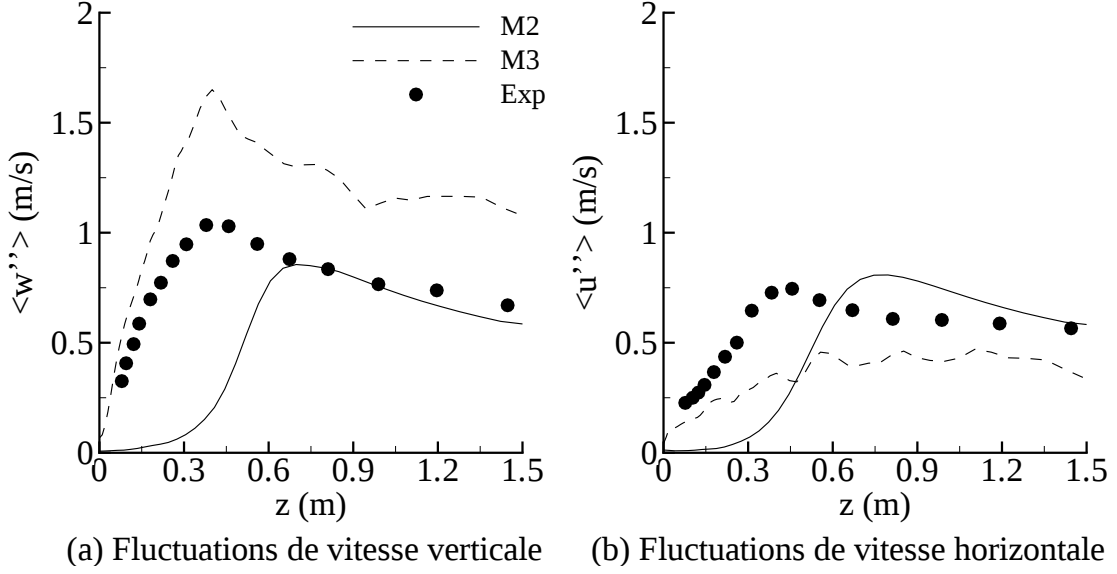


FIG. 6.6 – Fluctuations totales de vitesse le long de l'axe pour les maillages M2 et M3 ($\dot{Q} = 22.9 \text{ kW}$).

Tout d'abord, on remarque que l'on capte une anisotropie de l'écoulement sur le maillage M3 liée aux structures qui se développent au-dessus du brûleur. Ensuite, alors que sur le maillage M2, les fluctuations sont nulles dans la zone de flamme persistante, leur niveau est raisonnablement représenté sur le maillage M3. Par contre, elles sont rapidement sur-estimées pour la composante verticale et sous-estimées pour la composante radiale.

Ce comportement du modèle est assez inattendu compte tenu des résultats obtenus sur les cas précédents et n'est pour l'instant pas expliqué. Les mêmes résultats sont obtenus avec un modèle de turbulence au second ordre ($R_{ij} - \varepsilon$) pour le calcul des tensions de Reynolds. Les conditions limites pour les grandeurs turbulentes à la surface des brûleurs poreux que nous avons utilisées sont des conditions laminares. Cependant, les gradients de vitesse à la surface du brûleur, existant entre les pores et le solide, contribuent certainement à la production de turbulence. Ayant utilisé un profil de vitesse homogène, ces gradients de vitesses ne sont pas représentés. Une telle description de l'écoulement demande une discrétisation très coûteuse en temps de calcul et ne sera pas utilisée ici. Cependant, elle permettrait de définir des conditions limites plus appropriées pour l'énergie cinétique

turbulente et sa dissipation.

McGrattan et al. [75] à l'aide de leur code LES, FDS, ont déterminé un critère pour la taille de maille pour garantir une bonne résolution de l'écoulement déterminé par le rapport entre la taille de la maille dans la flamme et la dimension caractéristique du feu :

$$4 < \frac{D^*}{\Delta x} < 16 \text{ avec } D^* = \frac{\dot{Q}}{\rho_0 C_p T_0 \sqrt{g}} \quad (6.3)$$

Cependant, Ma et Quintiere [67], toujours avec FDS, ont estimé que le rapport $R^* = \Delta x/D^*$ devait être au moins de 0.05, soit $D^*/\Delta x = 20$ qui est la valeur trouvée sur notre cas avec une taille de maille de 1 cm. Par la suite, le maillage utilisé est le maillage M3 de 1 cm.

6.1.3 Effet de la dilatation sur les grandeurs moyennes

La figure 6.7 présente les champs de température instantanés pour les deux schémas, incompressible et dilatable. Tout comme nous l'avons observé sur le panache d'hélium de O'Hern et al. [86], un traitement incompressible de l'équation de continuité donne une flamme globalement stationnaire. En revanche, la prise en compte de la dilatation permet de capturer le comportement instationnaire de la flamme évoqué par Cetegen et al. [18].

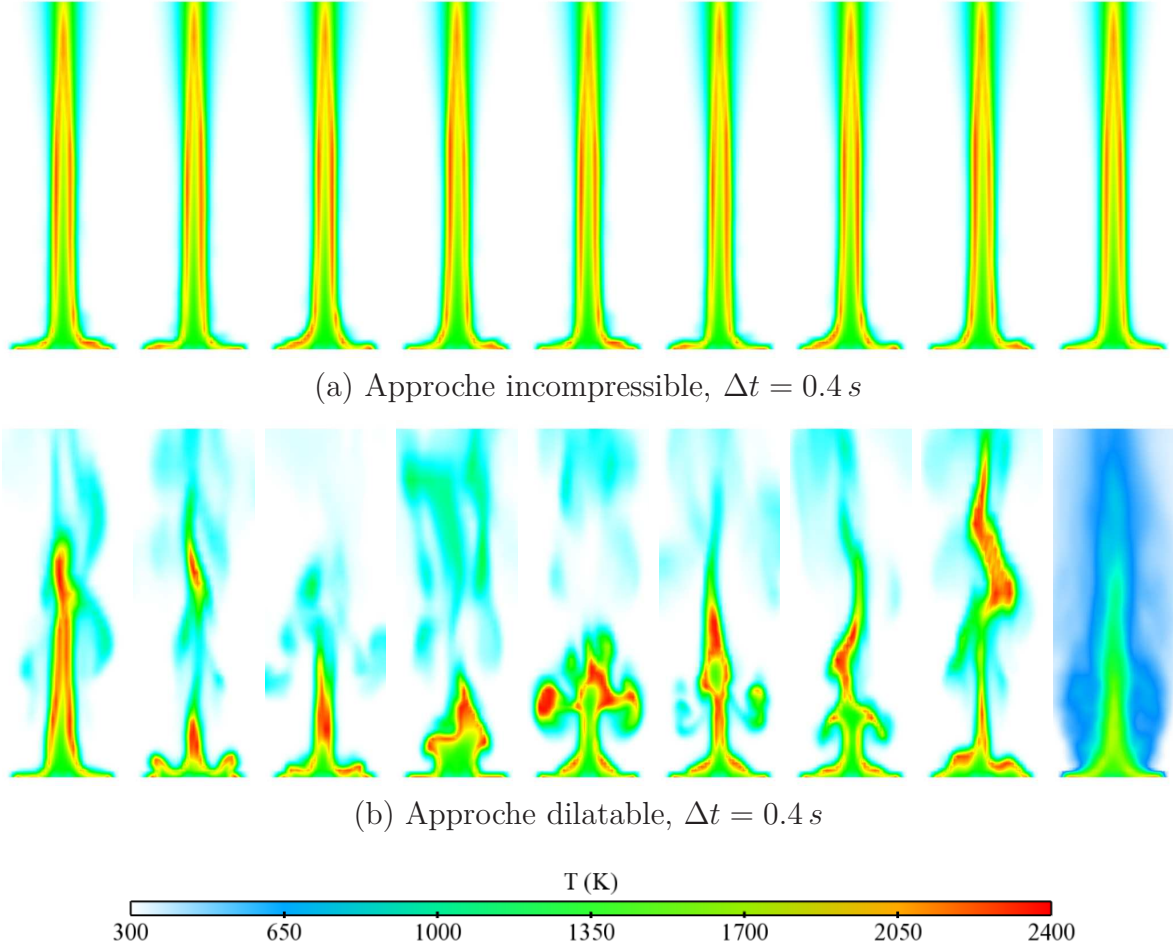


FIG. 6.7 – Champs **instantanés** et **moyens** (dernière image) de température pour les schémas incompressible et dilatable ($\dot{Q} = 22.9 kW$).

La hauteur moyenne de la flamme est alors plus faible et les grandeurs moyennes le long de l'axe sont plus proches de celles mesurées par Gengembre et al. [37]. Ces dernières sont présentées sur la figure 6.8 pour les deux schémas et montre que le traitement de la dilatation est indispensable pour les flammes à bas nombre de Froude. La figure 6.9 présente l'effet de la dilatation sur les fluctuations totales de vitesse le long de l'axe. Comme sur

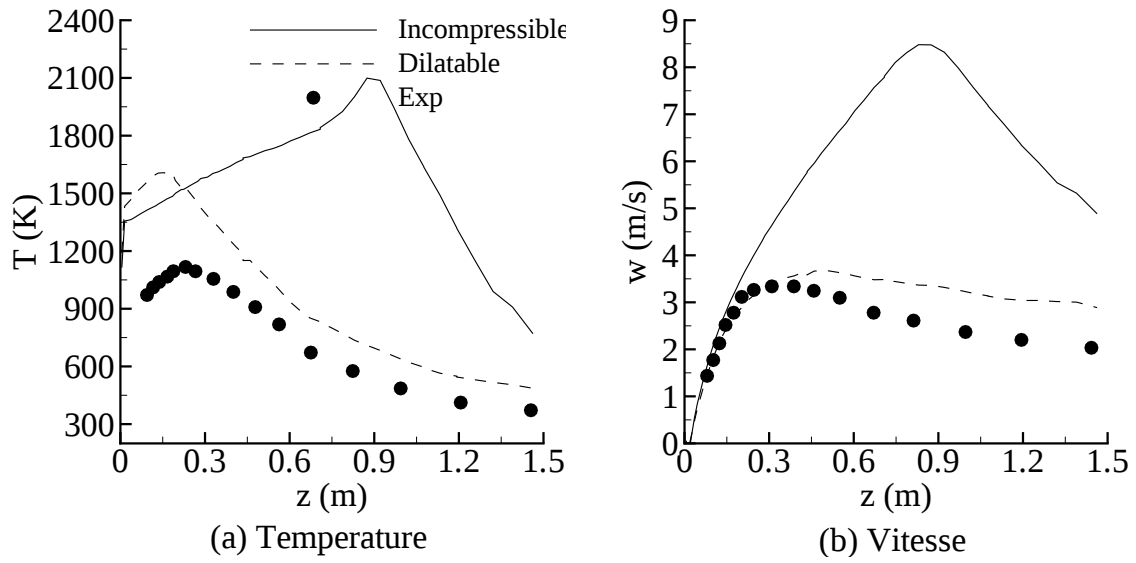


FIG. 6.8 – Effet de la dilatation sur les grandeurs moyennes : profils de vitesse et température le long de l'axe ($\dot{Q} = 22.9 \text{ kW}$).

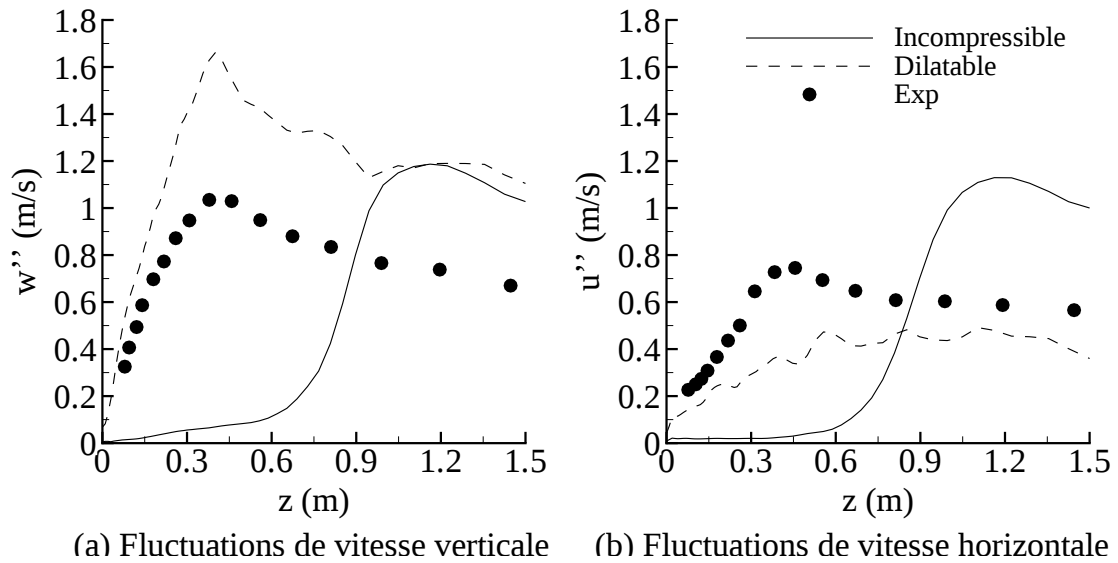


FIG. 6.9 – Effet de la dilatation sur les grandeurs turbulentes : Fluctuations totales de vitesse le long de l'axe ($\dot{Q} = 22.9 \text{ kW}$).

les maillages plus grossiers, les fluctuations de vitesse sont fortement sous-estimées dans la zone de flamme. Cela confirme que le défaut de turbulence n'est pas dû à un maillage trop grossier et montre que le gain de fluctuations est apporté par la prise en compte de la dilatation.

6.1.4 Influence du terme de flottabilité

Nous avons vu que le maillage a une grande influence sur les prédictions. Cette dépendance est liée uniquement à la résolution de la dynamique de l'écoulement. En effet, le niveau de turbulence reste faible. Les températures instantanées sont toujours autour de la valeur laminaire, mais les instabilités captées sur les maillages les plus fins permettent un meilleur mélange. Ainsi, en moyenne, les températures obtenues sont plus faibles.

Afin d'augmenter le niveau de turbulence dans la zone de flamme persistante, l'effet de la constante $C_{\varepsilon 3}$ a été étudié en accord avec les résultats obtenus sur le panache de O'Hern et al., et comme précédemment, il a été constaté une forte influence de cette constante (Figs. 6.10). En revanche, la fermeture du terme de flottabilité par la formulation GGDH conduit à une divergence du calcul.

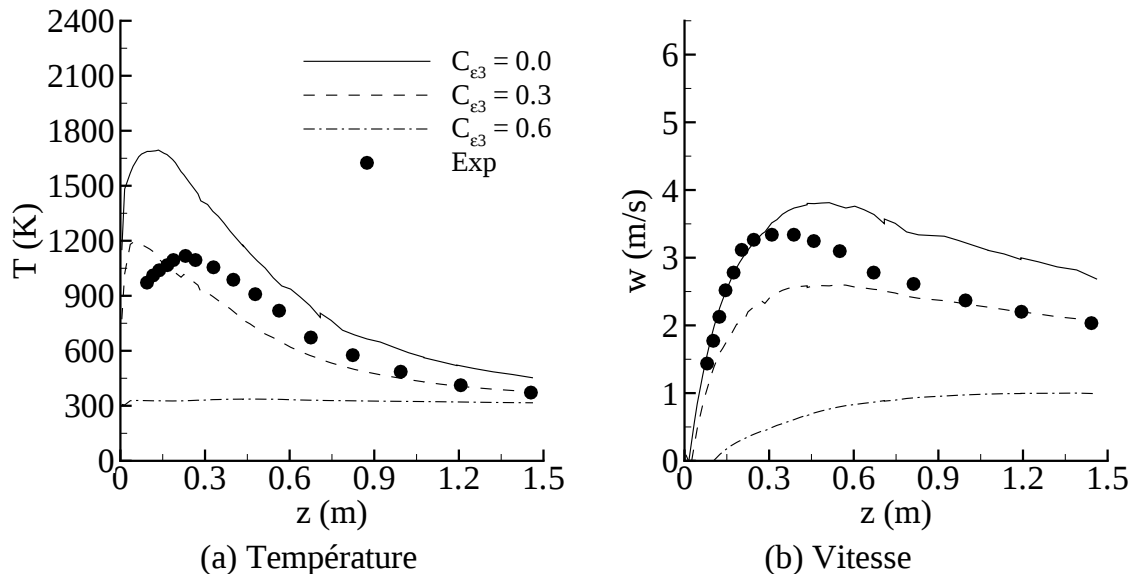


FIG. 6.10 – Sensibilité à la constante $C_{\varepsilon 3}$: profils de vitesse et température le long de l'axe ($\dot{Q} = 22.9 \text{ kW}$).

La figure 6.11 présente le terme de production de turbulence le long de l'axe ainsi que la contribution de la flottabilité à cette production. La figure 6.12 présente les fluctuations de vitesse verticale ainsi que la contribution de l'énergie cinétique turbulente le long de l'axe. Pour une constante $C_{\varepsilon 3}$ de 0.0, les résultats présentés sont les résultats commentés dans les sections précédentes. Pour une constante $C_{\varepsilon 3}$ de 0.3, la production de turbulence est accrue (Fig. 6.11.a) ce qui se traduit par des fluctuations totales de vitesse (Fig. 6.12.a) et surtout une énergie cinétique turbulente (Fig. 6.12.b) plus importantes quelque soit la hauteur considérée. Pour une constante $C_{\varepsilon 3}$ de 0.6, la production de turbulence est encore plus importante dans la zone de flamme persistante, ce qui se traduit par des fortes fluctuations de vitesse (totales et turbulente), elle est au contraire faible dans le panache, ce qui se traduit par de faibles fluctuations de vitesse.

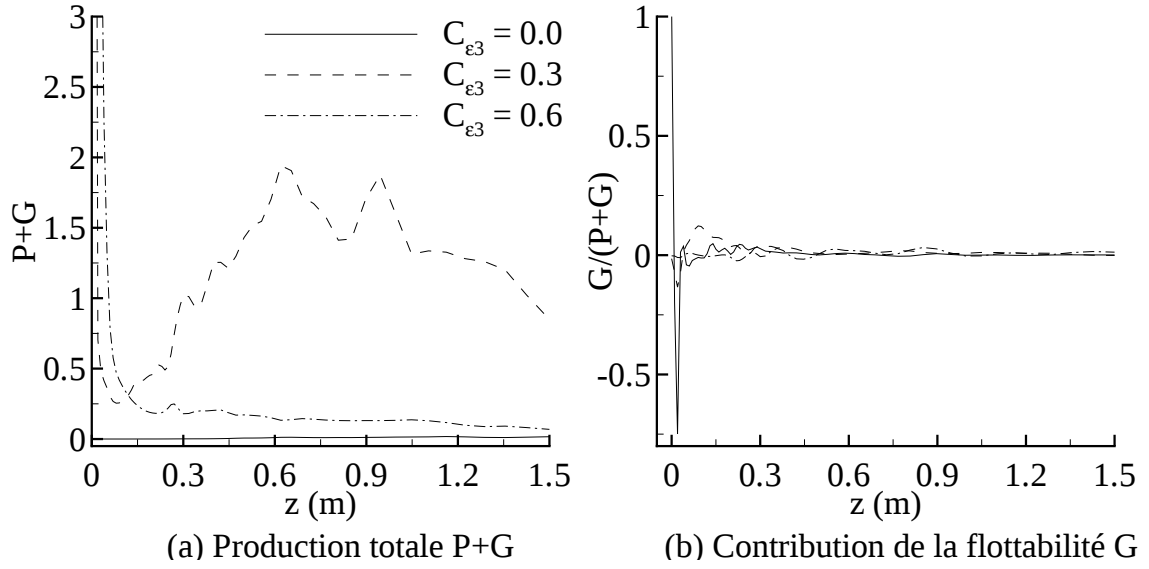


FIG. 6.11 – Sensibilité à la constante $C_{\epsilon 3}$: Production d'énergie cinétique turbulente le long de l'axe : production totale $P+G$ et contribution de la flottabilité $G/(P+G)$ ($\dot{Q} = 22.9 \text{ kW}$).

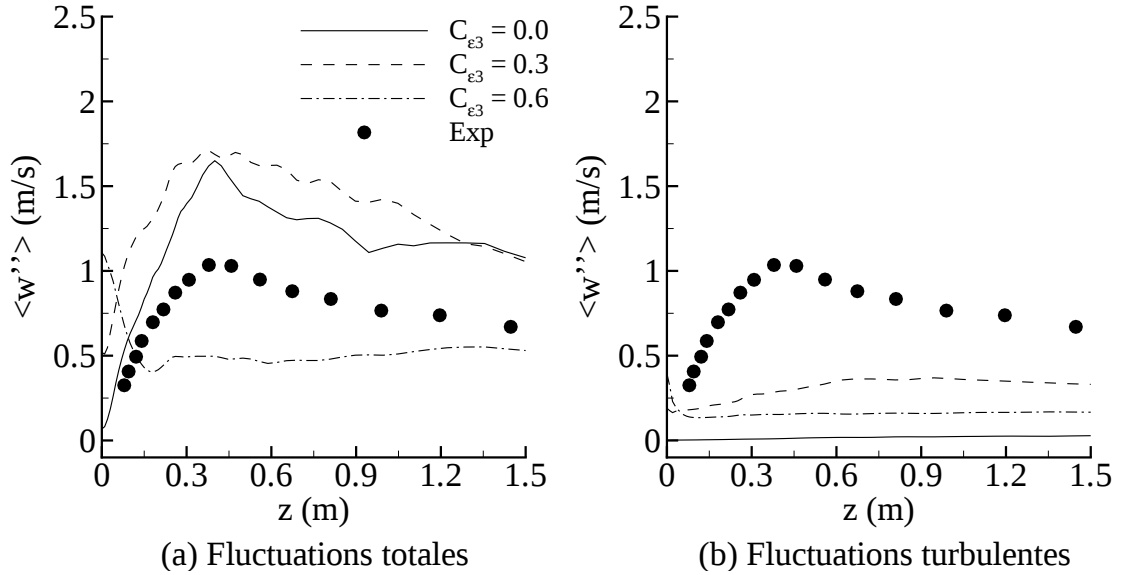


FIG. 6.12 – Sensibilité à la constante $C_{\epsilon 3}$: Fluctuations de vitesse verticale le long de l'axe : fluctuations totales et contribution turbulente ($\dot{Q} = 22.9 \text{ kW}$).

L'effet de la constante $C_{\varepsilon 3}$ sur la température et donc la vitesse s'explique par l'interaction de la turbulence avec la flamme. Les fluctuations turbulentes traduisent le passage intermittent de gaz riches et de gaz pauvres, qui en moyenne, produisent une flamme moins chaude. Si l'énergie cinétique turbulente devient trop importante, en particulier dans la zone de flamme persistante pour une constante $C_{\varepsilon 3}$ de 0.6, les températures obtenues sont si faibles, que les forces de flottabilité deviennent nulles et n'accélèrent pas les gaz de combustion. La production de turbulence par les gradients de vitesse moyenne et par la flottabilité n'est alors plus assurée ce qui explique la faible production de turbulence dans le panache pour cette valeur de la constante.

Pour des valeurs modérées de la constante $C_{\varepsilon 3}$, l'effet recherché, à savoir une turbulence plus importante, est donc obtenu. Cependant, si, en moyenne, une valeur de 0.3 permet d'obtenir des températures moyennes en accord avec l'expérience, la structure de la flamme est dégradée. En particulier, la flamme devient fortement instationnaire et la zone de flamme persistante disparaît périodiquement avec une fréquence inférieure à 1 Hz, fréquence qui est trop basse pour correspondre au battement naturel de la flamme. La figure 6.13 présente des vues instantanées du champ de température pour les trois valeurs de la constante $C_{\varepsilon 3}$ illustrant ce comportement.

Ces résultats nous amène à conserver la formulation gradient simple avec une constante $C_{\varepsilon 3}$ nulle pour la suite de cette étude.

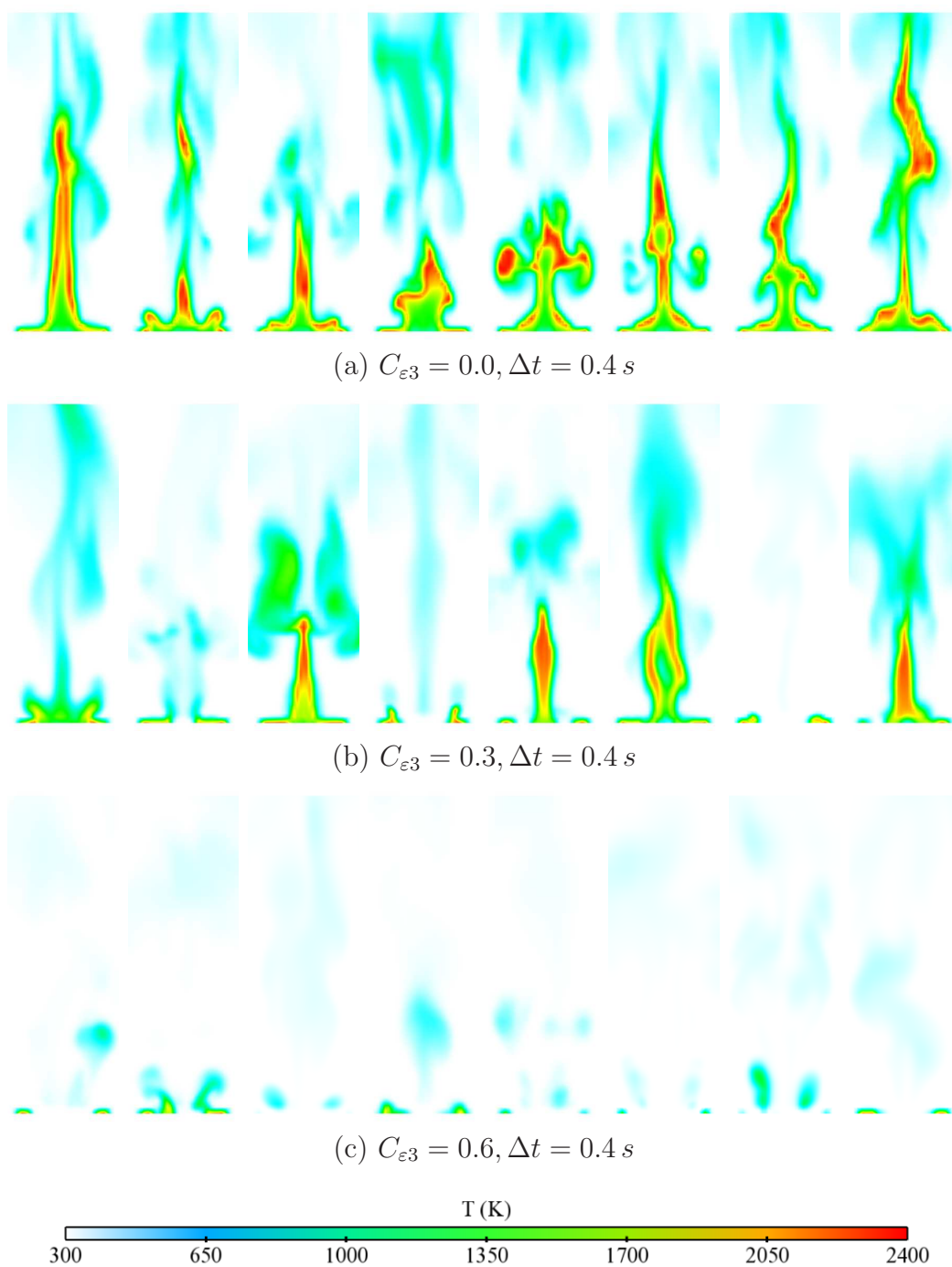


FIG. 6.13 – Sensibilité à la constante $C_{\epsilon 3}$: champs instantanés de température ($\dot{Q} = 22.9 \text{ kW}$).

6.1.5 Influence du rayonnement

Dans le modèle de rayonnement à larges bandes de Modak [76], une longueur d'atténuation moyenne doit être spécifiée. En considérant une géométrie cylindrique pour la flamme de rayon R et de hauteur h , la relation fournie par Modest [77] donne :

$$\tau = 3.6 \frac{V_f}{S_f} = 3.6 \frac{\pi R^2 h}{2\pi R h} \sim 0.3 \text{ m} \quad (6.4)$$

Les constantes utilisées dans le modèle semi-empirique de suies sont les constantes du méthane. En effet, ces constantes ne sont disponibles que pour le méthane [115], l'éthylène [80], le propylène et le méthylméthacrylate (MMA) [79]. Les trois derniers combustibles possèdent des double-liaisons $C = C$ favorisant la formation des suies. En revanche, le propane ne possède que des liaisons simples comme le méthane. Les constantes de ce dernier sont donc utilisées.

Sur la figure 6.14 sont présentées les températures moyennes le long de l'axe obtenues par un calcul adiabatique, un calcul tenant compte du rayonnement du gaz uniquement et un calcul tenant compte du rayonnement du gaz et des suies.

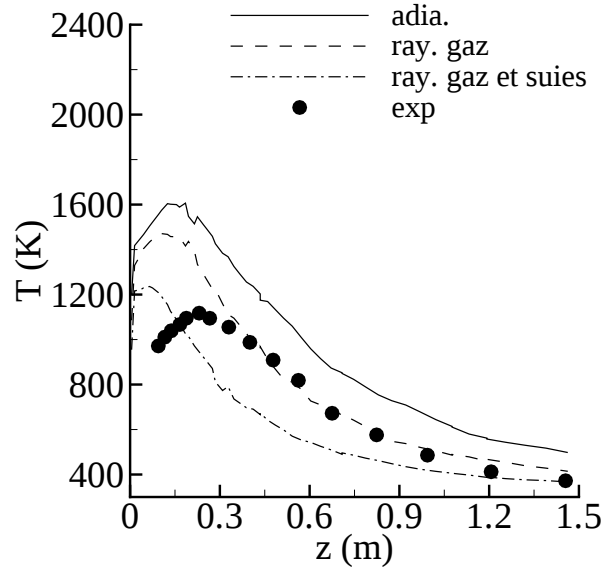


FIG. 6.14 – Contributions du gaz et des suies dans l'effet du rayonnement de la flamme : température moyenne le long de l'axe ($\dot{Q} = 22.9 \text{ kW}$).

Dans la flamme, une partie de l'énergie libérée par la combustion est absorbée par le gaz et les suies. Cette part de l'énergie ne contribue donc pas à l'échauffement du milieu et explique la diminution de la température moyenne. La contribution des suies à cette diminution est plus importante dans la zone de flamme persistante, car elles sont

assimilables à un corps noir et donc absorbent plus d'énergie que le gaz, surtout dans cette zone où la fraction volumique de suies est la plus importante. Cependant, la température reste surestimée dans la flamme et est maintenant sous-estimée dans le panache.

Le rayonnement prédit est fortement dépendant de la fraction massique de suies calculées. Aucune donnée ne sont fournies par Gengembre et al. [37] pour vérifier la quantité de suies prédite par le modèle. Cependant, il est communément admis que la fraction volumique de suies est de l'ordre de 10^{-6} à $10^{-7} \text{ m}^3/\text{m}^3$ soit une fraction massique de suies de l'ordre de 10^{-3} à 10^{-4} kg/kg . La figure 6.15 présente le champ moyen de fraction massique de suies montrant que leur formation est surestimée ($\tilde{Y}_s = 5.10^{-3} \text{ kg/kg}$ dans la flamme persistante) favorisant ainsi la diminution de la température moyenne. Dans le présent modèle, l'oxydation des suies par les radicaux OH ainsi que l'effet de la turbulence sur la formation des suies ne sont pas considérés et peuvent jouer un rôle dans cette surestimation.

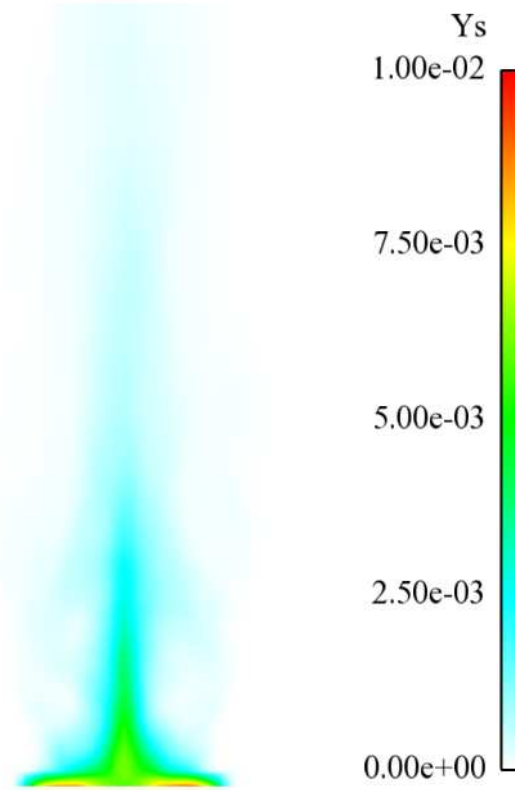


FIG. 6.15 – Champ moyen de fraction massique de suies ($\dot{Q} = 22.9 \text{ kW}$).

Gengembre et al. [37] ont mesuré les flux radiatifs émis par la flamme en quatre positions présentées sur la figure 6.16. Puisque les fluxmètres sont positionnés à distance du foyer, ces derniers mesurent le flux émis par les trois zones de la flamme (persistante, intermittente et le panache). La figure 6.17 présente les flux radiatifs pour les positions 1 et 3.

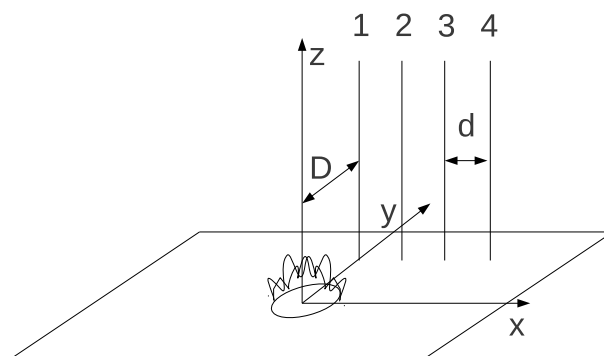


FIG. 6.16 – Positions des fluxmètres dans l'expérience de Gengembre et al. ($D = 0.3$ m, $d = 0.25$ m).

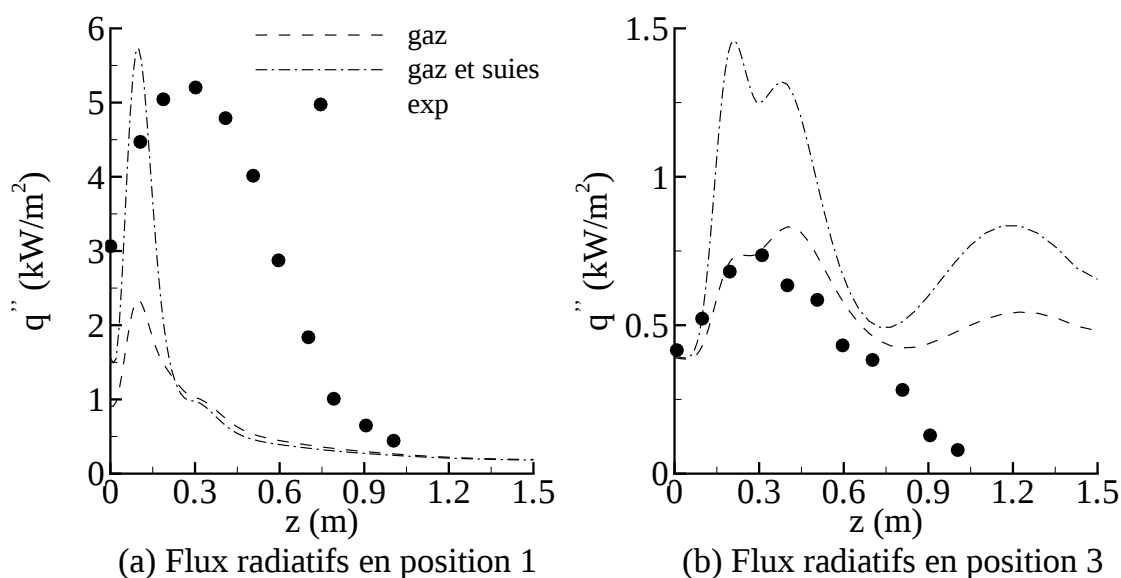


FIG. 6.17 – Contributions du gaz et des suies dans le rayonnement de la flamme : flux radiatifs ($\dot{Q} = 22.9$ kW).

A la position 1, le flux radiatif émis par la flamme persistante est bien prédit et le flux émis par le reste de la flamme est fortement sous-estimé, ce qui est en accord avec le profil de température présenté sur la figure 6.14. A la position 3, le niveau de rayonnement est surprédit dans toute la flamme.

Le flux rayonné provient de la résolution de l'ETR où interviennent : le coefficient d'absorption du gaz, le coefficient d'absorption des suies, le tout en interaction avec la turbulence. Les hypothèses de modélisation qui ont été faites sur chacun de ses points peut expliquer les écarts entre les données expérimentales et les prédictions.

L'hypothèse d'un milieu gris (même en tenant compte des bandes d'absorption de CO_2 et H_2O) utilisant un coefficient d'absorption moyen est contestable dans la mesure où les produits de combustion sont constitués de gaz ne rayonnant pas à la même longueur d'onde. L'influence du modèle de rayonnement est alors plus important à mesure que l'on s'éloigne du brûleur. Snegirev [111] montre que l'utilisation de modèles plus sophistiqués tel qu'un modèle de composition de gaz gris (WSGG) améliore les résultats de 20 % [111]. Par contre, le gain relatif est moindre dans la zone de flamme où sont produites et rayonnent majoritairement les suies, responsables de près de 40 % du rayonnement de la flamme. Celles-ci dominent le spectre d'émission et le rayonnement continu qu'elles émettent rend raisonnable l'hypothèse de milieu gris.

Enfin, l'interaction rayonnement-turbulence joue également un rôle même s'il est jugé mineur devant l'écoulement dans le cas présent [111]. Or, dans le présent modèle, les corrélations entre le coefficient d'absorption et l'intensité lumineuse ne sont pas considérées ce qui peut contribuer à la sous-estimation du rayonnement de la flamme.

6.1.6 Critiques du modèle

Après avoir étudié l'influence de chaque sous-modèle sur les prédictions de vitesse et température, nous étudions maintenant les résultats d'un point de vue plus globales sur les trois puissances fournies par Gengembre et al. [37].

Sur la figure 6.18 sont présentés les profils axiaux des espèces chimiques. La déplétion de l'oxygène au niveau de la zone de réaction suit la bonne tendance mais les valeurs sont surestimées dans les zones de flamme persistante et intermittente. La consommation de combustible, elle, est sous-estimée, en accord avec le défaut de consommation en oxygène et le combustible est brûlé plus haut dans la flamme. La réaction chimique étant contrôlée par le mélange, on retrouve les conclusions établies sur le panache d'hélium. Le défaut de mélange empêche la rencontre du combustible et de l'oxydant et donc leur réaction.

La fraction molaire de dioxyde de carbone est sur-prédite dans la zone de flamme persistante et sous-prédite dans le panache. Cela peut s'expliquer par le fait que la formation du CO_2 résulte majoritairement de l'oxydation du monoxyde de carbone par les radicaux OH , une étape chimique qui n'est pas prise en compte par le modèle. En tenant compte d'une étape de formation du monoxyde de carbone, le dioxyde de carbone serait produit plus tard ce qui ferait diminuer sa fraction massique dans la zone de flamme persistante au profit du monoxyde de carbone. La prédiction des fractions massiques des réactifs en seraient également améliorées car la formation du monoxyde de carbone se produit à des richesses plus élevées. L'oxydation du monoxyde de carbone se déroulant plus haut dans la flamme, la prise en compte de cette étape chimique permettrait également de compenser la sous-prédiction du CO_2 dans le panache. Une bonne prédiction des espèces nécessiterait donc de considérer une chimie plus détaillée. Ces résultats sont en accord avec ceux de Snegirev [111] qui tient compte de la formation du CO .

Sur la figure 6.19, les profils axiaux de température, de vitesse sont comparés avec les

résultats expérimentaux. Des écarts notables sur la température sont observés, elle est sur-estimée dans la zone de flamme persistante et sous-estimée dans le panache. Nous avons vu que la mauvaise description du mélange dans le champ proche amène à la prédiction d'un mélange plus riche que l'expérience dans la zone de flamme persistante. De par la richesse du mélange et de sa conversion directe en dioxyde de carbone, la quantité d'énergie libérée par le combustible est plus importante ce qui explique en partie une température plus élevée.

La conséquence d'une température sous-estimée est une vitesse sous-estimée. En effet, les forces de flottabilités sont alors plus faibles et ne jouent alors pas leur rôle moteur dans l'ascension des gaz chauds dans le panache. La zone d'accélération des gaz est alors plus courte et le gain de vitesse est moindre. Cet écart avec l'expérience est surtout prononcé sur le maximum de vitesse et se réduit avec l'altitude.

Le modèle de turbulence étant isotrope, il prédit des fluctuations de vitesse selon les directions longitudinale et transverse identiques, ce qui n'est pas le cas expérimentalement. Comme mentionné dans les sections précédentes, les écoulements caractéristiques des incendies présentent une forte anisotropie de la turbulence, ce qu'un simple modèle $k - \varepsilon$ ne peut reproduire. Les résultats mentionnés précédemment (Fig. 6.6) montrent également que, bien que les fluctuations totales de vitesses soient bien captées par le modèle, les fluctuations turbulentes sont largement sous-prédites dans la zone de flamme persistante. Par conséquent, l'intensité de la turbulence est sous-estimée dans cette région de l'écoulement. Ce défaut de turbulence conduit à des valeurs de la variance de la fraction de mélange extrêmement faibles. Le mélange turbulent étant sous-estimé, la consommation des réactifs est sous-prédite et la température sur-prédite. Dans le champ lointain, un accord plus satisfaisant est obtenu.

La même tendance est observée sur les trois puissances. La sous-prédiction du mélange est accentuée à mesure que la puissance augmente comme l'atteste les fractions massiques des réactifs.

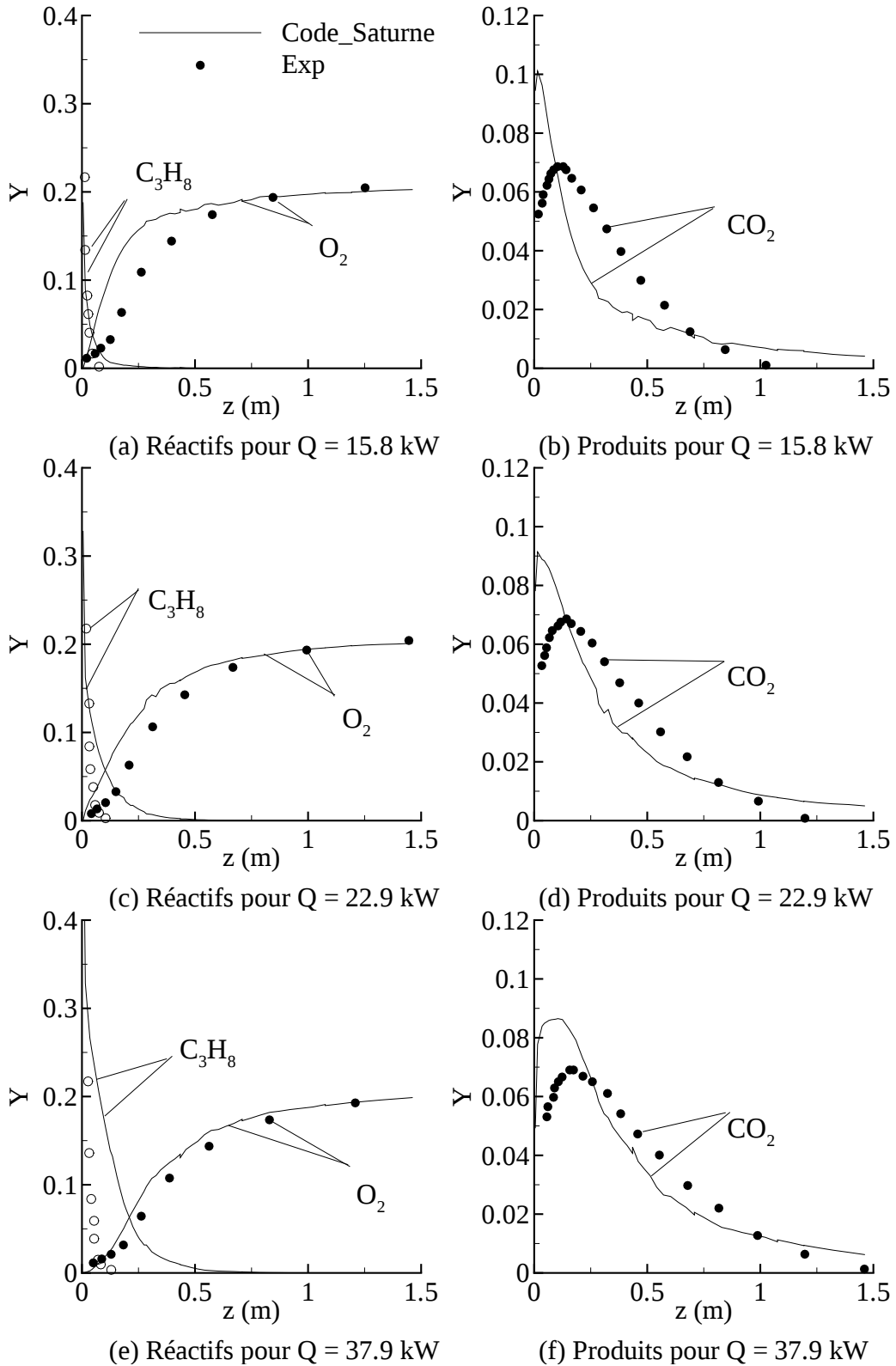


FIG. 6.18 – Fraction molaire de combustible, d'oxygène et de dioxyde de carbone le long de l'axe pour les trois flammes de Gengembre et al.

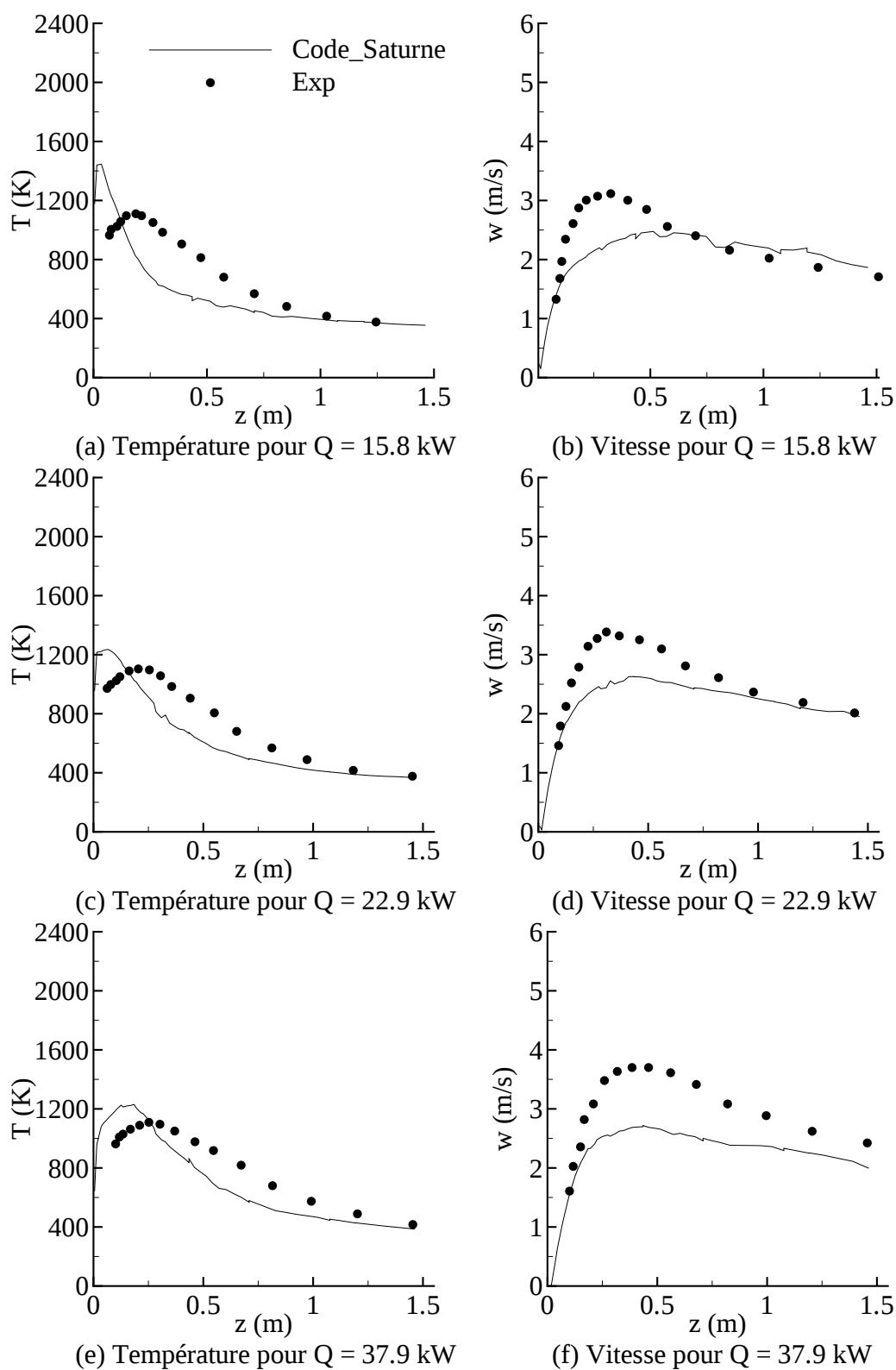


FIG. 6.19 – Profils de température et de vitesse le long de l'axe pour les trois flammes de Gengembre et al.

6.1.7 Caractéristiques d'un feu

De nombreuses études ont été réalisées sur les feux de nappe. En plus de la température et de la vitesse le long de l'axe, d'autres grandeurs caractéristiques ont été étudiées : le débit d'air entraîné, la hauteur de flamme et la fréquence de battement de la flamme. Pour toutes ces grandeurs, des corrélations ont été développées auxquelles nous comparons maintenant nos résultats.

Débit d'air entraîné

Sur la figure 6.20.a, le débit d'air entraîné est comparé à la corrélation de Zukoski et al. [137] reprise par Quintiere et Grove [99] et au débit d'air entraîné déduit des mesures de Gengembre et al. [37] :

$$\dot{m}_e = 0.21\rho_0\sqrt{gzz^2\dot{Q}_z^{*1/3}} \quad (6.5)$$

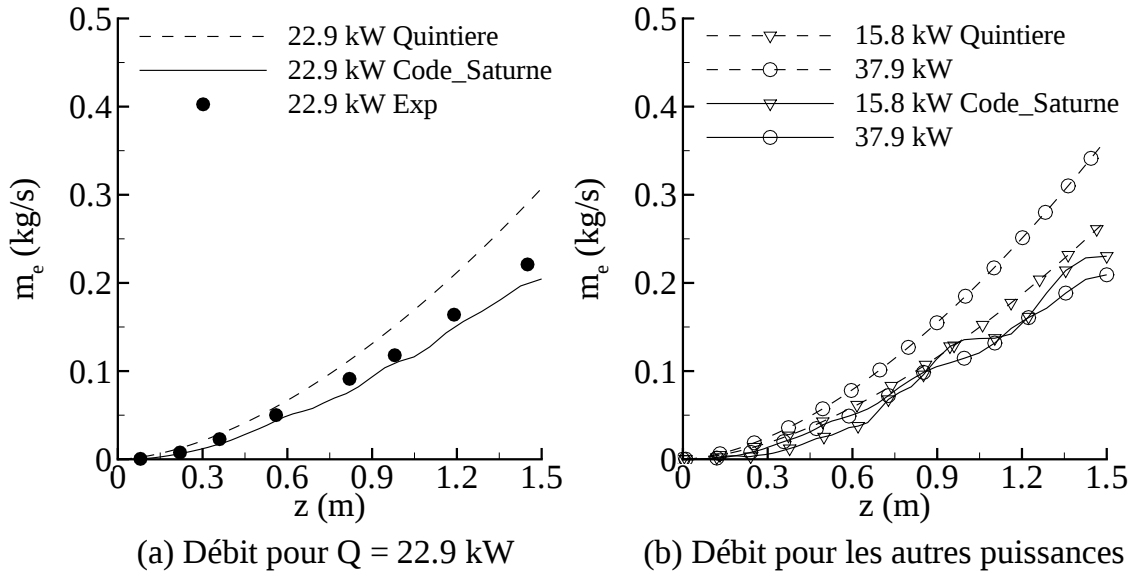


FIG. 6.20 – Débit d'air entraîné pour différentes puissances.

Sur la figure 6.20.a, le débit expérimental pour la puissance $\dot{Q} = 22.9$ kW est globalement bien prédit, légèrement sous-estimé en accord avec les prédictions des grandeurs moyennes discutées dans la section précédente. Sur la figure 6.20.b, la comparaison est effectuée pour les deux autres puissances et sont sous-estimés par rapport à la corrélations de Quintiere et Grove [99]. La dépendance à la puissance est également moins marquée toujours avec les prédictions des grandeurs moyennes.

Fréquence de battement

Les figures 6.21.a et c présentent l'évolution de la température aux hauteurs $z = 0.3$ m et $z = 0.6$ m sur l'axe de la flamme. Le signal montre bien les instationnarités de la flamme

mais ce battement est très irrégulier. Les figures 6.21.b et d présentent les spectres de fréquence correspondant à ces signaux. Ce dernier montre en terme de fréquences le signal très bruité des figures a et c. Cependant, on peut observer une fréquence moyenne entre 2 et 3 Hz. Zukoski [136] a corrélié la fréquence de battement avec le diamètre du feu selon :

$$f = (0.5 \pm 0.04) \left(\frac{g}{D} \right)^{0.5} \quad (6.6)$$

ce qui donne ici une fréquence moyenne de 2.8 Hz environ. Bien que cette fréquence ne soit pas nettement définie, la tendance est respectée.

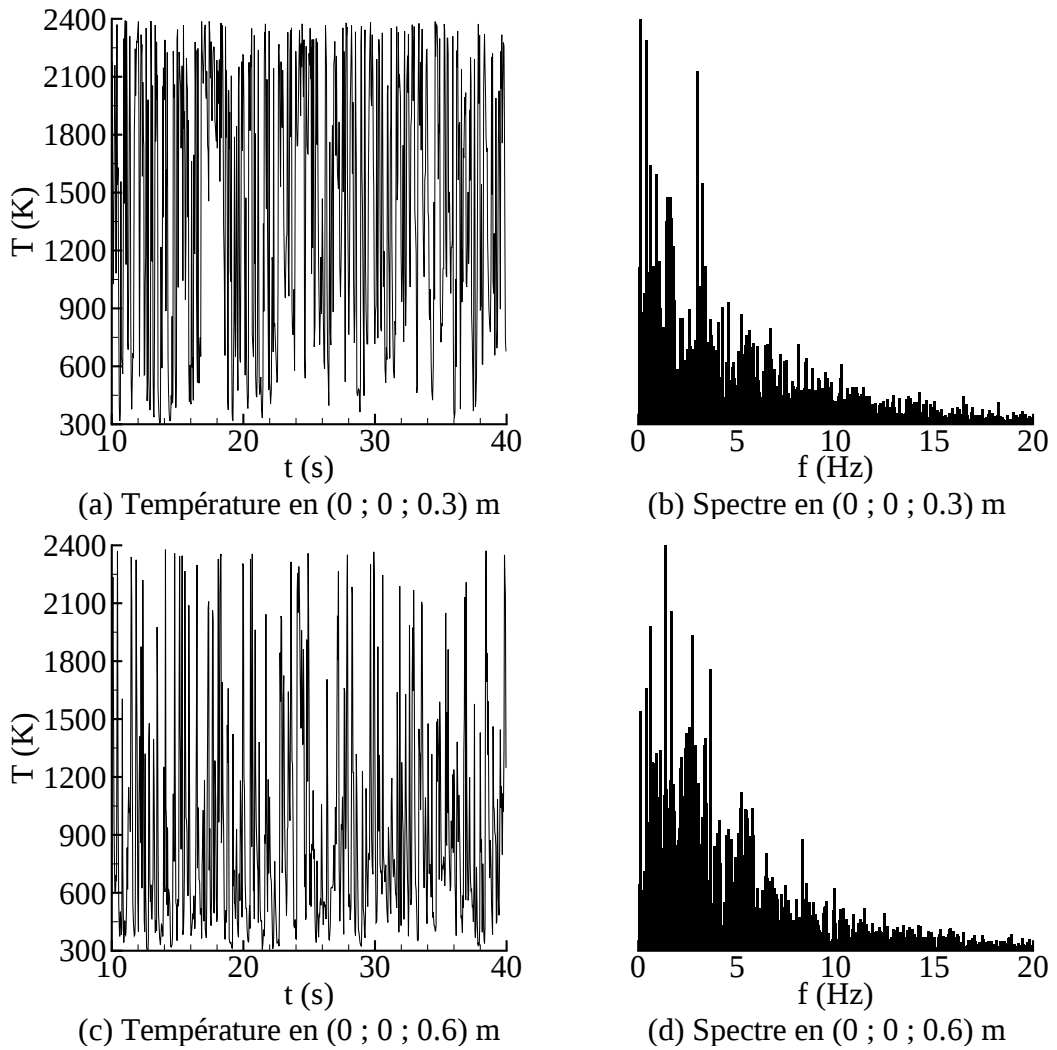


FIG. 6.21 – Signal de température et fréquence du battement de la flamme à $z = 0.3$ et 0.6 m sur l'axe ($\dot{Q} = 22.9$ kW).

Hauteur de flamme

La hauteur de flamme est un paramètre important des feux car c'est une grandeur appréciable à l'oeil visuellement. Cependant ce critère est trop approximatif pour pouvoir effectuer des mesures reproductibles. A l'aide d'enregistrement vidéos, Audouin et al. [3] ont déterminé un critère basé sur le taux de présence de la flamme. Pour les flammes émettrices de suies, Kolb [56] a estimé que la hauteur de la flamme correspond à une température moyenne comprise entre 500 et 600 °C. Pour des raisons de simplicité, nous utilisons ce dernier critère en choisissant une température de 800 K.

Les hauteurs déterminées pour les trois puissances de l'expérience de Gengembre et al. sont comparées avec les corrélations de Delichatios [30] :

$$\begin{aligned}\frac{Z_f}{D} &= 18.8\dot{Q}_D^{*2} & \text{si } Q_D^* < 0.23 \\ \frac{Z_f}{D} &= 2.6\dot{Q}_D^{*2/3} & \text{si } 0.23 < Q_D^* < 1.9 \\ \frac{Z_f}{D} &= 3.4\dot{Q}_D^{*2/5} & \text{si } 0.19 < Q_D^*\end{aligned}\tag{6.7}$$

d'Heskestad [42] :

$$\frac{Z_f}{D} = 3.7\dot{Q}_D^{*2/5} - 1.02\tag{6.8}$$

et de Zukoski [99] :

$$\begin{aligned}\frac{Z_f}{D} &= 40\dot{Q}_D^{*2} & \text{si } 0.03 < Q_D^* < 0.15 \\ \frac{Z_f}{D} &= 3.3\dot{Q}_D^{*2/3} & \text{si } 0.15 < Q_D^* < 1.0 \\ \frac{Z_f}{D} &= 3.3\dot{Q}_D^{*2/5} & \text{si } 1.0 < Q_D^* < 40\end{aligned}\tag{6.9}$$

où $\dot{Q}_D^*$ est la puissance adimensionnée par le diamètre :

$$\dot{Q}_D^* = \frac{\dot{Q}}{\rho_0 C_p T_0 \sqrt{g D} D^2}\tag{6.10}$$

Les hauteurs de flamme Z_f en fonction de la puissance $\dot{Q}$ sont présentées sur la figure 6.22. D'une manière générale, la hauteur de flamme est sous-estimée par rapport aux corrélations utilisées, résultat cohérent avec la réaction rapide observée qui amène à une fin de combustion plus précoce.

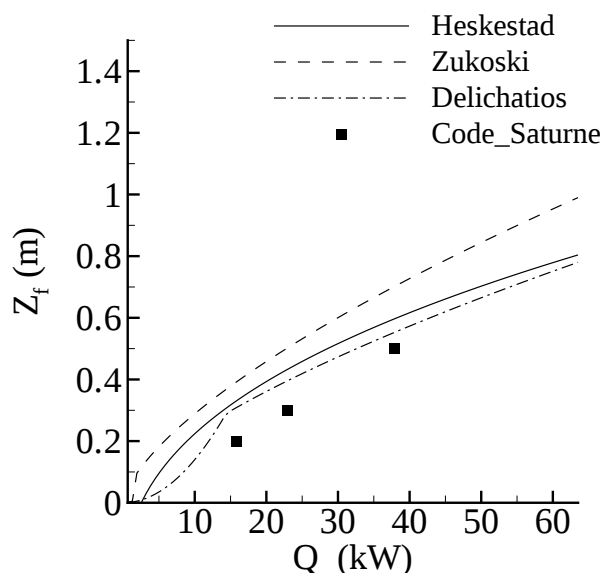


FIG. 6.22 – Hauteur de flamme en fonction de la puissance.

6.1.8 Conclusions sur l'étude d'un feu de nappe en milieu ouvert

Dans cette partie, une flamme turbulente de diffusion à bas nombre de Froude a été étudiée. Cette étude a permis de confirmer les constatations faites dans les sections précédentes, montrant leur importance capitale pour la prédiction des incendies :

- la prise en compte de la dilatation du mélange gazeux, ici due à la variation de la masse molaire et de la température, est indispensable pour capter la dynamique de l'écoulement.
- le choix du niveau de discrétisation est primordial pour espérer obtenir de bonnes prédictions et en particulier les prédictions de fluctuations des grandeurs moyennes (vitesses et donc concentrations).
- le défaut de mélange a un impact fort sur la prédiction de la température, de la vitesse le long de l'axe de la flamme, ce qu'une simple adaptation des constantes du modèle de turbulence ne permet pas de corriger.

Elle a également permis d'autres constatations. Bien que les fluctuations totales de vitesse soient bien prédites, la turbulence est fortement sous-estimée diminuant le mélange turbulent et surestimant la vitesse de la réaction dans la flamme persistante.

La prise en compte d'une chimie plus détaillée est également nécessaire pour bien prédire les espèces qui conditionnent la libération de l'énergie dans la flamme et donc la prédiction de la température.

Une des conséquences illustrant le couplage fort entre la combustion, la formation des suies et le rayonnement est la sous-estimation des flux radiatifs dans la flamme intermittente et le panache. Celle-ci est directement liée à la sous-prédiction de la température dans le panache. La surestimation de la température dans la zone de flamme conduit à une surproduction de suies dans la zone de flamme persistante. Celles-ci, transportées dans le panache, y absorbent alors trop d'énergie et contribuent à la sous-estimation de la température et des flux radiatifs.

Ces conclusions sont très importantes et doivent être gardées à l'esprit pour la simulation de feux de compartiment où le rayonnement est le mode dominant des transferts de chaleur. Malgré cela, les caractéristiques principales (entraînement d'air, fréquence de battement et hauteur de flamme) sont relativement bien prédites.

6.2 Feu de compartiment

Steckler et al [114] se sont intéressés aux flammes de diffusion turbulentes se développant dans un compartiment avec ouverture. Les auteurs ont réalisé une série d'expériences au National Bureau of Standard (NBS) à Washington en 1979.

Le compartiment a une longueur et une largeur de 2.8 m, et une hauteur de 2.18 m. Il possède une ouverture de type porte ou fenêtre. Les expériences sont relatives à des flammes générées par un brûleur de méthane de dimension de 30 cm de diamètre. Le débit de combustible est ajusté pour délivrer des puissances de 31.6 kW, 62.9 kW, 105 kW et 158 kW. Les murs et le plafond sont couverts par des plaques de matériau isolant (fibro-céramique) afin d'établir des conditions quasi-stationnaires après 30 min de feu.

Des rampes de sondes mobiles de vitesse bidirectionnelle et des thermocouples à fil-nu sont positionnées au milieu de l'ouverture et dans le coin de la pièce pour mesurer la distribution de la température et la vitesse.

Durant cette campagne expérimentale, la localisation du foyer, sa puissance, la forme et la taille de l'ouverture ont varié. Steckler et al. [114] ont étudié l'effet de chacune de ces configurations sur l'écoulement induit par le feu dans le compartiment. La figure 6.23 illustre le montage expérimental de Steckler et al., une description détaillée de l'expérience étant présentée dans [114]. La présente étude considère la configuration dans laquelle le brûleur est placé au centre de la pièce et la ventilation est assurée par une porte de dimension de hauteur 1.83 m et de largeur 0.74 m. La puissance sélectionnée correspond à 62.9 kW.

6.2.1 Conditions de calculs

Les calculs sont effectués dans une configuration tridimensionnelle. Les conditions de calculs sont regroupées dans le Tableau 6.3.

Conditions initiales	$P_0 = 101325 \text{ Pa}$ $k_0 = 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}^2$ $T_0 = 303.15 \text{ K}$ $\varepsilon_0 = 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}^3$ $\tilde{z} = \tilde{z}''^2 = 0$ $f_{vs} = n_s = 0$
Conditions d'injection	$D = 0.30 \text{ m},$ $k_{inj} = 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}^2$ $\dot{Q} = 62.9 \text{ kW}$ $\varepsilon_{inj} = 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}^3$ $\tilde{z} = 1$ $f_{vs} = 0$ $\tilde{z}''^2 = 0$ $n_s = 0$
Propriétés physiques	$\mu = \mu_{air}(T)$ $C_p = C_p(f, T)$

TAB. 6.3 – Conditions de calcul pour l'expérience de Steckler et al.

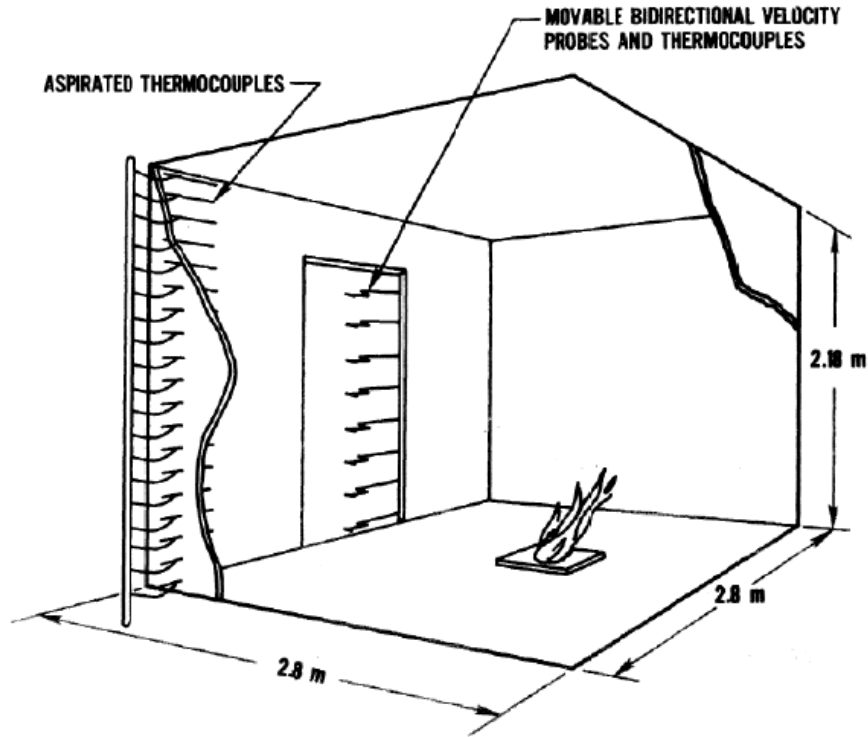


FIG. 6.23 – Montage expérimental de Steckler et al.

Pour éviter le problème de conditions aux limites libres à la porte, le domaine de calcul a été étendu à 3 m au delà de la porte. Les transferts de chaleur aux parois sont traités par la résolution de l'équation de la chaleur 1D. Les propriétés physiques des parois de fibro-céramique d'une épaisseur de 10 cm, la densité, la capacité calorifique massique et la conductivité sont respectivement $\rho_p = 700 \text{ kg/m}^3$, $C_{p,p} = 1100 \text{ J.K/kg}$, $\lambda_p = 0.11 \text{ W.K/m}$.

6.2.2 Discussions

Pour cette étude, il nous a été impossible d'obtenir une convergence en maillage comme dans les cas précédents. En effet, un maillage trop fin ($\Delta x \leq 5 \text{ cm}$) conduit à une divergence du calcul. Il faut donc garder à l'esprit que le maillage utilisé dans la présente étude est très grossier. La taille de la maille est du même ordre que celle du brûleur poreux. Par conséquent les résultats présentés ci-dessous doivent être analysés avec précaution. Ils sont assujettis à des erreurs de diffusion numérique liées au maillage grossier et aux schémas numériques utilisés.

La figure 6.24 présente le champ de température moyen dans le plan de symétrie. Ici, l'échelle de température utilisée est limitée à 1500 K pour représenter la couche de

fumées piégée sous le plafond du compartiment, la température maximale de 2200 K est atteinte dans une des mailles au-dessus du brûleur. Cette température instantanée et locale anormalement élevée a déjà été rencontrée dans la précédente étude sur les feux de nappe et avait été contournée par l'utilisation d'un maillage assez fin ce qui est impossible ici.



FIG. 6.24 – Champ moyen de la température dans le plan de symétrie pour $\dot{Q} = 62.9 \text{ kW}$.

Le champ de vitesse moyen coloré par la norme de la vitesse est présenté sur la figure 6.25 révèle la complexité de la structure dynamique de l'écoulement dans le compartiment notamment au niveau de la porte. La flamme est, dans les premiers instants, verticale, puis s'incline en aval du fait de l'entraînement d'air qu'elle induit. On note l'ascension le long du panache de poches de gaz chauds transportées par ces structures tourbillonnaires donnant naissance à un jet au plafond dit « ceiling jet » qui se dirige vers la porte. On observe également que la présence d'une ventilation naturelle entraîne une augmentation de l'angle d'inclinaison et réduit la hauteur de flamme.

On observe deux écoulements opposés au niveau de la porte : l'écoulement sortant des gaz chauds et l'écoulement entrant induit par le foyer. Il en résulte alors que le compartiment est divisé en deux zones : une zone chaude située dans la partie haute et une zone froide située dans la partie basse. La vitesse du gaz à l'interface entre ces deux écoulements est nulle. Cette interface représente un plan neutre de l'écoulement. La séparation entre les couches chaude et froide apparaît clairement sur les profils de vitesse et de température (Fig. 6.26).

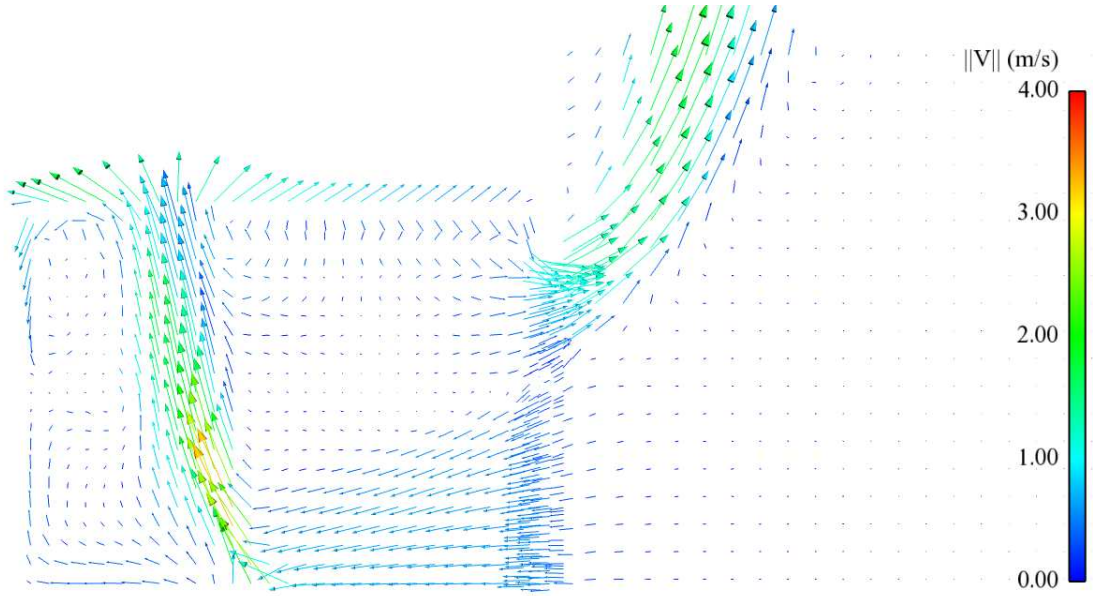


FIG. 6.25 – Champ moyen de vitesse coloré par la norme de la vitesse dans le plan de symétrie pour $\dot{Q} = 62.9 \text{ kW}$.

Une comparaison avec les données expérimentales a été réalisée au niveau de la porte et du coin de la pièce. La figure 6.26 présente les profils de la vitesse horizontale et de la température au milieu de la porte. La figure 6.27 montre le profil de température au coin de la pièce.

En général, la tendance des profils est en accord avec les résultats expérimentaux. La prise en compte du rayonnement a amélioré la prédiction des profils de température dans la couche de fumées ($z > 1.3 \text{ m}$) (Fig. 6.26.b). La figure 6.26.a montre que, contrairement aux profils de température, les profils de vitesse sont faiblement influencés par le rayonnement. Ceci est en accord avec la littérature [40, 62, 133]. Grandison et al. [40], Yeoh et al. [133] et Xue et al. [130] ont également montré que la prise en compte des échanges d'énergie avec les parois améliorerait les résultats numériques.

Le tableau 6.4 présente une comparaison avec l'expérience des grandeurs caractéristiques de l'écoulement au milieu de la porte : la position du plan neutre normalisée par la hauteur de la porte h_n/h_0 , le flux de l'écoulement entrant $\dot{m}_e$, le flux de l'écoulement sortant $\dot{m}_s$ et la température maximale dans la partie haute $T_{u,max}$. La hauteur du plan neutre est surestimée par le code, par conséquent, le débit d'air frais entrant est surestimé et le débit sortant est sous-estimé.

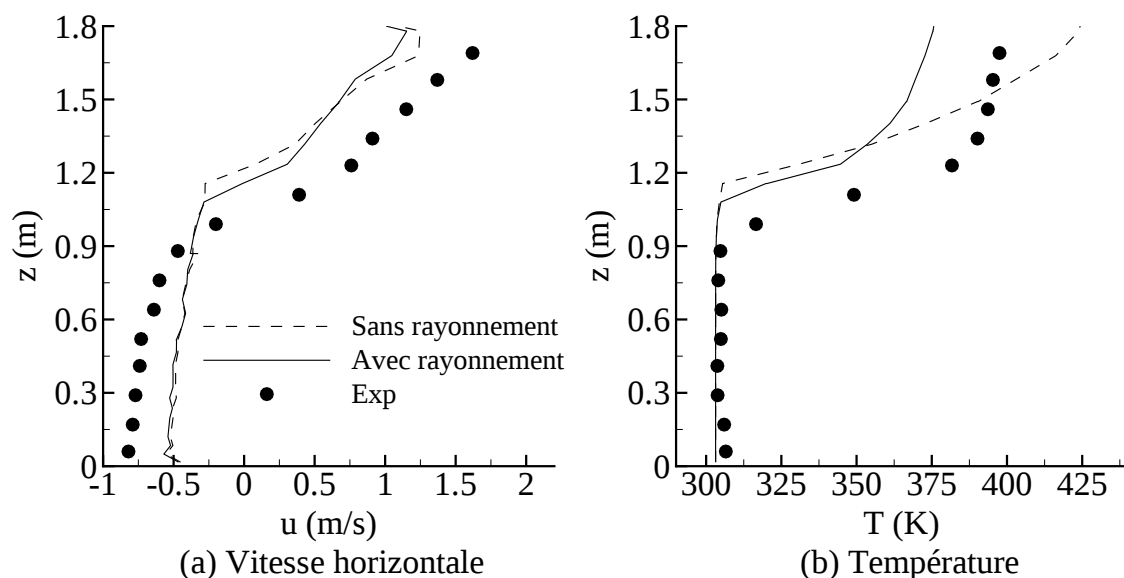


FIG. 6.26 – Distribution verticale de vitesse horizontale et de température au milieu de la porte pour $\dot{Q} = 62.9 \text{ kW}$.

	h_n/h_0	$\dot{m}_e \text{ (kg/s)}$	$\dot{m}_s \text{ (kg/s)}$	$T_{u,max} \text{ (K)}$
Expérience	0.561	0.571	0.554	400
<i>Code_Saturne</i>	0.628	0.535	0.373	375

TAB. 6.4 – Grandeurs caractéristiques de la configuration Steckler et al.

La figure 6.27 montre que l'introduction du rayonnement a également amélioré les profils calculés de température dans la couche supérieure au coin de la pièce. Cependant, la température reste sous-estimée. Dans cette partie de la pièce se trouve une zone morte de l'écoulement. Le fluide est donc peu renouvelé et l'échauffement constaté dans l'expérience ne se fait qu'à l'aide des transferts radiatifs. Sur le cas du feu de nappe, nous avons vu que ceux-ci étaient sous-estimés, conclusion que nous pouvons réitérer ici. De plus, l'épaisseur de la couche chaude est sous-estimée par le modèle réduisant d'autant plus le réchauffement de la couche d'air frais par le rayonnement des fumées.

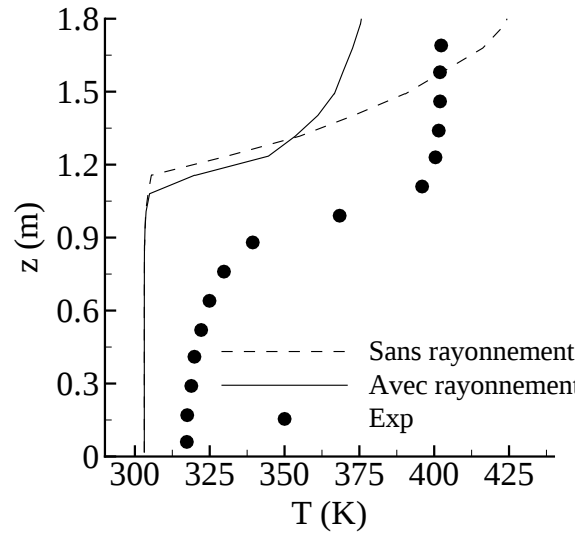


FIG. 6.27 – Distribution verticale de la température au coin de la pièce pour $\dot{Q} = 62.9 \text{ kW}$.

L'expérience de Steckler et al. est considérée comme une configuration de référence pour la validation et l'évaluation des codes CFD à modéliser un feu de compartiment [84]. Ces études ont montré que le désaccord entre les calculs et les données expérimentales peut être attribué au choix du maillage, [40, 62, 74] ou aux limitations des modèles de combustion turbulente basées sur l'hypothèse de chimie rapide simplifiés (EBU, flamme mince). Lewis et al. [62] ont montré que la prise en compte du CO dans le modèle de combustion a amélioré les résultats. Dans la même optique, Luo et Beck [65] ont introduit un seuil d'oxygène afin d'éviter la surestimation de la température dans la région riche en combustible. Novozhilov [84] a évoqué les limitations du modèle de turbulence $k-\varepsilon$ au niveau de l'entraînement d'air pour expliquer les désaccords observés [105, 84]. Finalement, le rayonnement a également un effet considérable sur la prédiction de la température [84, 133].

6.2.3 Conclusions sur l'étude d'un feu de compartiment

En regard des défauts du modèle constaté lors des précédentes études, les prédictions sur le feu de compartiment de Steckler et al. sont raisonnables notamment au niveau de la porte. Cela est majoritairement imputable au fait que la flamme n'est plus dans un milieu ouvert mais confiné. L'entraînement d'air vers la flamme à travers l'ouverture est plus important que dans une configuration à l'air libre, ce qui peut contribuer à gommer la sous-prédiction de l'entraînement d'air constatée dans les précédentes études.

Dans un feu de compartiment, l'influence des parois est aussi importante que la prédiction du mélange, de la turbulence ou du rayonnement. Les défauts constatés dans les précédentes sections sont clairement visibles sur les prédictions dans le coin de la pièce.

En effet, à cet endroit, le rayonnement du milieu et des parois est prépondérant car on se trouve dans une zone morte de l'écoulement. La sous-estimation du rayonnement ainsi que la sous-estimation de l'épaisseur de la couche de fumées est alors directement responsable de la sous-prédiction de la température.

Conclusion générale

Réalisé au sein de l'équipe sûreté incendie d'EDF R&D, ce travail est une première étape de modélisation fine de l'incendie à l'aide du code de mécanique des fluides *Code_Saturne*.

Les flammes rencontrées dans les incendies sont des flammes turbulentes de diffusion à bas nombre de Froude fortement instationnaires et dominées par les forces de flottabilité. Le rayonnement des produits de combustion majoritairement constitués des gaz CO_2 et H_2O et de suies jouent un rôle important notamment dans la dégradation des combustibles alimentant la flamme, surtout lors de feux de compartiment. Ces caractéristiques physiques ont été abordées dans le premier chapitre.

Notre choix s'est porté sur une modélisation RANS à l'aide du modèle $k-\varepsilon$ de Launder et Spalding en tenant compte de la production de turbulence par la gravité. Le modèle de combustion retenu est un modèle de flammelettes suivant une hypothèse de chimie infiniment rapide. Le rayonnement de la flamme est traité à l'aide du modèle à larges bandes de Modak et l'équation des transferts radiatifs est résolue à l'aide de la méthode des ordonnées discrètes. La formation des suies est évaluée à l'aide du modèle semi-empirique de Syed et al. Ces choix de modélisation ont été fait en accord avec les méthodes choisies dans la littérature présentées dans les deuxième et troisième chapitres. Le troisième chapitre fait également l'objet d'une réflexion sur l'estimation de la puissance libérée par une flamme turbulente de diffusion. Cette réflexion nous a amenés à proposer une expression générale à travers la dérivée de la loi d'état par rapport à la variance de la fraction de mélange.

Dans le quatrième chapitre a été présenté *Code_Saturne* que nous avons utilisé pour les simulations réalisées dans cette étude. Sont également présentées l'extension de son schéma incompressible aux écoulements dilatables ainsi que l'adaptation des conditions limites libres. Ces développements étaient nécessaires pour permettre au code initialement développé pour les écoulements thermohydrauliques, de traiter les écoulements caractéristiques des incendies présentés dans ce mémoire. En particulier, un traitement original pour le terme de dilatation dans l'équation de continuité a été proposé utilisant la dérivation de la loi d'état utilisée pour la densité.

Le cinquième chapitre contient les différentes études préliminaires qui ont été menées afin d'étudier le comportement du modèle sur une flamme à bas nombre de Froude. Afin d'évaluer les capacités du modèle en dehors d'un cadre réactif, trois panaches non-réactifs ont été étudiés :

- le champ lointain d'un panache thermique stationnaire,
- le champ lointain d'un panache thermique à bas nombre de Froude,
- le champ proche d'un panache d'hélium.

De ces trois études, il ressort que l'adaptation du schéma incompressible de *Code_Saturne* pour les écoulements dilatables permet une représentation satisfaisante des écoulements dilatables instationnaires.

De même, la réécriture des conditions limites pour les frontières libres sont satisfaisantes et permettent un libre entraînement d'air.

Concernant le modèle de turbulence, l'approximation de Boussinesq généralement utilisée pour l'évaluation du terme de production de turbulence par les forces de flottabilité ne doit pas être utilisée. Il ressort également que la constante $C_{\varepsilon 3}$ a une grande influence sur l'écoulement, une valeur commune n'ayant pas été trouvée. Bien que l'écriture du terme de production par la flottabilité ait une influence sur le champ lointain, elle est très faible sur le champ proche.

La comparaison des résultats obtenus avec la littérature est globalement satisfaisante, mais un défaut de mélange subsiste dans le champ proche du panache entraînant une mauvaise prédiction de la variance de la fraction massique d'hélium, ce qu'un calcul plus physique des flux turbulents pour les scalaires pourrait améliorer. En conclusion, en accord avec la littérature, le calcul même des flux turbulents est une orientation de recherche importante.

Les écoulements obtenus avec une source d'hélium sont des configurations très proches des flammes rencontrées dans les incendies. Par conséquent, les conclusions tirées de cette étude permettent d'expliquer, en partie, les résultats obtenus sur les flammes à bas nombre de Froude.

L'étude de ces flammes a été présentée dans le sixième chapitre. Un feu de nappe de moyenne puissance permettant de reproduire le comportement des flammes rencontrées dans les incendies a été étudié.

A cause d'une faible production de turbulence, l'interaction turbulence-combustion n'est pas représentée et le modèle de combustion dégénère vers sa limite laminaire. Les différentes adaptations du modèle de turbulence testées sur les cas de panaches ne permettent pas d'obtenir un niveau satisfaisant de turbulence tout en conservant une structure cohérente de la flamme. Seul un raffinement du maillage permet d'obtenir des résultats en accord avec la littérature, grâce à une meilleure description de la dynamique de l'écoulement. Un maillage plus fin n'est toutefois pas suffisant, la prise en compte de la dilatation des gaz de combustion est indispensable pour capter les fluctuations à basse fréquence de la flamme.

Bien que les grandeurs moyennes soient relativement bien prédites, un mélange plus

riche et l'hypothèse de chimie infiniment rapide amène à la prédiction d'une flamme plus courte et plus chaude et un panache plus froid par rapport à l'expérience. Ceci a également un impact sur la formation des suies, a priori surestimée. Cet excès de suies absorbe une grande part de l'énergie dans le panache et contribue à son refroidissement, les flux radiatifs émis par les fumées sont également sous-estimés. Les caractéristiques principales d'un feu de nappe sont toutefois bien représentées.

Le modèle a enfin été appliqué sur un feu compartimenté de moyenne puissance. Les résultats obtenus sont en accord avec l'expérience et la littérature, le confinement et les parois jouant un rôle prépondérant dans les feux compartimentés.

Perspectives

Les perspectives de travail portent sur le modèle de turbulence, en particulier l'amélioration du calcul des flux turbulents scalaires que ce soit à l'aide d'une hypothèse de gradient généralisé, d'un modèle algébrique ou même d'une résolution au second ordre complet. Une telle amélioration permettra de représenter l'anisotropie sur les tensions de Reynolds, mais également sur les flux turbulents des scalaires tels que la température ou les fractions massiques des espèces. Dès à présent, un travail sur certains de ces aspects est engagé à l'Université de Manchester.

Autre point, dans les calculs présentés dans ce mémoire, l'écoulement à la surface est considéré laminaire. La vitesse imposée est donc une vitesse débitante homogène et les grandeurs turbulentes imposées sont quasi-nulles. Cependant, les gradients de vitesse à la surface du brûleur, existant entre les pores et le solide, contribuent certainement à la production de turbulence au-dessus de celui-ci. Ayant utilisé un profil de vitesse homogène, ces gradients de vitesses ne sont pas représentés. Une telle description de l'écoulement demande une discrétisation très coûteuse en temps de calcul, mais à défaut de l'utiliser pour chaque simulation, elle permettrait de définir des conditions de turbulence plus réalistes à la surface du brûleur. Ceci pourrait être fait par l'intermédiaire de conditions limites plus appropriées pour l'énergie cinétique turbulente et sa dissipation tenant compte du supplément d'énergie cinétique turbulente et/ou d'un périmètre effectif disponible pour l'entraînement d'air supérieur à celui du brûleur résultant de la coalescence des multiples jets.

Les perspectives de travail portent également sur le modèle de combustion. En effet, nous avons vu qu'une hypothèse de chimie infiniment rapide amène à une surprédiction de la température de la flamme. Tenir compte d'effets cinétiques tel que la formation du monoxyde de carbone par exemple, soit par une réaction incomplète donnant un mélange CO, CO_2 , soit par une hypothèse de chimie à l'équilibre, soit par un mécanisme cinétique réduit ou détaillé, peut améliorer les résultats. De plus, la prise en compte de ces effets cinétiques est indispensable dans le cas où le milieu viendrait à se raréfier en oxygène, dans un feu confiné par exemple.

Autre point important, si le milieu devient pauvre en oxygène, on peut s'attendre à ce que l'air entraîné dans la flamme ne soit plus de l'air pur mais de l'air chargé en produits de combustion voire en imbrûlés. Ceci n'est clairement pas représenté par les modèles de combustion pour les flammes de diffusion, notamment à cause de la contrainte

de monomodalité imposée à la pdf pour pouvoir déduire ses paramètres des deux premiers moments. Pour construire une pdf bimodale, on pourrait résoudre une équation pour les moments d'ordre supérieur de la fraction de mélange, équations qu'il reste à écrire puis à fermer. Ceci pourrait également se faire en considérant l'histoire d'une particule fluide dans le milieu. En utilisant l'âge moyen et le carré moyen de l'âge des particules de combustible, il est possible de construire une pdf jointe de la fraction de mélange et de l'âge des particules, par laquelle, la variance de la fraction de mélange est répartie entre deux populations de particules, jeunes et moins jeunes. Les plus âgées représentent alors le combustible réentraîné dans la flamme après avoir réagi et s'être refroidi dans les fumées.

Dans les cas où une extinction partielle ou temporaire de la flamme peut être obtenue tels que dans des conditions de forte sous-ventilation, un prémélange partiel dû au débit de pyrolyse maintenu par le rayonnement des fumées peut se réinflammer. Les modèles de combustion pour les flammes de diffusion se trouvent alors en défaut et un modèle de prémélange partiel tel que le modèle de Libby-Williams-Poitiers serait préférable. Cependant, la pdf (2 pics de Dirac pour la fraction de mélange) contient trop peu d'informations pour pouvoir être utilisée et il conviendrait de raffiner cette dernière.

Comme le front de flamme, la turbulence interagit avec la zone de formation des suies. Dans cette étude, les taux de nucléation, croissance et coagulation du modèle de suies sont calculés avec les grandeurs moyennes. Or, comme pour les taux de réaction chimiques, à cause de la loi d'Arrhenius qu'ils contiennent, leur valeur moyenne peut être très différente de leur valeur calculée avec les grandeurs moyennes. Ainsi, comme pour la combustion, les taux de formation pourraient être calculés à l'aide d'un modèle statistique en presumant une forme de pdf qu'il reste à définir. En effet, rien ne permet de dire que la pdf dans le front de flamme est représentative de la physique régissant la formation des suies.

Le calcul des transferts radiatifs peut également être amélioré en tenant compte de l'inhomogénéité du milieu en température et en composition.

Considérer le milieu comme une composition de gaz gris permettra d'améliorer la prédiction du rayonnement tout en évitant un calcul spectral trop coûteux pour les applications industrielles envisagées. Enfin, le traitement du rayonnement peut être amélioré en tenant compte de l'effet de la turbulence sur les propriétés radiatives du milieu, malheureusement, l'effet de la turbulence sur le rayonnement est encore mal connu.

Bibliographie

- [1] M.O. Annarumma, J.M. Most, and P. Joulain. On the numerical modeling of buoyancy-dominated turbulent vertical diffusion flames. *Combustion and Flame*, 85 :403–415, 1991.
- [2] F. Archambeau, N. Mechitoua, and M. Sakiz. *Code_Saturne* : a finite volume code for the computation of turbulent incompressible flows - industrial applications. *International Journal of Finite Volumes*, 1, 2004.
- [3] L. Audouin, G. Kolb, J.L.Torero, and J.M.Most. Average centreline temperatures of a buoyant pool fire obtained by image processing of video recordings. *Fire Safety Journal*, 24 :167–187.
- [4] L. Audouin, J.M. Such, J.C. Malet, and C. Casselman. Real scenario for a ghosting flame. *5th International Symposium on Fire Safety Science*, 1997.
- [5] V. Babrauskas. *SFPE Handbook of Fire Protection Engineering*. National Fire Protection Association, 2nd edition, 1995.
- [6] P. Bailly, M. Champion, and D. Garréton. Counter-gradient diffusion in a confined turbulent premixed flame. *Physics of Fluids*, 9 :766–775, 1997.
- [7] J. Bak and S. Clausen. Ftir transmission-emission spectrometry of gases at high temperatures : demonstration of kirchhoff’s law for a gas in an enclosure. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 61 :687–694, 1999.
- [8] G. Bertin, J.M. Most, and M. Coutin. Wall fire behaviour in a under-ventilated fire. *Fire Safety Journal*, 37 :615–630, 2002.
- [9] R.W. Bilger. The structure of diffusion flames. *Combustion Science and Technologies*, pages 155–170, 1976.
- [10] R.W. Bilger. The structure of nonpremixed flames. *22th Symposium International on Combustion*, pages 475–488, 1988.
- [11] R.W. Bilger. Computational field models in fire safety and engineering. *4th International Symposium, Fire Safety Science*, pages 95–110, 1994.
- [12] R.W. Bilger, S.B. Pope, K.N.C Bray, and J.F. Driscoll. Paradigms in turbulent combustion research. *30th Symposium International on Combustion*, pages 21–42, 2005.
- [13] R. Borghi. Turbulent combustion modelling. *Progress in Energy and Combustion Science*, 14 :245–292, 1988.

-
- [14] A. Bouhafid, J.P. Vantelon, P. Joulain, and A.C. Fernandez-Pello. On the flame structure at the base of a pool fire. *22th Symposium International on Combustion*, pages 1291–1298, 1988.
 - [15] C.P. Brescianini and M.A. Delichatsios. New evaluation of the $k-\varepsilon$ turbulence model for free buoyant plumes. *Numerical Heat Transfer*, 43 :731–751, 2003.
 - [16] N.W. Bressloff, J.B. Moss, and P.A. Rubini. Cfd prediction of coupled radiation heat transfer and soot production in turbulent flames. *26th International Symposium on Combustion*, pages 2371–2386, 1996.
 - [17] S.P. Burke and T.E.W. Schumann. Diffusion flames. *Industrial and Engineering Combustion*, 20 :998–1004, 1928.
 - [18] B.M. Cetegen and Y. Dong. Experiments on the instability modes of buoyant diffusion flames and effects of ambient atmosphere on the instabilities. *Experiments in Fluids*, 28 :546–558, 2000.
 - [19] B.M. Cetegen, E.E. Zukoski, and T. Kubota. *Combustion Science and Technologies*, 39 :305–331, 1984.
 - [20] C.J. Chen and W. Rodi. *Vertical buoyant jets : a review of experimental data*. Pergamon, 1980.
 - [21] S.C.P. Cheung and G.H. Yeoh. A fully-coupled simulation of vortical structures in large-scale buoyant pool fire. *International Journal of Thermal Science*, 48 :2187–2202, 2009.
 - [22] R. Chitty and G. Cox. A method of measuring combustion intermittency in fires. *Fire and Materials*, 3 :238–242, 1979.
 - [23] W.K. Chow and W.K. Mok. Cfd fire simulations with four turbulence models and their combinations. *Journal of Fire Science*, 17 :209–231, 1999.
 - [24] W. Chung and C.B. Devaud. Buoyancy-corrected $k-\varepsilon$ models and large eddy simulation applied to a large axisymmetric helium plume. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 58 :57–89, 2008.
 - [25] M. Coutin. Combustion d’un matériau placé dans la zone supérieure d’un compartiment ouvert. Technical report, 2000.
 - [26] G. Cox and S. Kumar. Modeling enclosure fires using cfd. 2002.
 - [27] B. Cuenot and T. Poinso. Effects of curvature and unsteadiness in diffusion flames, implications for turbulent diffusion combustion. *25th Symposium International on Combustion*, pages 1383–1390, 1994.
 - [28] B.J. Daly and F.H. Harlow. Transport equations in turbulence. *Physics of FLuids*, 13 :2634–2649, 1970.
 - [29] L. Davisdon. Second order corrections of the $k-\varepsilon$ model to account for non-isotropic effects due to buoyancy. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 33 :2599–2608, 1990.
-

-
- [30] M.A. Delichatios. Air entrainment into buoyant jet and pool fires. *Combustion and Flame*, 70 :33–46, 1987.
 - [31] F.X. Demoulin and R. Borghi. Modeling of turbulent spary combustion with application to diesel like experiment. *Combustion and Flame*, 129 :281–293, 2002.
 - [32] R. Dobashi, Z. Kong, A. Toda, N. Takahashi, M. Suzuki, and T. Hirano. Mechanism of smoke generation in a flickering pool fire. *6th International Symposium on Fire Safety Science*, pages 255–264, 2008.
 - [33] D. Drysdale. *An Introduction to Fire Dynamics*. Wiley, 2nd edition, 1998.
 - [34] J.H. Ferziger and M. Peric. *Computational Methods for Fluid Dynamics*. Springer, 3ème edition, 2002.
 - [35] V. Fichet. *Modélisation de la combustion du gaz naturel par réseaux de réacteurs avec cinétique chimique détaillée*. PhD thesis, Université de Poitiers, 2008.
 - [36] D.F. Fletcher, J.H. Kent, V.B. Apte, and A.R. Green. Numerical simulations of smoke movement from a pool fire in a ventilated tunnel. *Fire Safety Journal*, 23 :305–325, 1994.
 - [37] E. Gengembre, P. Cambray, D. Karmed, and J.C. Bellet. Turbulent diffusion flames with large buoyancy effects. *Combustion Science and Technologies*, 41 :55–67, 1984.
 - [38] W.K.Jr. George, R.L. Alpert, and F. Tamanini. Turbulence measurements in an axisymmetric buoyant plume. *International Journal of Heat Mass Transfer*, 20 :1145–1154, 1977.
 - [39] I. Glassman and R.A. Yetter. *Combustion*. Academic Press, 4ème edition, 2008.
 - [40] A.J. Grandison, E.R. Galea, and M.K. Patel. Fire modelling standards/benchmark - report on phase 2 simulations. Technical report, Université de Greenwich, UK, 2001.
 - [41] T. Hara and S. Kato. Numerical simulation of thermal plumes in free space using the standard $k - \varepsilon$ model. *Fire Safety Journal*, 39 :105–129, 2004.
 - [42] G. Heskestad. Luminous heighths of turbulent diffusion flames. *Fire Safety Journal*, 5 :103–108, 1983.
 - [43] G. Heskestad. Engineering relations for fire plumes. *Fire Safety Journal*, 7 :25–32, 1984.
 - [44] G. Heskestad. *Fire plumes*. SFPE Handbook of Fire Protection Engineering. National Fire Protection Association, 2nd edition, 1995.
 - [45] G. Heskestad. Dynamics of the fire plume. *Philosophical Transactions of The Royal Society : Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 356 :2815–2833, 1998.
 - [46] J. Holen, M. Brostrøm, and B.F. Magnussen. Finite difference calculation of pool fires. *23th Symposium International on Combustion*, pages 1677–1683, 1991.
 - [47] M.S. Hossain and W. Rodi. A turbulence model for buoyant flows and its application to vertical buoyant jets. *Turbulent Buoyant Jets and Plumes*, Pergamon Press, 1982.
 - [48] H.C. Hottel. Certain laws governing diffusive burning of liquids. *Fire Research Abstracts and Reviews*, 1 :41–44, 1959.
-

-
- [49] B. Karlsson and J.G. Quintiere. *Enclosure Fire Dynamics*. CRC Press, 1999.
- [50] R.J. Kee, M.E. Coltrin, and P. Glarborg. *Chemically reacting flows : theory and practice*. John Wiley & Sons, Inc., 2003.
- [51] I.M. Kennedy. Models of soot formation and oxidation. *Progress in Energy and Combustion Science*, 23 :95–132, 1997.
- [52] L. Kerrison, E.R. Galea, and M.K. Patel. A two-dimensional numerical investigation of the oscillatory flow behaviour in rectangular fire compartments with a single horizontal ceiling vent. *Fire Safety Journal*, 30 :357–382, 1998.
- [53] A.R. Kerstein, W. Ashurst, and F.A. Williams. Field equation for interface propagation in an unsteady homogeneous flow field. *Physical Review*, A 37(7) :2728–2731, 1988.
- [54] M. Khan and G.A. Greeves. A method for calculating the formation and combustion of soot in diesel engines. *Heat transfer in flame*, pages 391–402, 1974.
- [55] A.Y. Klimenko and R.W. Bilger. Conditional moment closure for turbulent combustion. *Progress in Energy and Combustion Science*, 25(6) :595–687, 1999.
- [56] G. Kolb. *Etude d'une flamme non-prémélangée caractéristique d'un incendie en présence d'un écoulement forcé*. PhD thesis, Université de Poitiers, 1996.
- [57] A.N. Kolmogorov. Dissipation of energy in a locally isotropic turbulence. *Doklady Akad. Nauk SSSR*, 32 :141–, 1941. Traduction anglaise dans : Am. Math. Soc. Translations 1958, Series 2, Vol 8, p. 87, Providence R.I.
- [58] B.E. Launder, G.J. Reece, and W. Rodi. Progress in the development of a reynolds-stress turbulente closure. *Journal of Fluids Mechanics*, 68 :537–566, 1975.
- [59] B.E. Launder and B.I. Sharma. Applications of energy-dissipation model of turbulence to the calculation of flow near a spinning disc. *Letters in Heat and Mass Transfer*, 3 :131–138, 1974.
- [60] B.E. Launder and D.B. Spalding. The numerical computation of turbulent flows. *Computational Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 3 :269–289, 1974.
- [61] M. Lesieur. *Turbulence in Fluids*. Springer, 3ème edition, 2008.
- [62] M.J. Lewis, M.B. Moss, and P.A. Rubini. A cfd modelling of combustion and heat transfer in compartment fires. *5th International Symposium on Fire Safety Science*, pages 463–474, 1997.
- [63] P.A. Libby and F.A. Williams. Presumed pdf analysis of partially premixed turbulent combustion. *Combustion Science and Technologies*, 161 :351–390, 2000.
- [64] A. Linan. The asymptotic structure of counterflow diffusion flames for large activation energies. *Acta Astronautica*, 1 :1007–319, 1974.
- [65] M. Luo and V. Beck. Fire environment in a multi-room building. *Fire Safety Journal*, 23 :413–438, 1994.
- [66] M. Luo and V. Beck. A study of non-flashover and flashover fires in a full-scale multi-room building. *Fire Safety Journal*, 26 :191–219, 1996.
-

-
- [67] T.G. Ma and J.G. Quintiere. Numerical simulation of axi-symmetric fire plumes : accuracy and limitations. *Fire Safety Journal*, 38 :467–492, 2003.
- [68] K.V. Maele and B. Merci. Application of two buoyancy-modified $k - \varepsilon$ turbulence models to different types of buoyant plumes. *Fire Safety Journal*, 41 :122–138, 2006.
- [69] B.F. Magnussen and B.H. Hjertager. On mathematical modeling of turbulent combustion with special emphasis on soot formation and combustion. *16th Symposium International of combustion*, pages 719–729, 1976.
- [70] F.E. Marble and J.E. Broadwell. The coherent flame model for turbulent chemical reactions. Technical Report TRW-9-PU, 1977.
- [71] N.C. Markatos, M.R. Malin, and G. Cox. Mathematical modelling of buoyancy-induced smoke flow in enclosures. *International Journal of Heat Mass Transfer*, 25 :63–75, 1982.
- [72] B.J. McCaffrey. Purely buoyant diffusion flames : Some experimental results. Technical Report NBSIR 79-1910, National Bureau of Standards, 1979.
- [73] K. McGrattan, H. Baum, R. Rehm, W. Mell, R. McDermott, S. Hostikka, and J. Floyd. Fire dynamics simulator (FDS) technical reference guide. Technical Report 1018-5, National Institut of Standard and Technology. 2007.
- [74] K.B. McGrattan, H.R. Baum, and R.G. Rehm. Large eddy simulations of smoke movement. *Fire Safety Journal*, 30 :161–178, 1998.
- [75] K.B. McGrattan, E.F. Glenn, and E.F. Jason. Fire dynamics simulator (FDS) technical reference guide. Technical report, National Institut of Standard and Technology. 2000.
- [76] A.T. Modak. Radiation from products of combustion. *Fire Research*, 1 :339–361, 1979.
- [77] M.F. Modest. *Radiative Heat Transfer*. Academic Press, 2nd edition, 2003.
- [78] J.B. Moss and K.N.C. Bray. A unified statistical model of the premixed turbulent flame. *Acta Astronautica*, 4 :291–319, 1977.
- [79] J.B. Moss and C.D. Stewart. Flamelet-based smoke properties for the field modelling of fires. *Fire Safety Journal*, 30 :229–250, 1997.
- [80] J.B. Moss, C.D. Stewart, and K.J. Young. Modeling soot formation and burnout in a high temperature laminar diffusin flame burning under oxygen-enriched conditions. *Combustion and Flame*, 101 :491–500, 1995.
- [81] J. Nagle and R.F. Strickland-Constable. Oxidation of carbon between 1000 and 2000 °C. *5th Carbon Conference*, 1 :154–164, 1962.
- [82] S. Nam and R.G. Bill. Numerical simulation of thermal plumes. *Fire Safety Journal*, 21 :231–256, 1993.
- [83] V.F. Nicolette, S.R. Tieszenand, A.R. Black, S.P. Domino, and T.J. O’Hern. A turbulence model for buoyant flows based on vorticity generation. Technical Report SAND2005-6273, SANDIA, 2005.
-

-
- [84] V. Novozhilov. Computational fluid dynamics of compartment fires. *Progress in Energy and Combustion Science*, 27 :611–666, 2001.
- [85] V. Novozhilov, B. Moghtaderi, D.F. Fletcher, and J.H. Kent. Computational fluid dynamics modelling of wood combustion. *Fire Safety Journal*, 27 :69–84, 1996.
- [86] T.J. O’Hern, E.J. Weckman, A.L. Gerhart, S.R. Tieszen, and R.W. Schefer. Experimental study of a turbulent buoyant helium plume. *Journal of Fluids Mechanics*, 544 :143–171, 2005.
- [87] A.E. Pearson. *Etude expérimentale des régimes de combustion d’un feu de compartiment dans des conditions de sous-ventilation*. PhD thesis, Université de Poitiers, 2007.
- [88] N. Peters. Laminar flamelet concept in turbulent combustion. *21th Symposium International of combustion*, pages 1231–1250, 1986.
- [89] N. Peters. *Turbulent combustion*. Cambridge University Press, 2000.
- [90] N. Peters and B. Rogg. *Reduced mechanisms for application in combustion systems*. Springer, 1993.
- [91] J.B.M. Pierce and J.B. Moss. Smoke production, radiation heat transfer and fire growth in a liquid-fuelled compartment fire. *Fire Safety Journal*, 42 :310–320, 2007.
- [92] M.A. Pivovarov, H. Zhang, D.E. Ramaker, P.A. Tatem, and F.W. Williams. Similarity solutions in buoyancy-controlled turbulent diffusion flame modeling (turbulent buoyant diffusion flame modeling). *Combustion and Flame*, 92 :308–319, 1993.
- [93] T. Poinso and D. Veynante. *Theoretical and Numerical Combustion*. Edwards, Inc., 2001.
- [94] S.B. Pope. Pdf methods for turbulent reacting flows. *Progress in Energy and Combustion Science*, 11 :119–195, 1985.
- [95] S.B. Pope. The evolution of surface in turbulence. *International Journal of Engineering Science*, 26 :445–469, 1988.
- [96] S.B. Pope. *Turbulent flows*. Cambridge University Press, 2000.
- [97] H. Pretrel. PRISME LEAK programme - analysis report. Technical Report SERCI-2009-410-DR-PRISME 35, Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire. 2010.
- [98] J.G. Quintiere. *Fundamentals of Fire Phenomena*. EWiley & Sons, Ltd, 2006.
- [99] J.G. Quintiere and B.S. Grove. A unified analysis for fire plume. *27th Symposium International of Combustion*, pages 2757–2766, 1998.
- [100] EDF R&D. Code saturne 1.3.2 practical user’s guide. Technical report. <http://www.code-saturne.org>, 2008.
- [101] EDF R&D. Code saturne 1.3.2 theory and programmer’s guide. Technical report. <http://www.code-saturne.org>, 2008.
- [102] G. Ribert, M. Champion, and P. Plion. Modelling turbulent reactive flows with variable equivalence ratio : application to the calculation of a reactive shear layer. *Combustion Science and Technologies*, 176 :907–923, 2004.
-

-
- [103] V. Robin. *Contribution à la Modélisation des Ecoulements Turbulents Réactifs Partiellement Prémélangés*. PhD thesis, Université de Poitiers, 2007.
- [104] W. Rodi. *Turbulence models and their application in hydraulics*. PhD thesis, University of Karlsruhe, 1980.
- [105] N.L. Ryder, J.A. Sutula, CH.F. Schemel, A.J. Hamer, and V.V. Brunt. Consequence modeling using the fire dynamics simulator. *Journal of Hazardous Materials*, 115 :149–154, 2004.
- [106] R. Sangras, Z. Dai, and G.M. Faeth. Mixing structure of plane self-preserving buoyant turbulent plumes. *Journal of Heat Transfer*, 120 :1033–1041, 1998.
- [107] A. Shabbir and W.K. George. Experiments on a round turbulent buoyant plume. *Journal of Fluid Mechanics*, 275 :1–32, 1994.
- [108] A. Shabbir and D.B. Taulbee. Evaluation of turbulence models for predicting buoyant flows. *Journal of Heat Transfer*, 112 :945–951, 1990.
- [109] T.H. Shih, W.W. Liou, A. Shabbir, Z. Yang, and J. Zhu. A new $k - \varepsilon$ eddy viscosity model for high reynolds number turbulent flows. *Computational Fluids*, 24 :227–238, 1995.
- [110] J. Smagorinski. General circulation experiments with the primitive equations. *Monthly Weather Review*, 91 :99–164, 1963.
- [111] A.Yu. Snegirev. Statistical modeling of thermal radiation transfer in buoyant turbulent diffusion flames. *Combustion and Flame*, 136 :51–71, 2004.
- [112] D.B. Spalding. Mixing and chemical reaction in steady confined turbulent flames. *13th Symposium International on Combustion*, pages 649–657, 1971.
- [113] S.R. Tieszen. On the fluid mechanics of the fire plumes. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 33 :67–92, 2001.
- [114] K.D. Steckler, J.G. Quintiere, and W.J. Rinkinen. Flow induced by fire in a compartment. Technical Report NBSIR-82-2520, National Bureau of Standards, September 1982.
- [115] K.J. Syed, C.D. Steawart, and J.B. Moss. Modelling soot formation and thermal radiation in buoyant turbulent diffusion flames. *23th Symposium International on Combustion*, pages 1533–1541, 1990.
- [116] P.A. Tesner, T.D. Snegiriova, and V.G. Knorre. Kinetics of dispersed carbon formation. *Combustion and Flame*, pages 1533–1541, 1990.
- [117] A. Tewarson. Ventilation effects on combustion products. *Toxicology*, 115 :145–156, 1996.
- [118] S.R. Tieszen, S.P. Domino, and A.R. Black. Validation of a simple turbulence model suitable for closure of temporally-filtered navier-stokes equations using a helium plume. Technical Report SAND2005-3210, SANDIA, 2005.
- [119] D. Veynante and L. Vervisch. Turbulent combustion modeling. *Progress in Energy and Combustion Science*, 28 :193–266, 2002.
-

-
- [120] P.L. Viollet. The modelling of turbulent recirculating flows for the purpose of reactor thermal-hydraulic analysis. *Nuclear Engineering and Design*, 99 :365–377, 1987.
- [121] H.Y. Wang and P. Joulain. Three-dimensional modeling for prediction of wall fire with buoyancy-induced flow along a vertical rectangular channel. *Combustion and Flame*, 105 :391–406, 1996.
- [122] H.Y. Wang and P. Joulain. Modeling on the interaction of the turbulent diffusion flames between a vertical burning wall and a pool fire. *5th International Symposium on Fire Safety Science*, pages 475–486, 1997.
- [123] H.Y. Wang, P. Joulain, and J.M. Most. Modeling on burning of large-scale vertical parallel surfaces with fire-induced flow. *Fire Safety Journal*, 32 :241–271, 1999.
- [124] J. Warnatz, U. Maas, and R.W. Dibble. *Combustion - Physical and Chemical Fundamentals, Modeling and Simulation, Experiments, Pollutant Formation 4ed Computational fluid dynamics in fire engineering*. Springer, 2006.
- [125] E.J. Weckman and X.X. Sobiesak. The oscillatory behaviour of medium scale pool fires. *22th Symposium International on Combustion*, pages 1299–1310, 1988.
- [126] J.X. Wen and L.Y. Huang. Modelling of confined jet fires under ventilation-controlled conditions. 34 :1–24, 2000.
- [127] J.X. Wen, K. Kang, T. Donchev, and J.M. Karwatzki. Validation of fds for the prediction of medium-scale pool fires. 42 :127–138, 2006.
- [128] P.J. Woodburn and R.E. Britter. Cfd simulations of a tunnel fire - part i. *Fire Safety Journal*, 26 :35–62, 1996.
- [129] J. Worthy, V. Sanderson, and P. Rubini. Comparison of modified $k - \varepsilon$ turbulence models for buoyant plumes. *Numerical Heat Transfer, Part B Fundamentals*, 39 :151–165, 2001.
- [130] H. Xue, J.C. Ho, and Y.M. Cheng. Comparison of different combustion models in enclosure fire simulation. *Fire Safety Journal*, 36 :37–54, 2001.
- [131] Z. Yan and G. Holmstedt. A two-equation turbulence model and its application to buoyant diffusion flame. *International of Journal of Heat and Mass Transfer*, 42 :1305–1315, 1999.
- [132] G.H. Yeoh and K.K. Yuen. *Computational fluid dynamics in fire engineering*. Butterworth - Heinemann, 2009.
- [133] G.H. Yeoh, R.K.K. Yuen, S.C.P. Chueng, and W.K. Kwok. On modelling combustion, radiation and soot processes in compartment fires. *Building and Environment*, 38 :771–785, 2003.
- [134] S. Yokoi. Study on the prevention of fire-spread caused by hot upward current. Technical report, Building Research Institute, Novembre 1960.
- [135] J. Zhang, S. Dembele, and J.X. Wen. Effect of radiation models on cfd simulations of upward flame spread. *8th International Symposium on Fire Safety Science*, 2008.
- [136] E.E. Zukoski. *Combustion Fundamentals of Fire*. Academic Press, 1995.
-

-
- [137] E.E. Zukoski, T. Kubota, and B. Cetegen. Entrainment in fire plumes. *Fire Safety Journal*, 3 :107–121, 1981.
-

Appendices

Annexe A

Détermination des paramètres de fonction densité de probabilité rectangle - pics de Dirac

La pdf est constituée de deux pics de Dirac d'amplitude D_0 et D_1 en $z = z_0 = 0$ et $z = z_1 = 1$ et d'un rectangle de hauteur h et de bornes z_2 et z_3 :

$$\tilde{P}(z) = D_0\delta(z - z_0) + D_1\delta(z - z_1) + h[\mathcal{H}(z - z_2) - \mathcal{H}(z - z_3)] \quad (\text{A.1})$$

A l'aide de la condition de normalisation et des deux premiers moments,

$$\left\{ \begin{array}{l} \int_0^1 P(z)dz = 1 \\ \int_0^1 zP(z)dz = \tilde{z} \\ \int_0^1 z^2 P(z)dz = \tilde{z}^2 + \widetilde{z''^2} \end{array} \right. \quad (\text{A.2})$$

les paramètres de la pdf peuvent être déterminés et donnent les formes présentées sur la figure [A.1](#).

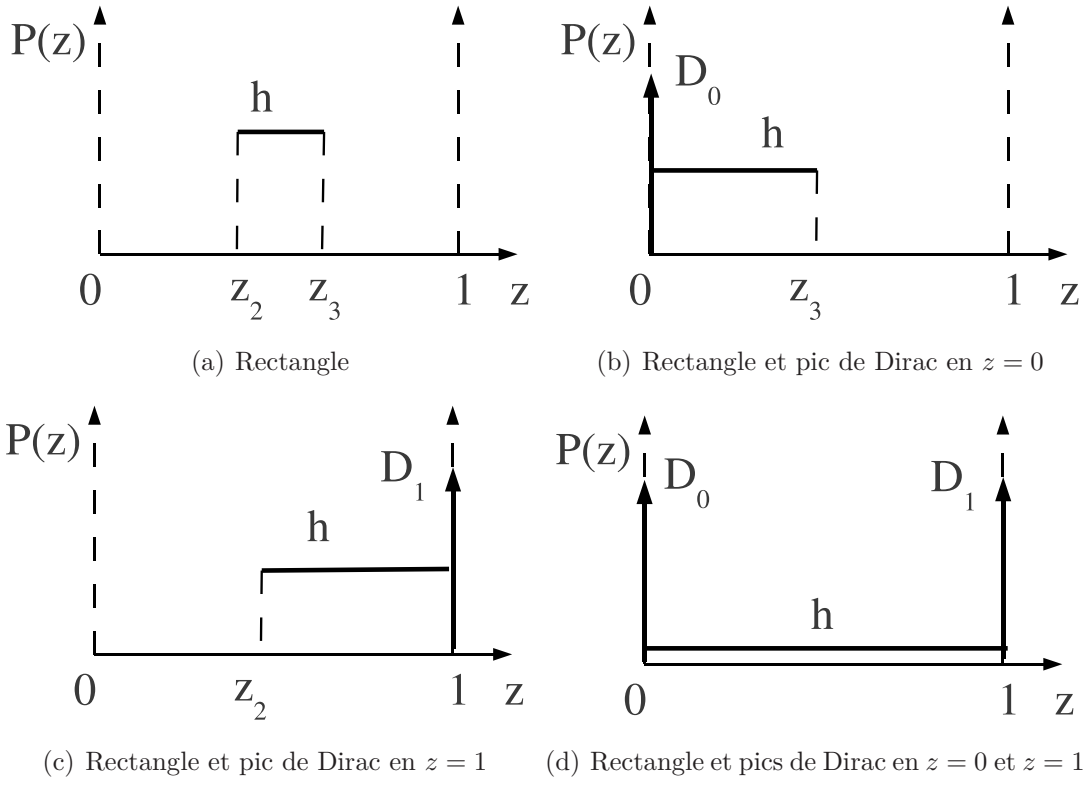


FIG. A.1 – Pdfs rectangle-Dirac

Les valeurs pour chaque paramètre et chaque forme de pdf sont :

- Rectangle seul (Fig. A.1.a) :

$$D_0 = 0 \quad ; \quad D_1 = 0$$

$$z_2 = \tilde{z} - \sqrt{3\tilde{z}''^2} \quad ; \quad z_3 = \tilde{z} + \sqrt{3\tilde{z}''^2} \quad (A.3)$$

- Rectangle et un pic de Dirac en $z = 0$ (Fig. A.1.b) :

$$D_0 = \frac{3\tilde{z}''^2 - \tilde{z}^2}{3(\tilde{z}''^2 + \tilde{z}^2)} \quad ; \quad D_1 = 0$$

$$z_2 = 0 \quad ; \quad z_3 = \frac{3(\tilde{z}''^2 + \tilde{z}^2)}{2\tilde{z}} \quad (A.4)$$

- Rectangle et un pic de Dirac en $z = 1$ (Fig. A.1.c) :

$$\begin{aligned} D_0 &= 0 & ; D_1 &= \frac{3\widetilde{z}''^2 - (1 - \widetilde{z})^2}{3[\widetilde{z}''^2 + (1 - \widetilde{z})^2]} \\ z_2 &= \frac{1 - 4\widetilde{z} + 3\widetilde{z}''^2 + 3\widetilde{z}^2}{2(\widetilde{z} - 1)} & ; z_3 &= 1 \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

- Rectangle et deux pics de Diracs en $z = 0$ et $z = 1$ (Fig. A.1.d) :

$$\begin{aligned} D_0 &= 1 - 4\widetilde{z} + 3\widetilde{z}^2 + 3\widetilde{z}''^2 & ; D_1 &= 3\widetilde{z}^2 + 3\widetilde{z}''^2 - 2\widetilde{z} \\ z_2 &= 0 & ; z_3 &= 1 \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

Annexe B

Relations entre le taux de réaction pour $\tilde{Y}_P$ et le taux de dissipation scalaire

B.1 Cas d'une chimie quadratique

Avec une chimie très simplifiée, nous savons écrire les fractions massiques et leur équation de transport indépendamment de la forme de la pdf. Ici, nous supposons des lois quadratiques pour les fractions massiques :

$$\begin{cases} Y_F = z^2 \\ Y_O = (1 - z)^2 \\ Y_P = 2z(1 - z) \end{cases} \quad (\text{B.1})$$

les fractions massiques moyennes dépendent alors de la fraction de mélange moyenne et de sa variance selon :

$$\begin{cases} \tilde{Y}_F = \tilde{z}^2 + \widetilde{z''^2} \\ \tilde{Y}_O = (1 - \tilde{z})^2 + \widetilde{z''^2} \\ \tilde{Y}_P = 2\tilde{z} - 2\tilde{z}^2 = 2\tilde{z} - 2\tilde{z}^2 - 2\widetilde{z''^2} \end{cases} \quad (\text{B.2})$$

Par la combinaison linéaire ci-dessus, nous établissons l'équation de transport pour la fraction massique des produits à partir des équations de transport pour la fraction de mélange moyenne, son carré et sa variance, présentée ci-après :

$$\begin{aligned}
& \underbrace{\frac{\partial \widetilde{\rho z}}{\partial t}}_I + \underbrace{\frac{\partial \widetilde{\rho u_j z}}{\partial x_j}}_{II} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\widetilde{\rho u_j'' z''} \right)}_{III} = \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\overline{\rho D \frac{\partial z}{\partial x_j}} \right)}_{IV} \\
& \underbrace{\frac{\partial \widetilde{\rho z^2}}{\partial t}}_I + \underbrace{\frac{\partial \widetilde{\rho u_j z^2}}{\partial x_j}}_{II} + \underbrace{2\widetilde{z} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\widetilde{\rho u_j'' z''} \right)}_{III} = \underbrace{2\widetilde{z} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\overline{\rho D \frac{\partial z}{\partial x_j}} \right)}_{IV} \\
& \underbrace{\frac{\partial \widetilde{\rho z''^2}}{\partial t}}_I + \underbrace{\frac{\partial \widetilde{\rho u_j z''^2}}{\partial x_j}}_{II} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\widetilde{\rho u_j'' z''^2} \right)}_{III} = \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\overline{\rho D \frac{\partial z''^2}{\partial x_j}} \right)}_{IV} \\
& \quad + \underbrace{2z'' \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\overline{\rho D \frac{\partial \widetilde{z}}{\partial x_j}} \right)}_V - \underbrace{2\widetilde{\rho u_j'' z''} \frac{\partial \widetilde{z}}{\partial x_j}}_{VI} - \underbrace{2\rho D \frac{\partial z''}{\partial x_j} \frac{\partial z''}{\partial x_j}}_{VII}
\end{aligned} \tag{B.3}$$

Les terme *I* et *II* donnent simplement la dérivée temporelle et le terme de transport. Pour le terme *III*, la décomposition de Y_P en moyenne et fluctuation nous donne une relation sur les flux turbulents :

$$\begin{aligned}
Y_P'' &= 2z'' - 4\widetilde{z}z'' - 2z''^2 + 2\widetilde{z}''^2 \\
u_j'' Y_P'' &= 2u_j'' z'' - 4\widetilde{z}u_j'' z'' - 2u_j'' z''^2 + 2u_j'' \widetilde{z}''^2 \\
\widetilde{u_j'' Y_P''} &= 2\widetilde{u_j'' z''} - 4\widetilde{\widetilde{z}u_j'' z''} - 2\widetilde{u_j'' z''^2}
\end{aligned} \tag{B.4}$$

ce qui nous permet de simplifier le terme de transport turbulent :

$$\begin{aligned}
& 2\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\widetilde{\rho u_j'' z''} \right) - 4\widetilde{z} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\widetilde{\rho u_j'' z''} \right) - 2\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\widetilde{\rho u_j'' z''^2} \right) \\
& = 2\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\widetilde{\rho u_j'' z''} \right) - 4\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\widetilde{\rho \widetilde{z} u_j'' z''} \right) + 4\widetilde{\rho u_j'' z''} \frac{\partial \widetilde{z}}{\partial x_j} - 2\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\widetilde{\rho u_j'' z''^2} \right) \\
& = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\widetilde{\rho u_j'' Y_P''} \right) + 4\widetilde{\rho u_j'' z''} \frac{\partial \widetilde{z}}{\partial x_j}
\end{aligned} \tag{B.5}$$

En exprimant la variance par sa définition, le terme *IV* devient :

$$\begin{aligned}
& 2\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\overline{\rho D \frac{\partial z}{\partial x_j}} \right) - 4\widetilde{z} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\overline{\rho D \frac{\partial z}{\partial x_j}} \right) - 2\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\overline{\rho D \frac{\partial z''^2}{\partial x_j}} \right) \\
& = 2\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\overline{\rho D \frac{\partial z}{\partial x_j}} \right) - 4\widetilde{z} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\overline{\rho D \frac{\partial z}{\partial x_j}} \right) \\
& \quad - 2\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\overline{\rho D \frac{\partial z^2}{\partial x_j}} \right) + 4\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\overline{\rho D \frac{\partial \widetilde{z} z}{\partial x_j}} \right) - 2\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\overline{\rho D \frac{\partial \widetilde{z}^2}{\partial x_j}} \right)
\end{aligned} \tag{B.6}$$

En décomposant le quatrième terme selon :

$$\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\overline{\rho D \frac{\partial \tilde{z} z}{\partial x_j}} \right) = \tilde{z} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\overline{\rho D \frac{\partial z}{\partial x_j}} \right) + z \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\overline{\rho D \frac{\partial \tilde{z}}{\partial x_j}} \right) + 2 \overline{\rho D \frac{\partial z}{\partial x_j} \frac{\partial \tilde{z}}{\partial x_j}} \quad (\text{B.7})$$

il vient :

$$\begin{aligned} & 2 \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\overline{\rho D \frac{\partial z}{\partial x_j}} \right) - 4 \tilde{z} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\overline{\rho D \frac{\partial z}{\partial x_j}} \right) - 2 \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\overline{\rho D \frac{\partial z''^2}{\partial x_j}} \right) \\ &= 2 \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\overline{\rho D \frac{\partial z}{\partial x_j}} \right) - 2 \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\overline{\rho D \frac{\partial z^2}{\partial x_j}} \right) \\ &+ 4 z \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\overline{\rho D \frac{\partial \tilde{z}}{\partial x_j}} \right) + 8 \overline{\rho D \frac{\partial z}{\partial x_j} \frac{\partial \tilde{z}}{\partial x_j}} - 2 \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\overline{\rho D \frac{\partial \tilde{z}^2}{\partial x_j}} \right) \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

et en remplaçant par la définition de Y_P , nous voyons apparaître le terme de diffusion :

$$\begin{aligned} & 2 \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\overline{\rho D \frac{\partial z}{\partial x_j}} \right) - 4 \tilde{z} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\overline{\rho D \frac{\partial z}{\partial x_j}} \right) - 2 \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\overline{\rho D \frac{\partial z''^2}{\partial x_j}} \right) \\ &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\overline{\rho D \frac{\partial Y_P}{\partial x_j}} \right) + 4 z \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\overline{\rho D \frac{\partial \tilde{z}}{\partial x_j}} \right) + 8 \overline{\rho D \frac{\partial z}{\partial x_j} \frac{\partial \tilde{z}}{\partial x_j}} - 2 \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\overline{\rho D \frac{\partial \tilde{z}^2}{\partial x_j}} \right) \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

En décomposant z en moyenne et fluctuation dans les second et troisième termes et en décomposant le dernier terme selon :

$$\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\overline{\rho D \frac{\partial \tilde{z}^2}{\partial x_j}} \right) = 2 \tilde{z} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\overline{\rho D \frac{\partial \tilde{z}}{\partial x_j}} \right) + 2 \overline{\rho D \frac{\partial \tilde{z}}{\partial x_j} \frac{\partial \tilde{z}}{\partial x_j}} \quad (\text{B.10})$$

il vient :

$$\begin{aligned} & 2 \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\overline{\rho D \frac{\partial z}{\partial x_j}} \right) - 4 \tilde{z} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\overline{\rho D \frac{\partial z}{\partial x_j}} \right) - 2 \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\overline{\rho D \frac{\partial z''^2}{\partial x_j}} \right) \\ &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\overline{\rho D \frac{\partial Y_P}{\partial x_j}} \right) + 4 z'' \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\overline{\rho D \frac{\partial \tilde{z}}{\partial x_j}} \right) + 4 \overline{\rho D \frac{\partial z''}{\partial x_j} \frac{\partial \tilde{z}}{\partial x_j}} + 4 \overline{\rho D \frac{\partial \tilde{z}}{\partial x_j} \frac{\partial z''}{\partial x_j}} \end{aligned} \quad (\text{B.11})$$

L'équation pour la combinaison linéaire $2\tilde{z} - 2\tilde{z}^2 - 2\tilde{z}''^2 = \tilde{Y}_P$ devient alors :

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \tilde{\rho} \tilde{Y}_P}{\partial t} + \frac{\partial \tilde{\rho} \tilde{u}_j \tilde{Y}_P}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\overline{\tilde{\rho} \tilde{u}_j'' \tilde{Y}_P''} \right) + 4 \overline{\tilde{\rho} \tilde{u}_j'' \tilde{z}''} \frac{\partial \tilde{z}}{\partial x_j} = \\ & \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\overline{\rho D \frac{\partial Y_P}{\partial x_j}} \right) + 4 z'' \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\overline{\rho D \frac{\partial \tilde{z}}{\partial x_j}} \right) + 4 \overline{\rho D \frac{\partial z''}{\partial x_j} \frac{\partial \tilde{z}}{\partial x_j}} + 4 \overline{\rho D \frac{\partial \tilde{z}}{\partial x_j} \frac{\partial z''}{\partial x_j}} \\ & - 4 z'' \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\overline{\rho D \frac{\partial \tilde{z}}{\partial x_j}} \right) + 4 \overline{\tilde{\rho} \tilde{u}_j'' \tilde{z}''} \frac{\partial \tilde{z}}{\partial x_j} + 4 \overline{\rho D \frac{\partial z''}{\partial x_j} \frac{\partial \tilde{z}}{\partial x_j}} \end{aligned} \quad (\text{B.12})$$

Après simplification, on obtient finalement :

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_P}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{Y}_P}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\rho} \tilde{u}_j'' \tilde{Y}_P'' \right) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\rho} D \frac{\partial \tilde{Y}_P}{\partial x_j} \right) + 4 \bar{\rho} D \frac{\partial \tilde{z}}{\partial x_j} \frac{\partial \tilde{z}}{\partial x_j} \quad (\text{B.13})$$

B.2 Cas général

A l'aide de l'équation de transport des espèces :

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_i}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{Y}_i}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\bar{\rho} D + \frac{\mu_t}{\sigma_t} \right) \frac{\partial \tilde{Y}_i}{\partial x_j} \right] + \bar{S}_{Y_i} \quad (\text{B.14})$$

et en tenant compte de l'équation de continuité, nous obtenons :

$$\bar{S}_{Y_i} = \bar{\rho} \frac{\partial \tilde{Y}_i}{\partial t} + \bar{\rho} \tilde{u}_j \frac{\partial \tilde{Y}_i}{\partial x_j} - \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\bar{\rho} D + \frac{\mu_t}{\sigma_t} \right) \frac{\partial \tilde{Y}_i}{\partial x_j} \right] \quad (\text{B.15})$$

Les fractions massiques étant des fonctions d'état ne dépendant que de la fraction de mélange et de sa variance, les dérivées partielles des fractions massiques peuvent s'exprimer en fonction des dérivées partielles de la fraction de mélange et de sa variance

$$\begin{cases} \frac{\partial \tilde{Y}_i}{\partial t} = \frac{\partial \tilde{Y}_i}{\partial \tilde{z}} \frac{\partial \tilde{z}}{\partial t} + \frac{\partial \tilde{Y}_i}{\partial \tilde{z}''^2} \frac{\partial \tilde{z}''^2}{\partial t} \\ \frac{\partial \tilde{Y}_i}{\partial x_j} = \frac{\partial \tilde{Y}_i}{\partial \tilde{z}} \frac{\partial \tilde{z}}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{Y}_i}{\partial \tilde{z}''^2} \frac{\partial \tilde{z}''^2}{\partial x_j} \end{cases} \quad (\text{B.16})$$

L'introduction des expressions B.16 dans l'équation B.15 donne

$$\begin{aligned} \bar{S}_{Y_i} = & \bar{\rho} \left(\frac{\partial \tilde{Y}_i}{\partial \tilde{z}} \frac{\partial \tilde{z}}{\partial t} + \frac{\partial \tilde{Y}_i}{\partial \tilde{z}''^2} \frac{\partial \tilde{z}''^2}{\partial t} \right) + \bar{\rho} \tilde{u}_j \left(\frac{\partial \tilde{Y}_i}{\partial \tilde{z}} \frac{\partial \tilde{z}}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{Y}_i}{\partial \tilde{z}''^2} \frac{\partial \tilde{z}''^2}{\partial x_j} \right) \\ & - \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\bar{\rho} D + \frac{\mu_t}{\sigma_t} \right) \left(\frac{\partial \tilde{Y}_i}{\partial \tilde{z}} \frac{\partial \tilde{z}}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{Y}_i}{\partial \tilde{z}''^2} \frac{\partial \tilde{z}''^2}{\partial x_j} \right) \right] \end{aligned} \quad (\text{B.17})$$

Après réarrangement, on retrouve les termes temporels, de convection et de diffusion laminaire des équations de transport pour la fraction de mélange et sa variance

$$\begin{aligned} \bar{S}_{Y_i} = & \frac{\partial \tilde{Y}_i}{\partial \tilde{z}} \left\{ \frac{\partial \tilde{z}}{\partial t} + \bar{\rho} \tilde{u}_j \frac{\partial \tilde{z}}{\partial x_j} - \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\bar{\rho} D + \frac{\mu_t}{\sigma_t} \right) \frac{\partial \tilde{z}}{\partial x_j} \right] \right\} \\ & + \frac{\partial \tilde{Y}_i}{\partial \tilde{z}''^2} \left\{ \frac{\partial \tilde{z}''^2}{\partial t} + \bar{\rho} \tilde{u}_j \frac{\partial \tilde{z}''^2}{\partial x_j} - \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\bar{\rho} D + \frac{\mu_t}{\sigma_t} \right) \frac{\partial \tilde{z}''^2}{\partial x_j} \right] \right\} \\ & - \left(\bar{\rho} D + \frac{\mu_t}{\sigma_t} \right) \left(\frac{\partial^2 \tilde{Y}_i}{\partial \tilde{z}^2} \frac{\partial \tilde{z}}{\partial x_j} \frac{\partial \tilde{z}}{\partial x_j} + 2 \frac{\partial^2 \tilde{Y}_i}{\partial \tilde{z} \partial \tilde{z}''^2} \frac{\partial \tilde{z}}{\partial x_j} \frac{\partial \tilde{z}''^2}{\partial x_j} + \frac{\partial^2 \tilde{Y}_i}{\partial \tilde{z}''^2} \frac{\partial \tilde{z}''^2}{\partial x_j} \frac{\partial \tilde{z}''^2}{\partial x_j} \right) \end{aligned} \quad (\text{B.18})$$

et sont remplacés par leur équivalent que sont les termes sources d'après les équations de transport de la fraction de mélange et sa variance

$$\begin{aligned} \overline{S}_{Y_i} = & \frac{\partial \tilde{Y}_i}{\partial \tilde{z}} \overline{S}_{\tilde{z}} + \frac{\partial \tilde{Y}_i}{\partial \tilde{z}''^2} \overline{S}_{\tilde{z}''^2} \\ & - \left(\overline{\rho D} + \frac{\mu_t}{\sigma_t} \right) \left(\frac{\partial^2 \tilde{Y}_i}{\partial \tilde{z}^2} \frac{\partial \tilde{z}}{\partial x_j} \frac{\partial \tilde{z}}{\partial x_j} + 2 \frac{\partial^2 \tilde{Y}_i}{\partial \tilde{z} \partial \tilde{z}''^2} \frac{\partial \tilde{z}}{\partial x_j} \frac{\partial \tilde{z}''^2}{\partial x_j} + \frac{\partial^2 \tilde{Y}_i}{\partial \tilde{z}''^2} \frac{\partial \tilde{z}''^2}{\partial x_j} \frac{\partial \tilde{z}''^2}{\partial x_j} \right) \end{aligned} \quad (\text{B.19})$$

et en réarrangeant l'équation précédente avec les expressions des termes sources,

$$\begin{aligned} \overline{S}_{\tilde{z}} &= 0 \\ \overline{S}_{\tilde{z}''^2} &= 2 \frac{\mu_t}{\sigma_t} \frac{\partial \tilde{z}}{\partial x_j} \frac{\partial \tilde{z}}{\partial x_j} - \overline{\rho \chi} \text{ avec } \overline{\rho \chi} = \frac{\overline{\rho}}{R_{\tilde{z}}} \frac{\varepsilon}{k} \tilde{z}''^2 \end{aligned} \quad (\text{B.20})$$

on obtient un terme source comportant trois contributions : le premier terme traduit une consommation des réactifs par la dissipation des fluctuations de richesse, le second terme traduit l'alimentation de la zone de réaction en réactifs par la diffusion turbulente et le dernier terme est une contribution par la diffusion laminaire et turbulente à cette réalimentation :

$$\begin{aligned} \overline{S}_{Y_i} = & \underbrace{- \frac{\partial \tilde{Y}_i}{\partial \tilde{z}''^2} \overline{\rho \chi}}_{\text{reaction}} + \underbrace{2 \frac{\mu_t}{\sigma_t} \frac{\partial \tilde{Y}_i}{\partial \tilde{z}''^2} \frac{\partial \tilde{z}}{\partial x_j} \frac{\partial \tilde{z}}{\partial x_j}}_{\text{diffusion turbulente}} \\ & - \underbrace{\left(\overline{\rho D} + \frac{\mu_t}{\sigma_t} \right) \left(\frac{\partial^2 \tilde{Y}_i}{\partial \tilde{z}^2} \frac{\partial \tilde{z}}{\partial x_j} \frac{\partial \tilde{z}}{\partial x_j} + 2 \frac{\partial^2 \tilde{Y}_i}{\partial \tilde{z} \partial \tilde{z}''^2} \frac{\partial \tilde{z}}{\partial x_j} \frac{\partial \tilde{z}''^2}{\partial x_j} + \frac{\partial^2 \tilde{Y}_i}{\partial \tilde{z}''^2} \frac{\partial \tilde{z}''^2}{\partial x_j} \frac{\partial \tilde{z}''^2}{\partial x_j} \right)}_{\text{termes complémentaires}} \end{aligned} \quad (\text{B.21})$$

Suivant l'hypothèse de chimie infiniment rapide, le micro-mélange est le phénomène limitant la réaction. Le terme de dissipation étant le seul existant même en l'absence de gradient de fraction de mélange (fraction de mélange constante ou particule fluide fermée à la diffusion), est le seul terme identifiable au terme source chimique.

La figure B.1 présente l'évolution des dérivées intervenants dans les termes complémentaires. On constate que les dérivées $\frac{\partial \tilde{Y}_P}{\partial \tilde{z}''^2}$ et $\frac{\partial^2 \tilde{Y}_P}{\partial \tilde{z}^2}$ sont du même ordre de grandeur et le plus souvent de même signe. Le premier terme complémentaire équilibre donc le terme de production de variance.

$$- \frac{\partial^2 \tilde{Y}_i}{\partial \tilde{z}^2} \sim 2 \frac{\partial \tilde{Y}_i}{\partial \tilde{z}''^2} \quad (\text{B.22})$$

On constate également que la dérivée croisée $\frac{\partial^2 \tilde{Y}_i}{\partial \tilde{z} \partial \tilde{z}''^2}$ est très faible, le second terme complémentaire est donc négligeable devant les autres.

$$2 \frac{\partial^2 \tilde{Y}_i}{\partial \tilde{z} \partial \tilde{z}''^2} \frac{\partial \tilde{z}''^2}{\partial x_j} \ll \frac{\partial^2 \tilde{Y}_i}{\partial \tilde{z}^2} \text{ ou } \frac{\partial^2 \tilde{Y}_i}{\partial \tilde{z}''^2} \quad (\text{B.23})$$

Enfin, le troisième terme complémentaire est comparé au premier terme identifié comme le taux de réaction. Pour cela, le gradient de variance est estimé à l'aide de l'équation de transport pour la variance. En se plaçant dans un écoulement unidimensionnel à fraction de mélange constante et en négligeant la diffusion, le gradient peut être relié au taux de dissipation moyen (fermé par une relaxation linéaire) à l'aide de l'équation de transport pour la variance de la fraction de mélange.

$$\tilde{\rho} \tilde{u} \frac{\partial \tilde{z}''^2}{\partial x_j} \sim \frac{\bar{\rho}}{R_{\tilde{z}}} \frac{\varepsilon}{k} \tilde{z}''^2 \quad (\text{B.24})$$

Le troisième terme complémentaire peut alors se réécrire :

$$\frac{\mu_t}{\sigma_t} \frac{\partial^2 \tilde{Y}_i}{\partial \tilde{z}''^2} \frac{\partial \tilde{z}''^2}{\partial x_j} \frac{\partial \tilde{z}''^2}{\partial x_j} \sim \bar{\rho} \frac{C_\mu}{\sigma_t} \frac{k^2}{\varepsilon} \frac{\partial^2 \tilde{Y}_i}{\partial \tilde{z}''^2} \left(\frac{\varepsilon}{k} \frac{\tilde{z}''^2}{R_{\tilde{z}} \tilde{u}} \right)^2 \sim \frac{\partial^2 \tilde{Y}_i}{\partial \tilde{z}''^2} \frac{C_\mu}{\sigma_t} \frac{\tilde{z}''^2}{R_{\tilde{z}}} \bar{\rho} \chi \quad (\text{B.25})$$

On peut donc comparer la dérivée première par rapport à la variance et la dérivée seconde multipliée par la variance. La figure B.1 montre que cette dernière est du même ordre de grandeur que la première. Le coefficient $\frac{C_\mu}{\sigma_t} \frac{1}{R_{\tilde{z}}}$ étant de l'ordre de 10^{-1} , le troisième terme complémentaire est donc négligeable devant le taux de réaction.

$$\frac{\partial^2 \tilde{Y}_i}{\partial \tilde{z}''^2} \times \frac{C_\mu}{\sigma_t} \frac{\tilde{z}''^2}{R_{\tilde{z}}} \ll \frac{\partial \tilde{Y}_i}{\partial \tilde{z}''^2} \quad (\text{B.26})$$

Finalement, le taux de réaction chimique est identifié au taux de dissipation pondéré par la variation des fractions massiques par rapport à la variance de la fraction de mélange, soit :

$$\tilde{\omega}_i = - \frac{\partial \tilde{Y}_i}{\partial \tilde{z}''^2} \bar{\rho} \tilde{\chi} \quad (\text{B.27})$$

le terme de production par le carré du gradient de la moyenne traduisant l'alimentation en réactifs et les termes complémentaires, négligeables, la diffusion de produits dans la zone de réaction.

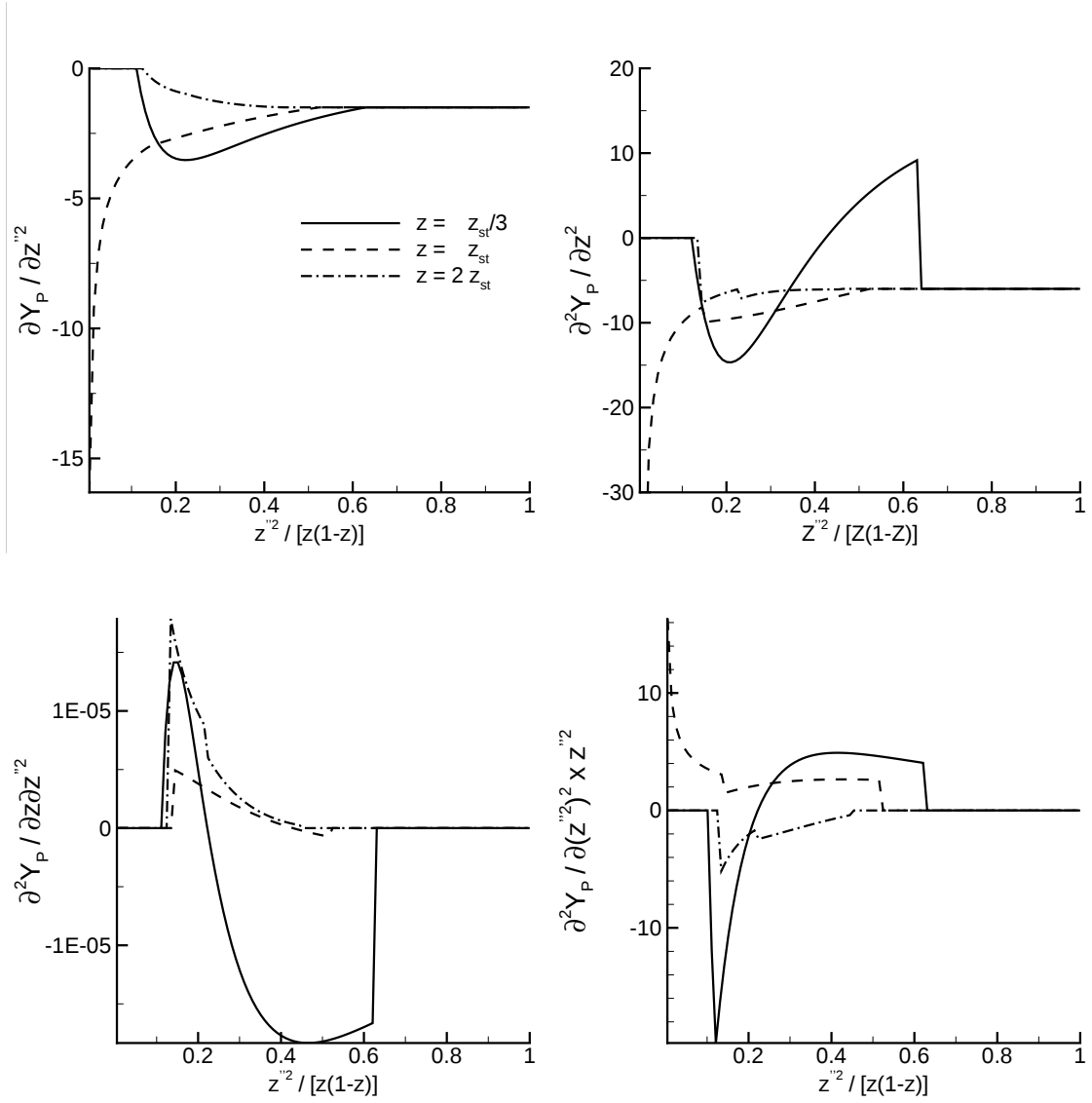


FIG. B.1 – Evolution de $\frac{\partial \tilde{Y}_P}{\partial z''^2}$, $\frac{\partial^2 \tilde{Y}_P}{\partial z''^2}$, $\frac{\partial^3 \tilde{Y}_P}{\partial z''^2}$ et $\frac{\partial^4 \tilde{Y}_P}{\partial z''^2} \times \tilde{z}''^2$ pour la pdf rectangle-Dirac pour trois fractions de mélange moyenne en fonction de la variance adimensionnée $\tilde{z}''^2 / [\tilde{z}(1 - \tilde{z})]$

Annexe C

Expression du taux de réaction obtenue par dérivation pour une chimie infiniment rapide

Le taux de réaction obtenu par dérivation s'exprime selon :

$$\tilde{\omega}_i = -\tilde{\rho}\tilde{\chi}\frac{\partial\tilde{Y}_i}{\partial\tilde{z}''^2} \quad (\text{C.1})$$

Les lois d'état pour une chimie infiniment rapide sont :

$z < z_{st}$ (côté pauvre)

$z > z_{st}$ (côté riche)

$$\left\{ \begin{array}{l} Y_F = 0 \\ Y_O = Y_O^0 \left(1 - \frac{z}{z_{st}}\right) \\ Y_P = 1 - Y_F - Y_O \end{array} \right. \quad \left\{ \begin{array}{l} Y_F = Y_F^1 \frac{z - z_{st}}{1 - z_{st}} \\ Y_O = 0 \\ Y_P = 1 - Y_F - Y_O \end{array} \right. \quad (\text{C.2})$$

et peuvent s'écrire sous la forme $Y_i = c_i + c_i z$. Les fractions massiques moyennes s'obtiennent en intégrant le produits des lois d'état par la pdf :

$$\tilde{Y}_i = \int_0^1 Y_i(z) \tilde{P}(z) dz \quad (\text{C.3})$$

C.1 Distribution de Curl

La pdf est constituée de deux pics de Dirac d'amplitude D_0 et D_1 :

$$\tilde{P}(z) = D_0 \delta(z - z_0) + D_1 \delta(z - z_1) \quad (\text{C.4})$$

dont les deux premiers moments et la condition de normalisation sont vérifiés dès que :

$$\begin{aligned} D_0 &= \tilde{z}; & D_1 &= 1 - \tilde{z} \\ z_0 &= \tilde{z} - \sqrt{\tilde{z}''^2 \frac{D_1}{D_0}}; & z_1 &= \tilde{z} + \sqrt{\tilde{z}''^2 \frac{D_0}{D_1}} \end{aligned} \quad (\text{C.5})$$

Les fractions massiques moyennes s'expriment donc selon :

$$\tilde{Y}_i = (c_{p,i} + d_{p,i}z_0)D_0 + (c_{r,i} + d_{r,i}z_1)D_1 \quad (\text{C.6})$$

où les indices p et r indiquent les parties pauvre et riche des fonctions linéaires décrivant l'évolution des fractions massiques. En remplaçant les paramètres par leur expression, nous obtenons :

$$\tilde{Y}_i = (c_{p,i} + d_{p,i}\tilde{z})D_0 + (c_{r,i} + d_{r,i}\tilde{z})D_1 + (d_{r,i} - d_{p,i})\sqrt{\tilde{z}(1-\tilde{z})\tilde{z}''^2} \quad (\text{C.7})$$

La dérivée des fractions massiques moyennes par rapport à la variance se réduit donc à :

$$\frac{\partial \tilde{Y}_i}{\partial \tilde{z}''^2} = \frac{d_{r,i} - d_{p,i}}{2} \sqrt{\frac{\tilde{z}(1-\tilde{z})}{\tilde{z}''^2}} \quad (\text{C.8})$$

C.2 Pdf Rectangle - Pics de Dirac

La pdf est constituée de deux pics de Dirac d'amplitude D_0 et D_1 en $z = z_0 = 0$ et $z = z_1 = 1$ et d'un rectangle de hauteur h et de bornes z_2 et z_3 :

$$\tilde{P}(z) = D_0\delta(z - z_0) + D_1\delta(z - z_1) + h[\mathcal{H}(z - z_2) - \mathcal{H}(z - z_3)] \quad (\text{C.9})$$

dont les expressions sont données dans l'annexe A. Après intégration, les fractions massiques moyennes sont données par la formule :

$$\begin{aligned} \tilde{Y}_i &= D_0 Y_O^0 + D_1 Y_F^1 \\ &+ \left[c_{r,i}(z_3 - z_{st}) + \frac{1}{2}d_{r,i}(z_3^2 - z_{st}^2) + c_{p,i}(z_{st} - z_2) + \frac{1}{2}d_{p,i}(z_{st}^2 - z_2^2) \right] h \end{aligned} \quad (\text{C.10})$$

La dérivée des fractions massiques par rapport à la variance s'exprime alors selon :

$$\frac{\partial \tilde{Y}_i}{\partial \tilde{z}''^2} = \frac{\partial \tilde{Y}_i}{\partial D_0} \frac{\partial D_0}{\partial \tilde{z}''^2} + \frac{\partial \tilde{Y}_i}{\partial D_1} \frac{\partial D_1}{\partial \tilde{z}''^2} + \frac{\partial \tilde{Y}_i}{\partial z_2} \frac{\partial z_2}{\partial \tilde{z}''^2} + \frac{\partial \tilde{Y}_i}{\partial z_3} \frac{\partial z_3}{\partial \tilde{z}''^2} + \frac{\partial \tilde{Y}_i}{\partial h} \frac{\partial h}{\partial \tilde{z}''^2} \quad (\text{C.11})$$

avec les dérivées des fractions massiques par rapport au rapport aux paramètres de la pdf, où les coefficients c_i et d_i représentent les coefficient pauvre ou riche :

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \tilde{Y}_i}{\partial D_0} &= Y_O^0 & \frac{\partial \tilde{Y}_i}{\partial D_1} &= Y_F^1 \\
 \frac{\partial \tilde{Y}_i}{\partial z_2} &= -(c_i + d_i z_2)h & \frac{\partial \tilde{Y}_i}{\partial z_3} &= (c_i + d_i z_3)h \\
 \frac{\partial \tilde{Y}_i}{\partial h} &= c_i(z_3 - z_2) + \frac{1}{2}d_i(z_3^2 - z_2^2)
 \end{aligned} \tag{C.12}$$

et les dérivées des paramètres par rapport à la variance selon la forme de la pdf :

- Rectangle seul

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial D_0}{\partial \widetilde{z''^2}} &= 0 & ; & \frac{\partial D_1}{\partial \widetilde{z''^2}} = 0 \\
 \frac{\partial z_2}{\partial \widetilde{z''^2}} &= -\frac{\partial z_3}{\partial \widetilde{z''^2}} & ; & \frac{\partial z_3}{\partial \widetilde{z''^2}} = -\frac{3}{2\sqrt{3\widetilde{z''^2}}}
 \end{aligned} \tag{C.13}$$

- Rectangle et un pic de Dirac en $z = 0$

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial D_0}{\partial \widetilde{z''^2}} &= \frac{4}{3} \frac{\widetilde{z}^2}{(\widetilde{z''^2} + \widetilde{z}^2)^2} & ; & \frac{\partial D_1}{\partial \widetilde{z''^2}} = 0 \\
 \frac{\partial z_2}{\partial \widetilde{z''^2}} &= 0 & ; & \frac{\partial z_3}{\partial \widetilde{z''^2}} = \frac{3}{2\widetilde{z}}
 \end{aligned} \tag{C.14}$$

- Rectangle et un pic de Dirac en $z = 1$

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial D_0}{\partial \widetilde{z''^2}} &= 0 & ; & \frac{\partial D_1}{\partial \widetilde{z''^2}} = \frac{4}{3} \frac{(1 - \widetilde{z})^2}{(\widetilde{z''^2} + (1 - \widetilde{z})^2)^2} \\
 \frac{\partial z_2}{\partial \widetilde{z''^2}} &= \frac{3}{2(\widetilde{z} - 1)} & ; & \frac{\partial z_3}{\partial \widetilde{z''^2}} = 0
 \end{aligned} \tag{C.15}$$

- Rectangle et deux pics de Diracs en $z = 0$ et $z = 1$

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial D_0}{\partial \widetilde{z''^2}} &= 0 & ; & \frac{\partial D_1}{\partial \widetilde{z''^2}} = \frac{4}{3} \frac{(1 - \widetilde{z})^2}{(\widetilde{z''^2} + (1 - \widetilde{z})^2)^2} \\
 \frac{\partial z_2}{\partial \widetilde{z''^2}} &= \frac{3}{2(\widetilde{z} - 1)} & ; & \frac{\partial z_3}{\partial \widetilde{z''^2}} = 0
 \end{aligned} \tag{C.16}$$

C.3 Fonction β

La pdf considérée est une fonction β :

$$\tilde{P}(z) = \beta(a, b, z) = \frac{z^{a-1}(1-z)^{b-1}}{\int_0^1 z^{a-1}(1-z)^{b-1} dz} \tag{C.17}$$

dont les paramètres sont donnés par :

$$a = \widetilde{z}\gamma, b = (1 - \widetilde{z})\gamma \text{ et } \gamma = \frac{\widetilde{z}(1 - \widetilde{z})}{\widetilde{z''^2}} - 1 \quad (\text{C.18})$$

La fonction β complète est notée $\mathcal{B}(a, b)$:

$$\mathcal{B}(a, b) = \int_0^1 z^{a-1} (1 - z)^{b-1} dz \quad (\text{C.19})$$

Les fractions massiques moyennes s'écrivent donc :

$$\widetilde{Y}_i = \frac{1}{\mathcal{B}(a, b)} \int_0^1 Y_i(z) z^{a-1} (1 - z)^{b-1} dz = \int_0^1 Y_i(z) \beta(a, b, z) dz \quad (\text{C.20})$$

Pour dériver par rapport à la variance, nous avons :

$$\frac{\partial \widetilde{Y}_i}{\partial g} = \frac{\partial \widetilde{Y}_i}{\partial a} \frac{\partial a}{\partial g} + \frac{\partial \widetilde{Y}_i}{\partial b} \frac{\partial b}{\partial g} \quad (\text{C.21})$$

En dérivant par rapport au premier paramètre a , on obtient :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \widetilde{Y}_i}{\partial a} &= \frac{1}{\mathcal{B}(a, b)} \int_0^1 Y_i(z) \frac{\partial}{\partial a} [z^{a-1} (1 - z)^{b-1}] dz \\ &\quad - \frac{1}{[\mathcal{B}(a, b)]^2} \frac{\partial \mathcal{B}(a, b)}{\partial a} \int_0^1 Y_i(z) [z^{a-1} (1 - z)^{b-1}] dz \\ &= \frac{1}{\mathcal{B}(a, b)} \int_0^1 Y_i(z) \ln(z) [z^{a-1} (1 - z)^{b-1}] dz - \frac{\widetilde{Y}_i}{\mathcal{B}(a, b)} \frac{\partial \mathcal{B}(a, b)}{\partial a} \end{aligned} \quad (\text{C.22})$$

La dérivée de la fonction β complète s'écrit :

$$\frac{1}{\mathcal{B}(a, b)} \frac{\partial \mathcal{B}(a, b)}{\partial a} = \frac{1}{\mathcal{B}(a, b)} \int_0^1 \ln(z) z^{a-1} (1 - z)^{b-1} dz = \int_0^1 \ln(z) \beta(a, b, z) dz \quad (\text{C.23})$$

et on obtient pour la dérivée complète des fractions massiques moyennes par rapport aux deux paramètres :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \widetilde{Y}_i}{\partial a} &= \int_0^1 [Y_i(z) - \widetilde{Y}_i] \ln(z) \beta(a, b, z) dz \\ \frac{\partial \widetilde{Y}_i}{\partial b} &= \int_0^1 [Y_i(z) - \widetilde{Y}_i] \ln(1 - z) \beta(a, b, z) dz \end{aligned} \quad (\text{C.24})$$

Les dérivées des paramètres par rapport à la variance se déduisent facilement de leur définition :

$$\frac{\partial a}{\partial \widetilde{z''^2}} = \widetilde{z} \frac{\partial \gamma}{\partial \widetilde{z''^2}} ; \frac{\partial b}{\partial \widetilde{z''^2}} = (1 - \widetilde{z}) \frac{\partial \gamma}{\partial \widetilde{z''^2}} \quad (\text{C.25})$$

avec

$$\frac{\partial \gamma}{\partial \widetilde{z''^2}} = - \frac{\widetilde{z}(1 - \widetilde{z})}{[\widetilde{z''^2}]^2} \quad (\text{C.26})$$

Annexe D

Lois d'état pour la masse volumique

$$\frac{1}{\rho} = \frac{R}{P_0} T \sum_i \frac{Y_i}{\mathcal{M}_i} \quad (\text{D.1})$$

D.1 Loi de gaz parfaits pour l'air

$$\frac{1}{\bar{\rho}} = \frac{R}{P_0} \frac{\tilde{T}}{\mathcal{M}_{air}} \text{ avec } \tilde{T} = T_0 + \frac{\tilde{h}}{C_p} \quad (\text{D.2})$$

D.2 Loi de gaz parfaits pour un mélange hélium-air

$$\frac{1}{\bar{\rho}} = \frac{R}{P_0} T_0 \left(\frac{\tilde{Y}_{He}}{\mathcal{M}_{He}} + \frac{1 - \tilde{Y}_{He}}{\mathcal{M}_{air}} \right) \quad (\text{D.3})$$

D.3 Lois d'état pour le modèle de flammelles à chimie infiniment rapide

Dans le cas du modèle de flammelles à chimie infiniment rapide, la masse volumique moyenne s'écrit :

$$\frac{1}{\bar{\rho}} = \int_0^1 \frac{\tilde{P}(z)}{\rho(z, h_s)} dz = \frac{R}{P_0} \int_0^1 T(z, h_s) \sum_i \frac{Y_i(z)}{\mathcal{M}_i} \tilde{P}(z) dz \quad (\text{D.4})$$

La pdf est constituée de deux pics de Dirac d'amplitude D_0 et D_1 en $z = z_0 = 0$ et $z = z_1 = 1$ et d'un rectangle de hauteur h et de bornes z_2 et z_3 :

$$\tilde{P}(z) = D_0 \delta(z - z_0) + D_1 \delta(z - z_1) + h [\mathcal{H}(z - z_2) - \mathcal{H}(z - z_3)] \quad (\text{D.5})$$

La masse volumique moyenne s'écrit alors :

$$\frac{1}{\bar{\rho}} = \frac{R}{P_0} \left\{ D_0 T_0 \sum_i \frac{Y_{i0}}{\mathcal{M}_{i0}} + \int_{z_2}^{z_3} T(z, h_s) \sum_i \frac{Y_i(z)}{\mathcal{M}_i} h dz + D_1 T_1 \sum_i \frac{Y_{i1}}{\mathcal{M}_{i1}} \right\} \quad (\text{D.6})$$

avec les valeurs données en annexe A pour chaque paramètre et chaque forme de pdf. Les lois d'état pour les fractions massiques et la température sont linéaires par morceaux et peuvent être écrites suivant :

$$\begin{aligned} T(z) &= A(h_s) + B(h_s)z \\ \sum_i \frac{Y_i(z)}{\mathcal{M}_i} &= C + Dz \end{aligned} \quad (\text{D.7})$$

avec A , B , C et D les paramètres des fonctions décrivant la température et l'inverse de la fraction massique du mélange, les valeurs de C et D dépendant du côté (pauvre ou riche) de la stœchiométrie où l'on se trouve. Le calcul de la masse volumique moyenne se réduit donc à l'expression analytique :

$$\begin{aligned} \frac{1}{\bar{\rho}} &= \frac{R}{P_0} \left\{ \frac{D_0 T_O}{\mathcal{M}_O} + \frac{D_1 T_F}{\mathcal{M}_F} \right. \\ &\quad \left. + \left[AC(z_3 - z_2) + (BC + AD) \frac{z_3^2 - z_2^2}{2} + BD \frac{z_3^3 - z_2^3}{3} \right] h \right\} \end{aligned} \quad (\text{D.8})$$

Annexe E

Termes sources instationnaires

Ici, sont présentées les expressions de ce terme pour chaque loi d'état pour la masse volumique, présentées en annexe D, utilisée dans ce mémoire.

On rappelle la forme générale du terme de dilatation présenté en page 91,

$$\frac{1}{\rho} \frac{D\rho}{Dt} = \frac{1}{\rho} \sum_i^N \frac{\partial \rho}{\partial \phi_i} \frac{D\phi_i}{Dt} = \frac{1}{\rho^2} \sum_i^N \frac{\partial \rho}{\partial \phi_i} [\nabla \cdot (-J_{\phi_i}) + S_{\phi_i}] \quad (\text{E.1})$$

E.1 Loi de gaz parfaits dépendant de la température

$$\frac{1}{\bar{\rho}} \frac{D\bar{\rho}}{Dt} = \frac{1}{\bar{\rho}^2} \frac{\partial \bar{\rho}}{\partial \tilde{h}} \nabla \cdot \left(\frac{\lambda}{C_p} \cdot \nabla \tilde{h} \right) \quad (\text{E.2})$$

$$\frac{1}{\bar{\rho}^2} \frac{\partial \bar{\rho}}{\partial \tilde{h}} = -\frac{1}{\bar{\rho} C_p \tilde{T}} \text{ avec } \tilde{T} = T_0 + \frac{\tilde{h}}{C_p} \quad (\text{E.3})$$

E.2 Loi de gaz parfaits dépendant d'une fraction massique

$$\frac{1}{\bar{\rho}} \frac{D\bar{\rho}}{Dt} = \frac{1}{\bar{\rho}^2} \frac{\partial \bar{\rho}}{\partial \tilde{Y}_{He}} \nabla \cdot \left(\bar{\rho} D \nabla \tilde{Y}_{He} \right) \quad (\text{E.4})$$

$$\frac{1}{\bar{\rho}^2} \frac{\partial \bar{\rho}}{\partial \tilde{Y}_{He}} = \frac{R}{P_0} T_0 \left(\frac{1}{\mathcal{M}_{air}} - \frac{1}{\mathcal{M}_{He}} \right) \quad (\text{E.5})$$

E.3 Loi de gaz parfaits pour le modèle de combustion

Dans le cas du modèle de flammelles à chimie infiniment rapide, la masse volumique moyenne ne dépend que de la fraction de mélange, de sa variance et de l'enthalpie à la stœchiométrie

$$\bar{\rho} = \bar{\rho}(\tilde{z}, \tilde{z}''^2, h_s) \quad (\text{E.6})$$

et le terme source de dilatation s'exprime selon :

$$\begin{aligned} -\frac{1}{\bar{\rho}} \frac{D\bar{\rho}}{Dt} &= \frac{1}{\bar{\rho}^2} \frac{\partial \bar{\rho}}{\partial \tilde{z}} \nabla \cdot (\bar{\rho} D \nabla \tilde{z}) \\ &+ \frac{1}{\bar{\rho}^2} \frac{\partial \bar{\rho}}{\partial \tilde{z}''^2} \left[\nabla \cdot (\bar{\rho} D \nabla \tilde{z}''^2) + \bar{\rho} S_{\tilde{z}''^2} \right] \\ &+ \frac{1}{\bar{\rho}^2} \frac{\partial \bar{\rho}}{\partial h_s} \left[\nabla \cdot \left(\frac{\lambda}{C_p} \nabla \tilde{h}_s \right) + \bar{\rho} S_{h_s} \right] \end{aligned} \quad (\text{E.7})$$

La densité doit donc être dérivée par rapport à ces trois variables transportées notées g . Le flux diffusif ainsi que les termes sources sont déjà calculés dans le code pour une résolution classique.

La quantité calculée étant le volume massique et non pas la masse volumique, nous utilisons :

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial g} = -\bar{\rho}^2 \frac{\partial}{\partial g} \left(\frac{1}{\bar{\rho}} \right) \quad (\text{E.8})$$

D'après (D.8), nous avons :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial g} \left(\frac{1}{\bar{\rho}} \right) &= \frac{\partial}{\partial D_0} \left(\frac{1}{\bar{\rho}} \right) \frac{\partial D_0}{\partial g} + \frac{\partial}{\partial D_1} \left(\frac{1}{\bar{\rho}} \right) \frac{\partial D_1}{\partial g} \\ &+ \frac{\partial}{\partial z_2} \left(\frac{1}{\bar{\rho}} \right) \frac{\partial z_2}{\partial g} + \frac{\partial}{\partial z_3} \left(\frac{1}{\bar{\rho}} \right) \frac{\partial z_3}{\partial g} + \frac{\partial}{\partial h} \left(\frac{1}{\bar{\rho}} \right) \frac{\partial h}{\partial g} \end{aligned} \quad (\text{E.9})$$

E.3.1 Dérivées par rapport aux paramètres

Les termes liés aux pics de Dirac nous donnent :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial D_0} \left(\frac{1}{\bar{\rho}} \right) &= \frac{RT_O}{P_0} \frac{1}{\mathcal{M}_O} \\ \frac{\partial}{\partial D_1} \left(\frac{1}{\bar{\rho}} \right) &= \frac{RT_F}{P_0} \frac{1}{\mathcal{M}_F} \end{aligned} \quad (\text{E.10})$$

L'intégrale entre z_2 et z_3 peut s'écrire à l'aide des expressions linéaires de $T(z)$ et $Y_i(z)$:

$$\int_{z_2}^{z_3} T(z) \sum_i \frac{Y_i(z)}{\mathcal{M}_i} P(z) dz = \int_{z_2}^{z_3} (A + Bz)(C + Dz) h dz \quad (\text{E.11})$$

avec A, B, C et D tels que $T(z) = A(h_s) + B(h_s)z$ et $\sum_i \frac{Y_i(z)}{\mathcal{M}_i} = C + Dz$.

L'intégrale discrète sur z s'écrit donc :

$$\int_{z_2}^{z_3} T(z) \sum_i \frac{Y_i(z)}{\mathcal{M}_i} P(z) dz = \left[AC(z_3 - z_2) + (BC + AD) \frac{z_3^2 - z_2^2}{2} + BD \frac{z_3^3 - z_2^3}{3} \right] h \quad (\text{E.12})$$

Seul z_2 et z_3 dépendent des variables transportées, nous avons donc les dérivées suivantes :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial z_2} \left(\frac{1}{\rho} \right) &= -\frac{R}{P_0} (AC + (BC + AD)z_2 + BDz_2^2) \\ \frac{\partial}{\partial z_3} \left(\frac{1}{\rho} \right) &= \frac{R}{P_0} (AC + (BC + AD)z_3 + BDz_3^2) \end{aligned} \quad (\text{E.13})$$

D'après (A.2), nous avons :

$$h = \frac{1 - D_0 - D_1}{z_3 - z_2} \quad (\text{E.14})$$

d'où nous pouvons en déduire la dérivée par rapport aux variables transportées g :

$$\frac{\partial h}{\partial g} = \frac{\partial h}{\partial D_0} \frac{\partial D_0}{\partial g} + \frac{\partial h}{\partial D_1} \frac{\partial D_1}{\partial g} + \frac{\partial h}{\partial z_2} \frac{\partial z_2}{\partial g} + \frac{\partial h}{\partial z_3} \frac{\partial z_3}{\partial g} \quad (\text{E.15})$$

avec

$$\begin{aligned} \frac{\partial h}{\partial D_0} &= \frac{\partial h}{\partial D_1} = \frac{-1}{z_3 - z_2} \\ \frac{\partial h}{\partial z_2} &= -\frac{\partial h}{\partial z_3} = \frac{1}{(z_3 - z_2)^2} \end{aligned} \quad (\text{E.16})$$

E.3.2 Dérivées des paramètres par rapport aux variables transportées

- Rectangle seul

$$\begin{aligned} \frac{\partial D_0}{\partial \widetilde{z}} &= 0 & ; & \frac{\partial D_1}{\partial \widetilde{z}} = 0 \\ \frac{\partial D_0}{\partial \widetilde{z''^2}} &= 0 & ; & \frac{\partial D_1}{\partial \widetilde{z''^2}} = 0 \\ \frac{\partial z_2}{\partial \widetilde{z}} &= 1 & ; & \frac{\partial z_3}{\partial \widetilde{z}} = 1 \\ \frac{\partial z_2}{\partial \widetilde{z''^2}} &= -\frac{\partial z_3}{\partial \widetilde{z''^2}} & ; & \frac{\partial z_3}{\partial \widetilde{z''^2}} = -\frac{3}{2\sqrt{3\widetilde{z''^2}}} \end{aligned} \quad (\text{E.17})$$

- Rectangle et un pic de Dirac en $z = 0$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial D_0}{\partial \widetilde{z}} &= -\frac{4}{3} \frac{2\widetilde{z}\widetilde{z}''^2}{(\widetilde{z}''^2 + \widetilde{z}^2)^2} & ; & \frac{\partial D_1}{\partial \widetilde{z}} = 0 \\
\frac{\partial D_0}{\partial \widetilde{z}''^2} &= \frac{4}{3} \frac{\widetilde{z}^2}{(\widetilde{z}''^2 + \widetilde{z}^2)^2} & ; & \frac{\partial D_1}{\partial \widetilde{z}''^2} = 0 \\
\frac{\partial z_2}{\partial \widetilde{z}} &= 0 & ; & \frac{\partial z_3}{\partial \widetilde{z}} = \frac{3}{2} \frac{\widetilde{z}^2 - \widetilde{z}''^2}{\widetilde{z}^2} \\
\frac{\partial z_2}{\partial \widetilde{z}''^2} &= 0 & ; & \frac{\partial z_3}{\partial \widetilde{z}''^2} = \frac{3}{2\widetilde{z}}
\end{aligned} \tag{E.18}$$

- Rectangle et un pic de Dirac en $z = 1$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial D_0}{\partial \widetilde{z}} &= 0 & ; & \frac{\partial D_1}{\partial \widetilde{z}} = \frac{4}{3} \frac{2(1 - \widetilde{z})\widetilde{z}''^2}{(\widetilde{z}''^2 + (1 - \widetilde{z})^2)^2} \\
\frac{\partial D_0}{\partial \widetilde{z}''^2} &= 0 & ; & \frac{\partial D_1}{\partial \widetilde{z}''^2} = \frac{4}{3} \frac{(1 - \widetilde{z})^2}{(\widetilde{z}''^2 + (1 - \widetilde{z})^2)^2} \\
\frac{\partial z_2}{\partial \widetilde{z}} &= \frac{3(1 - 2\widetilde{z} + \widetilde{z}^2 - \widetilde{z}''^2)}{2(\widetilde{z} - 1)^2} & ; & \frac{\partial z_3}{\partial \widetilde{z}} = 0 \\
\frac{\partial z_2}{\partial \widetilde{z}''^2} &= \frac{3}{2(\widetilde{z} - 1)} & ; & \frac{\partial z_3}{\partial \widetilde{z}''^2} = 0
\end{aligned} \tag{E.19}$$

- Rectangle et deux pics de Diracs en $z = 0$ et $z = 1$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial D_0}{\partial \widetilde{z}} &= 0 & ; & \frac{\partial D_1}{\partial \widetilde{z}} = \frac{4}{3} \frac{2(1 - \widetilde{z})\widetilde{z}''^2}{(\widetilde{z}''^2 + (1 - \widetilde{z})^2)^2} \\
\frac{\partial D_0}{\partial \widetilde{z}''^2} &= 0 & ; & \frac{\partial D_1}{\partial \widetilde{z}''^2} = \frac{4}{3} \frac{(1 - \widetilde{z})^2}{(\widetilde{z}''^2 + (1 - \widetilde{z})^2)^2} \\
\frac{\partial z_2}{\partial \widetilde{z}} &= \frac{3(1 - 2\widetilde{z} + \widetilde{z}^2 - \widetilde{z}''^2)}{2(\widetilde{z} - 1)^2} & ; & \frac{\partial z_3}{\partial \widetilde{z}} = 0 \\
\frac{\partial z_2}{\partial \widetilde{z}''^2} &= \frac{3}{2(\widetilde{z} - 1)} & ; & \frac{\partial z_3}{\partial \widetilde{z}''^2} = 0
\end{aligned} \tag{E.20}$$

Une première approche de la simulation des incendies est menée à l'aide du code CFD d'EDF R&D *Code_Saturne*. Une extension de son schéma incompressible et une adaptation des conditions limites libres sont développées afin de traiter des flammes à bas nombre de Froude instationnaires et dominées par la convection naturelle grâce à une modélisation URANS. La turbulence est traitée à l'aide d'un modèle $k - \varepsilon$ tenant compte de la gravité. La combustion est traitée à l'aide d'une réaction globale infiniment rapide et l'interaction avec la turbulence par une approche statistique présumant une fonction densité de probabilité. L'équation des transferts radiatifs est résolue à l'aide de la méthode des ordonnées discrètes. Les propriétés radiatives du milieu sont estimées à l'aide d'un modèle à larges bandes. Le modèle semi-empirique utilisé pour les suies tient compte des processus de nucléation, croissance, agglomération et oxydation. Le modèle est appliqué à des panaches thermiques et d'hélium, configurations proches des feux. Le gain minime apporté par les fermetures testées sur le modèle de turbulence suggère que le calcul des flux turbulents scalaires est plus important. En revanche, le gain lié au schéma faiblement compressible est considérable. Le modèle est ensuite appliqué à deux types de feu. Sur le feu de nappe, un maillage fin est nécessaire pour pallier un défaut de turbulence et obtenir une bonne prédiction sur les grandeurs caractéristiques. Cette conclusion est modérée par les résultats obtenus sur le feu de compartiment pour lequel les prédictions sont raisonnables malgré les maillages grossiers utilisés, le rayonnement des fumées et des parois ayant une forte influence.

Mots clés : modélisation numérique, dynamique des fluides, fluide dilatable, écoulement instationnaire, combustion, turbulence, rayonnement, suies

As a first step for fire simulation, an extension of the incompressible scheme and adaptations for the free boundary limits have been developed in *Code_Saturne*, EDF R&D's fluid mechanic software. This numerical approach is aimed to handle unsteady low Froude number flames dominated by natural convection. The turbulence model is a $k - \varepsilon$ with gravity effects. The combustion model uses an infinitely fast one-step reaction with a presumed probability density function. The radiative transfer equation is solved with the discrete ordinates method. The radiative properties are computed thanks to a wide band model. Nucleation, growth, agglomeration and oxidation of soot are treated with a semi-empirical model. The model was applied to steady thermal plumes and a helium plume, configurations closed to fire. Benefits from tested closures on buoyant production term are negligible and suggest that closure of turbulent fluxes is more important. However, benefits from the weakly compressible scheme is significant, in particular on unsteady behaviour. The computed, time-averaged velocity and temperature profiles are compared with experimental data, and a relatively good agreement is attained. Then the model was applied to a pool fire and a compartment fire. With the pool fire, using a fine mesh is needed to balance a lack of turbulence production and get a good prediction on fire characteristics. This conclusion is moderate for the compartment fire. Although the mesh used is coarse, the predictions are reasonable, due to the strong influence of radiation from smoke and walls.

Key words : numerical simulation, fluid dynamics, weakly compressible fluid, unsteady flow, combustion, turbulence, radiative transfer, soot