

# MAP551 - PC1: Théorie de l'explosion thermique

Te Sun

Septembre 2018

## Explosion dans un réacteur homogène

### 1 Modèle simplifié 1 - explosion adiabatique

Le modèle est donné pour  $Y \in [0, 1]$  et  $T \in [T_0, T_b]$

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

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

avec la condition initiale  $Y(0) = 1$  et  $T(0) = T_0$ . On note  $T_r = T_b - T_0 > 0$ .  $B$ ,  $E$  et  $R$  sont des constantes strictement positives.

On constate que

$$d_t Y \times T_r + d_t T = 0$$

$$d_t (Y \times T_r + T) = 0$$

Donc,  $(Y \times T_r + T) = H$ , où  $H$  est une quantité qui se conserve au cours du temps. En utilisant les conditions initiales,  $H = T_r + T_0 = T_b$ . Par conséquent,  $T = T_b - Y T_r$  qui donne l'équation autonome sur la variable  $Y(t)$  :

$$d_t Y = -B e^{-\frac{E}{R(T_b - Y T_r)}} Y, \quad d_t T = B e^{-\frac{E}{RT}} (T_b - T) \quad (\mathbf{2.2.1.a})$$

On déduit du fait que  $d_t T > 0$ , alors  $T(t)$  est monotone croissante. En plus,  $T(t) = T_b$  est une solution de l'équation (2), d'après l'unicité du système, cela est contre la condition initiale. Comme  $T \in [T_0, T_b]$ , alors  $T < T_b$ . **(2.2.1.b)**

Graphiquement, on obtient deux solutions avec  $B = 1$ ,  $\beta = E/RT_0 = 6$ ,  $T_b = 3000$  et  $T_0 = 400$ . On le représente dans l'intervalle  $t \in [0, 40]$ . Fig 1 **(2.2.1.c)**

La forte non-linéarité de la fonction  $\Lambda(T)$  qui se donne une difficulté pour résoudre le système est présentée dans deux cas avec  $\beta = 30$  et  $\beta = 100$  ci-dessous Fig 2 :

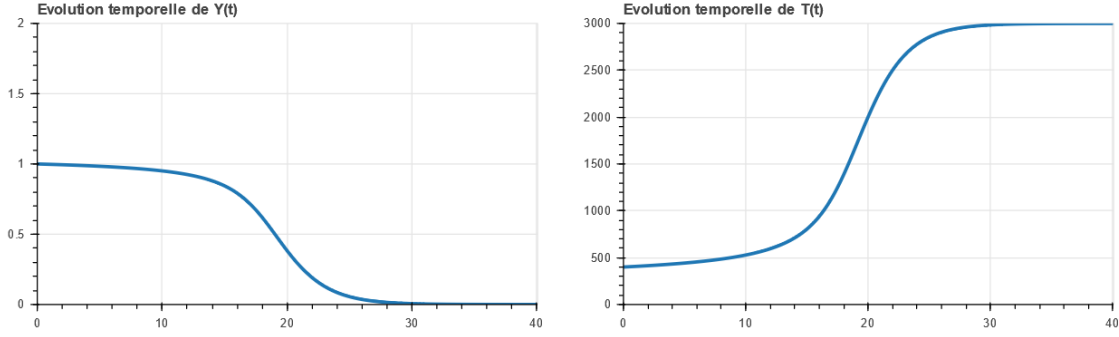


Figure 1 – Présentation géographique

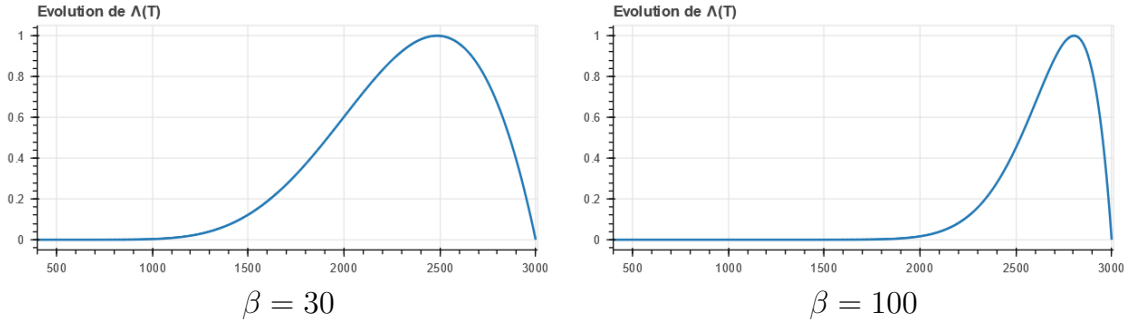


Figure 2 – La non-linéarité de  $\Lambda(T)$

Dans le cas où  $\beta = 30$  : on constate que  $\Lambda(1000) = 0.003$  et  $\Lambda(2400) = 0.982$ . Alors que  $\Lambda(1000) = 0.000$  et  $\Lambda(2400) = 0.279$  quand  $\beta = 100$ . La dépendance de l'énergie d'activation est observée numériquement et graphiquement. **(2.2.1.g)**

On note que  $\bar{T}_r = \frac{T_r}{RT_0^2/E} = \frac{T_r}{T_{FK}}$ , où  $T_{FK} = RT_0^2/E$  est appelée la température de Frank-Kamenetskii. On peut alors adimensionner l'équation autonome de  $T$  :

$$\begin{aligned} d_t T &= B e^{-\frac{E}{RT}} (T_b - T) \\ d_t \frac{T - T_0}{T_{FK}} &= B e^{-\frac{E}{RT}} \left( \frac{T_r}{T_{FK}} - \frac{T - T_0}{T_{FK}} \right) \\ d_t \Theta &= B e^{-\frac{\beta^2}{\beta + \Theta}} (\bar{T}_r - \Theta) \end{aligned} \quad (2.2.2.a)$$

Où  $\Theta = (T - T_0)/T_{FK}$ . Si on se donne deux hypothèses suivantes qui s'interprète par une grande énergie d'activation et par une grande enthalpie de réaction :

$$\beta \gg 1 \text{ et } \bar{T}_r \gg 1$$

En plus, supposons que  $\Theta \ll \beta$  et que  $T_r$  soit de même ordre de  $T_0$  (donc  $\bar{T}_r \gg \Theta$ ), on effectue un développement limité pour (2.2.2.a) :

$$\begin{aligned} B e^{-\frac{\beta^2}{\beta + \Theta}} (\bar{T}_r - \Theta) &= B e^{-\beta(1 - \frac{\Theta}{\beta} + \mathcal{O}(\frac{\Theta^2}{\beta^2}))} (\beta \frac{T_r}{T_0} - \Theta) \\ d_t \Theta &= B \bar{T}_r e^{-\beta} e^{\Theta - \mathcal{O}(\frac{\Theta^2}{\beta})} - B \Theta e^{-\beta + \Theta - \mathcal{O}(\frac{\Theta^2}{\beta})} \end{aligned}$$

Au première ordre, on peut approcher cette équation par :

$$d_t \tilde{\Theta} = \frac{1}{t_I} e^{\tilde{\Theta}}, \quad \text{où } t_I = \frac{e^\beta}{B \bar{T}_r} = \frac{RT_0^2 e^{E/RT_0}}{BE(T_b - T_0)} \quad (2.2.2.b)$$

En prenant cette approximation de l'ED, on a obtenu une nouvelle ED dimensionnée sous forme :

$$\begin{aligned} d_t \frac{T - T_0}{T_{FK}} &= \frac{B(T_b - T_0)}{e^\beta} e^{(T - T_0)/T_{FK}} \\ &= \frac{B(T_b - T_0)}{e^\beta} e^{\beta(T/T_0 - 1)} \end{aligned}$$

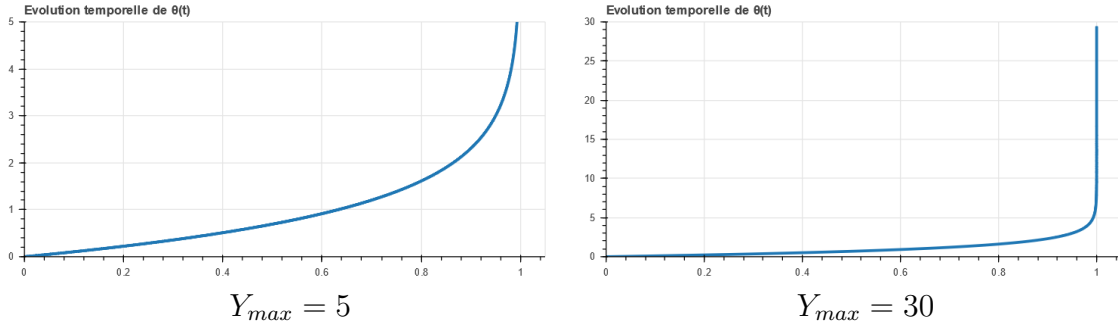
Quand  $\Theta \ll \beta$ , lorsque la variation de la température est pas grande, la variation ne se localise pas très loin de zéro par rapport  $\beta$ . On pourra donc linéariser l'équation. On pourra de plus poser  $\tau = t/t_I$  et que  $\tilde{\theta}(\tau) = \tilde{\Theta}(t)$ . Sachant que  $d\tilde{\Theta}(t)/dt = d\tilde{\theta}(\tau)/d\tau = d\tilde{\theta}(\tau)/d(t/t_I) \times \frac{1}{t_I}$ , on déduit de **2.2.2.b** que :

$$d_\tau \tilde{\theta} = e^{\tilde{\theta}}$$

Pour résoudre cette équation, on effectuera un changement de variable  $z = e^{\tilde{\theta}}$ ,  $z > 0$  :

$$\begin{aligned} d_\tau \ln(z) &= z \Rightarrow d_\tau z = z^2 \\ d_\tau \left( \frac{-1}{z} \right) &= 1 \Rightarrow 1/z = -\tau + cte \\ z &= 1/(cte - \tau) \Rightarrow e^{\tilde{\theta}} = 1/(cte - \tau) \end{aligned}$$

avec condition initiale :  $\tilde{\theta}(0) = 0$ , on aura la solution :  $\tilde{\theta} = -\ln(1 - \tau)$  **(2.2.2.c)**



**Figure 3** – Le comportement explosif de la solution  $\tilde{\theta}$

On compare le temps d'attente à 5 et 30 pour la solution :  $\tau_1 = 1 - \exp(-5)$ , et  $\tau_1 = 1 - \exp(-30)$ . La durée entre  $\tilde{\theta} = 5$  et  $\tilde{\theta} = 30$  est 0.0067, qui est très petite devant 1. Par ailleurs, la différence relative entre  $\tau$  et 1 vaut  $\exp(-5) (\approx 0.7\%)$ . On constate donc le phénomène explosif.

Comme l'équation simplifiée n'intervient pas la variable  $\beta$  et que  $\tilde{\theta}$  explose très vite au voisinage de 1, donc la condition de validité  $\beta \gg \tilde{\theta}$  n'est pas contraignante. Cela est grâce

## 1 Modèle simplifié 1 - explosion adiabatique

au changement de variable  $\tau$ . Au départ, le système s'évolue lentement, puis augmente la température, la réaction sera plus vite. (2.2.3.a)

On calcule donc la dérivé du taux de réaction par rapport à  $T$ , et on cherche l'extremum du système :

$$d_T[-B e^{-\frac{E}{RT}} (T_b - T)] = -B e^{-\frac{E}{RT}} (E/RT^2(T_b - T) - 1) = 0$$

$$\frac{R}{E} T^2 + T = T_b$$

$$T_* = \frac{\sqrt{4RT_b/E + 1} - 1}{2R/E}$$

Comme  $T$  est positive, donc la solution de l'équation quadratique est plus petite que  $T_b$ . Alors, ce taux maximal est atteint avant la fin de la réaction. (2.2.3.b)

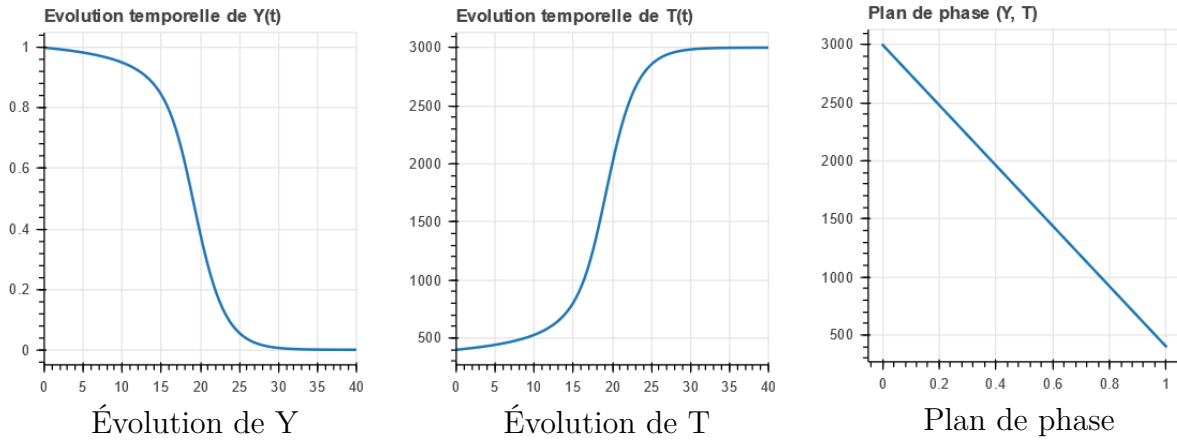


Figure 4 – Les solution du système

$t_I = \frac{e^{\beta T_0}}{B T_r \beta}$ , ici avec  $\beta = 6.0$ ,  $T_r = 2600K$ ,  $B = 1$ ,  $T_0 = 400K$ . Donc  $t_I = 10.3$ .

On peut alors retrouver le fait que une combinaison linéaire entre  $Y$  et  $H$  peut être une constante. Dans l'intervalle  $[0, t_I]$ , on constate que  $Y$  évolue lentement et linéairement, ce qui réponde au modèle simplifié, c'est-à-dire la linéarisation de Frank-Kamenetskii. Il y trois phase de la réaction : 1.  $[0, t_I]$  où la réaction vient de commencer. L'évolution comporte linéairement. 2. Réaction se produit. On pourra le définir comme  $[t_I, t_I + 2 \times (t_* - t_I)]$ , où  $t_*$  est le moment du taux de réaction le plus grand est atteint. 3. Fin de la réaction :  $[2t_* - t_I, \infty[$  (2.2.3.e)

Quand  $\beta$  devient de plus en plus grande, la phase 1 devient de plus en plus longue, car il faut une énergie plus grande pour activer la réaction. Et si l'on prend  $\beta = 30$ ,  $T_{FK} = T_0/\beta = 13.3$ . (2.2.3.e)(2.2.3.g)

## 2 Modèle 2 - explosion avec prise en compte des perte thermiques

On se place dans un cas où le système est en contact avec un thermostat. Le parois garde sa température  $T_0$ , les équations différentielles qui décrit le système est donc :

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

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

En effet, au temps 0,  $d_t T(0) = T_r B e^{-E/RT} \times 1 > 0$ . Donc D'après la continuité de T, il existe un intervalle  $]0, t_{max}[$  où T est plus grande que  $T_0$ . On pourra considérer la dérivé de  $H = T_r Y + T$  qui est  $d_t H = T_r d_t Y + d_t T = -\frac{1}{t_p}(T - T_0)$ . Si H est contante, alors  $T = T_0 \forall t > 0$ . Supposons que cela soit vrai, donc  $d_t T = T_r B e^{-\frac{E}{RT}} Y > 0$  contredit au fait que T est constante. Par absurde, H n'est plus conservée au cours du temps.

En même temps, si l'on est dans l'intervalle  $]0, t_{max}[$ , alors  $d_t H$  est négative,  $H < H_0$ . Si  $t_{max} < \infty$ , après  $t_{max}$ , on repart avec condition initiale  $T(t_{max}) = T_0$  et  $Y(t_{max}) < 1$ . H continue à diminuer. Alors H est majorée par  $H$  de la partie précédente. On discute maintenant la majoration de T :

$$\begin{aligned} T &= T_0 + \int_0^t (T_r B e^{-\frac{E}{RT}} Y - \frac{1}{t_p}(T - T_0)) dt \\ &= T_0 - T_r [Y]_0^t - \int_0^t \frac{1}{t_p}(T - T_0) dt \end{aligned}$$

Sachant que  $T \geq T_0 \forall t > 0$ ,  $T > T_0 \forall t \in ]0, t_{max}[$ ,  $-[Y]_0^t \leq 1$ , donc  $T < T_0 + T_r = T_b$ . Au long terme, la température monte et redescend dans l'intervalle  $]0, t_{max}[$ . (2.3.1.a)

Pour avoir une solution plus représentative, on fixe  $\beta = 10.0$  et  $t_p = 180$ . Adimension-

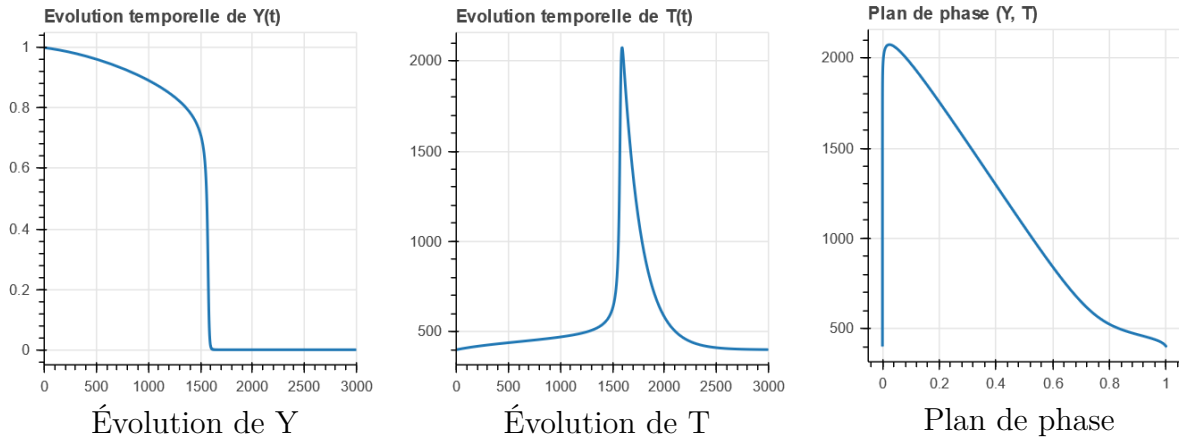


Figure 5 – Les solutions du (7-8)  $\tilde{\theta}$

nement :

$$\begin{aligned} d_t(T - T_0)/T_{FK} &= T_r/T_{FK} B e^{-\beta \frac{T_0}{T}} \frac{\exp(\beta)}{\exp(\beta)} Y - \frac{1}{t_p}(T - T_0)/T_{FK} \\ d_t \tilde{\theta} &= \frac{1}{t_I} \exp\left(\frac{\tilde{\theta}}{1 + \tilde{\theta}/\beta}\right) Y - \frac{1}{t_p} \tilde{\theta} \\ d_\tau \tilde{\theta} &= \exp\left(\frac{\tilde{\theta}}{1 + \tilde{\theta}/\beta}\right) \tilde{Y} - \frac{t_I}{t_p} \tilde{\theta} \\ d_\tau \tilde{Y} &= -\frac{1}{T_r} \exp\left(\frac{\tilde{\theta}}{1 + \tilde{\theta}/\beta}\right) \tilde{Y} \end{aligned}$$

où  $\tilde{Y} = Y$ ,  $\tau = t/t_I$  (2.3.1.b)

Si on reprend l'hypothèse [H1] et [H2],  $\exp\left(\frac{\tilde{\theta}}{1 + \tilde{\theta}/\beta}\right) \approx \exp(\tilde{\theta})$ . Si on note  $q^-(\tilde{\theta}) = \frac{t_I}{t_p} \tilde{\theta}$ , on aura :

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

L'approximation de l'équation reste valable si  $t \in [0, t_I]$ . Dans cet intervalle, la consommation de fuel reste petite ( $|\Delta Y| \ll 1$ ). (2.3.2.a)

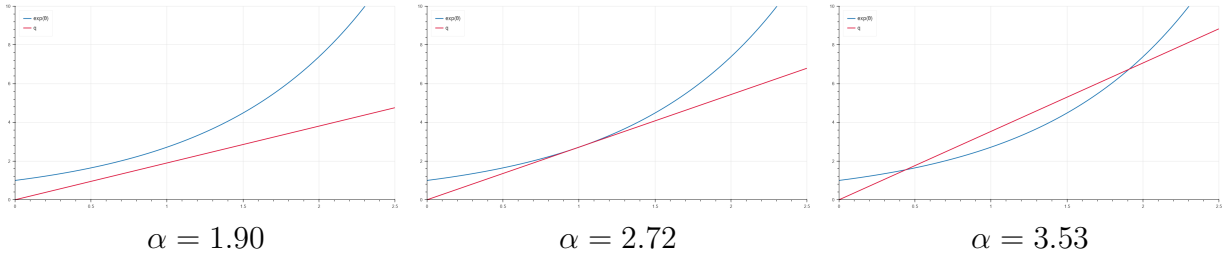


Figure 6 – Diagramme de  $e^{\tilde{\theta}}$  et  $q^-(\tilde{\theta})$

Pour  $\alpha = \alpha_{cr}$ , en point stationnaire :  $e^{\tilde{\theta}} = \alpha_{cr} \tilde{\theta}$  (valeur) et  $e^{\tilde{\theta}} = \alpha_{cr}$  (tangente). Donc  $\alpha_{cr} = e$ ,  $\tilde{\theta}_{cr} = 1$ . En discriminant sur  $\alpha_0$ , on aura trois cas :  $\alpha < e$ , l'effet de la réaction chimique est plus important l'effet de perte thermique, on aura un cas dit "explosif" ;  $\alpha = e$  : la perte thermique est assez importante qu'il existe une température d'équilibre pour que la vitesse de la réaction reste constante, où on aura une fonction  $Y(t)$  affine.  $\alpha > e$  : la perte thermique est trop importante pour avoir températures d'équilibre. Mais le système se situera au premier point stationnaire. On pourra comparer dès lors la température critique : comme  $\tilde{\theta}_{cr} = 1$ , alors  $T - T_0 = T_{FK} = T_0/\beta$ . Si l'on est dans le registre où  $\beta$  est grande,  $T_{FK}$  sera petite. C'est une concurrence entre  $T_0$  et  $\beta$ , à savoir, l'énergie d'activation. (2.3.2.b)

Quand  $\alpha_0 \rightarrow 0$ , alors tout se passe comme la première cas : explosion adiabatique. Si  $\alpha_0 \rightarrow \infty$ , le transfert thermique est instantané. La température du système restera en  $T_0$

Stabilité :  $d_\tau \tilde{\theta} = e^{\tilde{\theta}} - q^-(\tilde{\theta}) = e^{\tilde{\theta}} - \alpha_0 \tilde{\theta}$ , quand il y a une petite perturbation thermique  $d\tilde{\theta}$ .  $e^{\tilde{\theta}+d\tilde{\theta}} - \alpha_0(d\tilde{\theta} + \tilde{\theta}) = (e^{\tilde{\theta}} - \alpha_0)d\tilde{\theta}$  autour du point d'équilibre. Si  $d\tilde{\theta} > 0$ ,  $d_\tau(\tilde{\theta} + d\tilde{\theta}) < 0$

pour avoir une stabilité. Alors on en déduit que : dans le cas  $\alpha_0 = e$ , le point d'équilibre n'est pas stable. Pour  $\alpha_0 > e$ , le point d'équilibre plus petit est stable alors que l'autre l'est pas. Quand  $T_0$  est suffisamment grande, on aura pas de stabilité au cours de la réaction. (2.3.2.e-f)

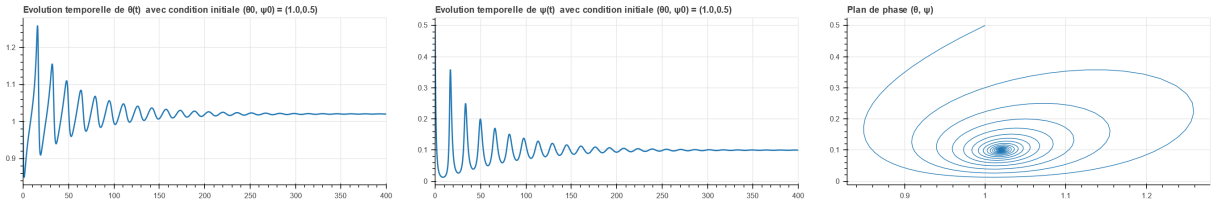
## 3 Modèle 3 - explosion avec prise en compte de la convection

En prenant compte la convection naturelle, on re modélise le système de façon suivante :

$$\begin{aligned} d_\tau \tilde{\theta} &= e^{\tilde{\theta}} - \alpha(\Psi) \tilde{\theta} \\ d_\tau \Psi &= -a\Psi(\Psi^2 + \tilde{\theta}_c - \tilde{\theta}) \end{aligned}$$

Si  $\Psi = 0$ , la deuxième équation est auto satisfaite, donc si on néglige la consommation du fuel, on revient au cas 2.3.2.a, où la réaction est dans la phase  $\tau \ll 1$ . Quand on introduit cette convection, on constate une bifurcation au long terme. Si  $\alpha_0 (= 3) > e$ , la perte thermique est trop important que  $\tilde{\theta} < 1$  pendant la réaction. Donc  $d_\tau \Psi$  est toujours négative, la valeur absolu de  $\Psi$  devient plus petit. Au long terme,  $\Psi \rightarrow 0$ , ce qui ramène au cas précédent. Il apporte pas de nouvelle information au long terme.

Quand on regarde l'influence de  $\tilde{\theta}_c$  : si  $\tilde{\theta}_c$  est grande, alors  $\Psi = 0$  devient stable plus facilement, ce qui correspond au cas précédent. Plus petite  $\tilde{\theta}_c$  est, plus facilement on constate le cas de bifurcation. (2.3.2)



**Figure 7** – Diagramme des solutions et le diagramme de phase de  $\tilde{\theta}$  et  $\Psi$

Si  $\Psi = 0$  avec autres paramètres  $\alpha_0 = 2.7 < e$ ,  $\tilde{\theta}_c = 1.01$ , on retrouve le cas "explosif". Si la convection commence à être présente, on observe une convergence avec oscillation. Cela est dû à l'introduction de la convection : Quand la température est basse, alors la convection est faible, ce qui "conserve" la chaleur. Mais, lorsque la température est suffisamment haute, une forte convection perturbe le fuel. On accélère la perte thermique avec un transfert thermique plus violent. Enfin, même si  $\alpha_0$  est légèrement plus petite que  $\alpha_{cr}$ , on aura également cette convergence.

Si on note  $\tilde{\theta}_{cr}$  la température critique entre le cas 'stable' et 'explosif' :

$$\begin{aligned} (\tilde{\theta}_0, \Psi) &= (1.0, 0.01) : \tilde{\theta}_c \approx 1.060 \\ (\tilde{\theta}_0, \Psi) &= (1.0, 0.50) : \tilde{\theta}_c \approx 1.052 \\ (\tilde{\theta}_0, \Psi) &= (1.0, 0.50) : \tilde{\theta}_c \approx 1.030 \end{aligned}$$

Ici, on a trois dynamiques du système : Convergence oscillante :  $\tilde{\theta}_c$  petite ; Bifurcation : Comportement oscillant quand  $\tilde{\theta}_c$  devient plus grande ; Lorsque  $\tilde{\theta}_c > \tilde{\theta}_{cr}$ , après quelque oscillations, on se place dans un cas explosif. **(2.3.5.a)**

## 4 Conclusion

En conclusion, plusieurs schéma partage des avantages différents, on peut toujours raffiner le modèle en ajoutant des termes explicatifs pour approcher la réalité. Pourtant, cela rend une plus grande difficulté pour résoudre les équation. Ici, les modèles simples peuvent également illustrer le processus d'explosion sans être loin de la réalité. Les enjeux c'est donc de choisir un schéma optimal au niveau de résolution numérique en gardant les phénomènes les plus représentatifs en réalité.

