



Modélisation numérique de la formation des suies et de monoxyde de carbone en espace confiné

Hui Ying WANG
Laboratoire de Combustion et de Détonique
CNRS, ENSMA, Université de Poitiers, France



Système d'équations pour un faible nombre de Mach

Conservation de la masse

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \rho = -\rho \nabla \cdot \mathbf{u}$$

Conservation de la quantité de mouvement

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla H = \mathbf{u} \times \boldsymbol{\omega} + \frac{1}{\rho} ((\rho - \rho_\infty) \mathbf{g} + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau})$$

$$\nabla H \approx \frac{1}{2} \nabla |\mathbf{u}|^2 + \frac{1}{\rho} \nabla \tilde{p}$$

Conservation de l'énergie

$$\frac{\partial \rho h}{\partial t} + \nabla \cdot \rho h \mathbf{u} = \nabla \cdot k \nabla T + \sum_{i=1}^N \nabla \cdot h_i \rho D_i \nabla Y_i + \dot{q}''' - \nabla \cdot \mathbf{q}_r$$

Equation d'état

$$p_0(t) = \frac{\gamma - 1}{\gamma} \rho h$$

Simulation Numérique Directe (DNS)



Moyenne de Reynolds (RANS)

décomposition

$$\phi = \bar{\phi} + \phi'$$

moyenne temporelle

$$\bar{\phi} = \lim_{\Delta t \rightarrow \infty} \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} \phi(\mathbf{x}, t) dt$$

tenseur des contraintes (Boussinesq)

$$\tau_t \equiv \overline{\rho u''_i u''_j} = -\mu_t \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) + \frac{2}{3} \delta_{ij} (\bar{\rho} k + \mu_t \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k})$$

viscosité turbulente

$$\mu_t = \bar{\rho} c_\mu \frac{k^2}{\varepsilon}$$

Simulation Numérique des Grandes Echelles (LES)

séparation des échelles

$$\phi = \hat{\phi} + \phi''$$

partie filtrée

$$\hat{\phi}(\mathbf{x}, t) = \int_{\Omega} G(\mathbf{x} - \mathbf{x}', \Delta) \phi(\mathbf{x}', t) d\mathbf{x}'$$

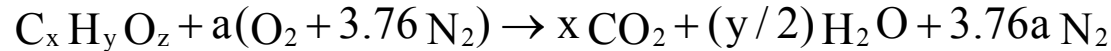
tenseur sous-maille (Smagorinsky)

$$\hat{\tau}_t = \mu_t \left(2 \text{def } \hat{\mathbf{u}} - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \hat{\mathbf{u}}) \mathbf{I} \right)$$

viscosité turbulente

$$\mu_t = \rho (C_s \Delta)^2 |S|$$

Réaction d'oxydation d'un hydrocarbure à une étape



Modèle de fraction de mélange (FDS)

$$\frac{\partial \rho Z}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho Z) \mathbf{u} = \nabla \cdot \left(\frac{\mu_t}{Sc} \right) \nabla Z$$

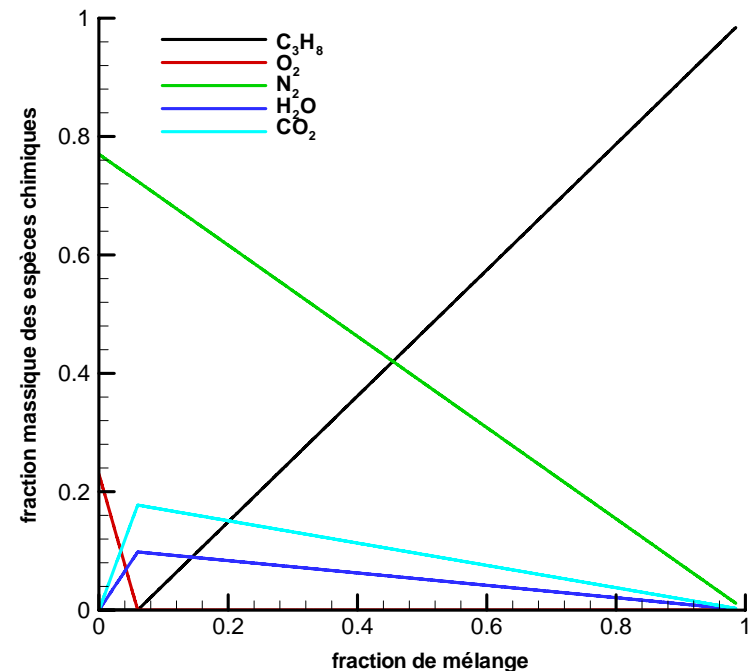
$$-\dot{W}_o''' = \nabla \cdot \left(\frac{\mu_t}{Sc} \right) \frac{dY_o}{dZ} \nabla Z - \frac{dY_o}{dZ} \nabla \cdot \left(\frac{\mu_t}{Sc} \right) \nabla Z$$

$$\dot{q}_c''' = -\Delta H_o \dot{W}_o'''$$

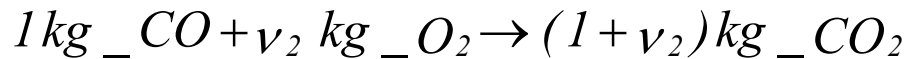
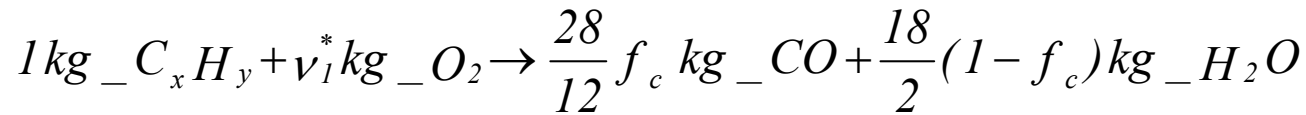
Corrélation empirique (sur ventilée)

$$Y_{CO} = \frac{M_s n}{M_f v_f} 0.0014 + 0.37 Y_{suies}$$

feu sous ventilée ???



Réaction d'oxydation d'un hydrocarbure à deux étapes



$$\nu_1^* = \nu_1 - \frac{28}{12} f_c \nu_2$$

$$\nu_1 = \frac{32}{12} f_c + \frac{16}{2} (1 - f_c)$$

$$\nu_2 = \frac{16}{28}$$

$$\frac{\partial \rho \bar{Y}_n}{\partial t} + \frac{\partial (\rho \bar{u}_i \bar{Y}_n)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_t}{Sc_t} \frac{\partial \bar{Y}_n}{\partial x_j} \right) + \dot{\omega}_n, \quad n = C_x H_y, CO, CO_2, H_2O, O_2, N_2$$

Approche de type Eddy-Break-Up (EBU)

$$\dot{\omega}_{C_xH_y} = \frac{d\rho Y_{C_xH_y}}{dt} = -\rho \tau_{mix} \min\left(Y_{C_xH_y}, \frac{Y_{O_2}}{v_1^*}\right)$$

$$\dot{\omega}_{CO} = \frac{d\rho Y_{CO}}{dt} = -\rho \tau_{mix} \min\left(Y_{CO}, \frac{Y_{O_2}}{v_2}\right)$$

$$S_{CO} = \dot{\omega}_{CO} - \frac{28}{12} f_c \dot{\omega}_{C_xH_y}$$

$$\dot{\omega}_{O_2} = v_1^* \dot{\omega}_{C_xH_y} + v_2 \dot{\omega}_{CO}$$

Echelle de temps propre au mélange turbulent à deux étapes : $\tau_{mix} \approx C_{Ebu} \frac{\varepsilon}{k}$

Energie cinétique turbulente

$$k = \left(\frac{\mu_t}{C_\mu \rho \Delta} \right)^2$$

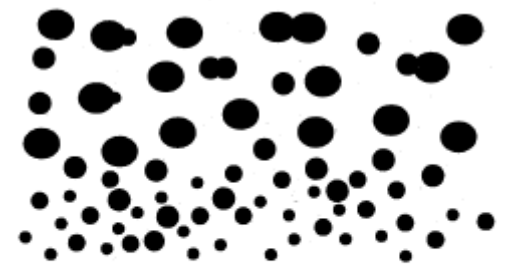
Taux de dissipation

$$\varepsilon = C_\varepsilon \frac{k^{3/2}}{\Delta}$$

Chaleur dégagée : $\dot{q}''' = -H_o \dot{\omega}_o$

Les mécanismes de formation des suies

Oxydation // Agglomération
Croissance de la surface
Nucléation



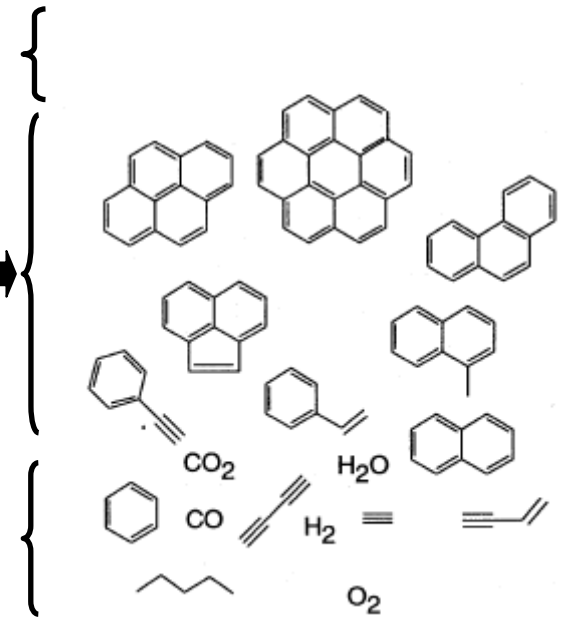
Zone de transition du gaz en particules solides



Zone de formation des aromatiques polycycliques (HAP) par addition des cycles aromatiques et par le mécanisme HACA (H-Abstraction-C₂H₂-Adition)



Zone de formation des produits de la combustion et création du premier cycle aromatique



Combustible et Oxydant

Deux équations de transport (approche de Moss)

$$\frac{\partial \rho \phi}{\partial t} + \frac{\partial (\rho \hat{u}_j \phi)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_t}{\sigma_N} \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \right) + \dot{\omega}_\phi$$

Taux de formation de la densité des suies

$$\dot{\omega}_n = \frac{dn}{dt} = C_\alpha N_0 \rho T^{2/2} X_f e^{-T_\alpha/T} - \frac{C_\beta}{N_0} T^{1/2} n^2 \dot{\omega}_{\text{Oxid}}$$

Taux de formation de la fraction volumique des suies

$$\dot{\omega}_{f_v} = \frac{df_v}{dt} = \frac{C_\delta}{\rho_{\text{soot}}} C_\alpha \rho T^{2/2} X_f e^{-T_\alpha/T} + \frac{C_\gamma}{1/3} \rho T^{1/2} X_f e^{-T_\gamma/T} n^{1/3} f_v^{2/3} - f_v \dot{\omega}_{\text{Oxid}}$$

Taux d'oxydation des suies

$$\dot{\omega}_{\phi, \text{Oxid}} = C_{\text{Ebu}} \rho \phi \tau_{\text{mix}} \min \left(1, \frac{\rho Y_o}{m_s \phi v_s + \rho Y_f v_f} \right)$$

Milieu semi-transparent fluide émettant-absorbant

$$\mathbf{s} \cdot \nabla I_n(\mathbf{x}, \mathbf{s}) = \kappa_n(\mathbf{x}) [I_{b,n}(\mathbf{x}) - I(\mathbf{x}, \mathbf{s})]$$

Conditions limites à la paroi grise

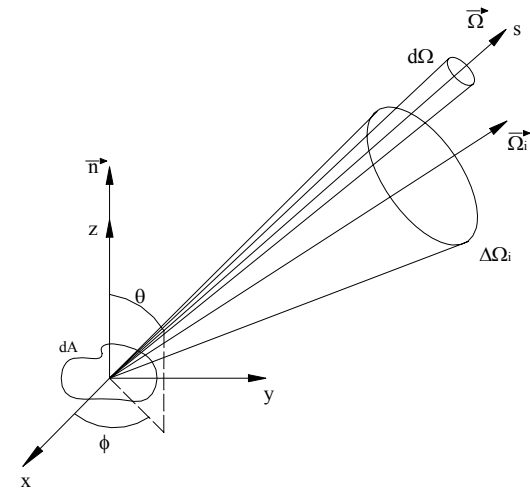
$$I_w(\mathbf{s}) = \varepsilon_w I_{bw} + \frac{1 - \varepsilon_w}{\pi} \int_{\mathbf{s}' \cdot \mathbf{n}_w < 0} I_w(\mathbf{s}') |\mathbf{s}' \cdot \mathbf{n}_w| d\Omega$$

Divergence du flux radiatif

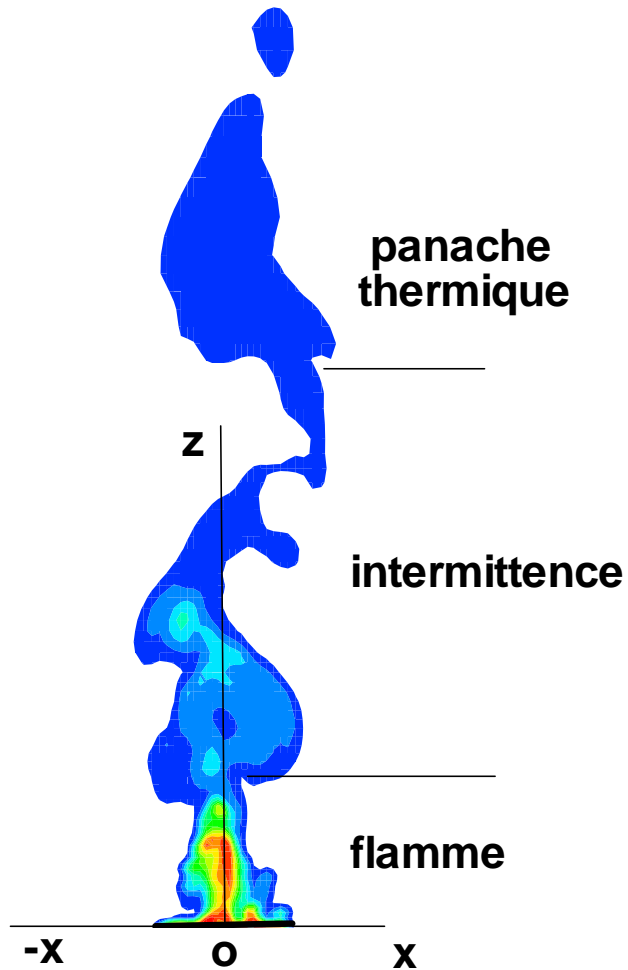
$$-\nabla \cdot \mathbf{q}_r(\mathbf{x}) = \kappa(\mathbf{x}) [U(\mathbf{x}) - 4\pi I_b(\mathbf{x})] \quad \text{avec} \quad U(\mathbf{x}) = \int_{4\pi} I(\mathbf{x}, \mathbf{s}) d\Omega$$

Ordonnées discrètes adaptées aux volumes finis

$$\sum_{m=1}^6 A_m I_m^l \int_{\Omega^l} (\mathbf{s} \cdot \mathbf{n}_m) d\Omega = \kappa_{ijk} [I_{b,ijk} - I_{ijk}^l] V_{ijk} \delta \Omega^l$$

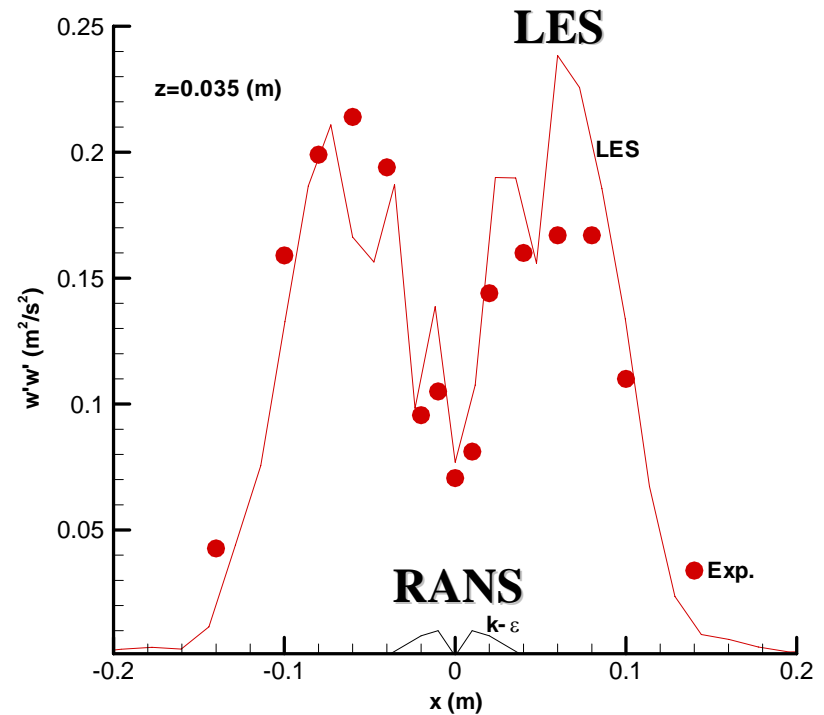


FEU DE NAPPE



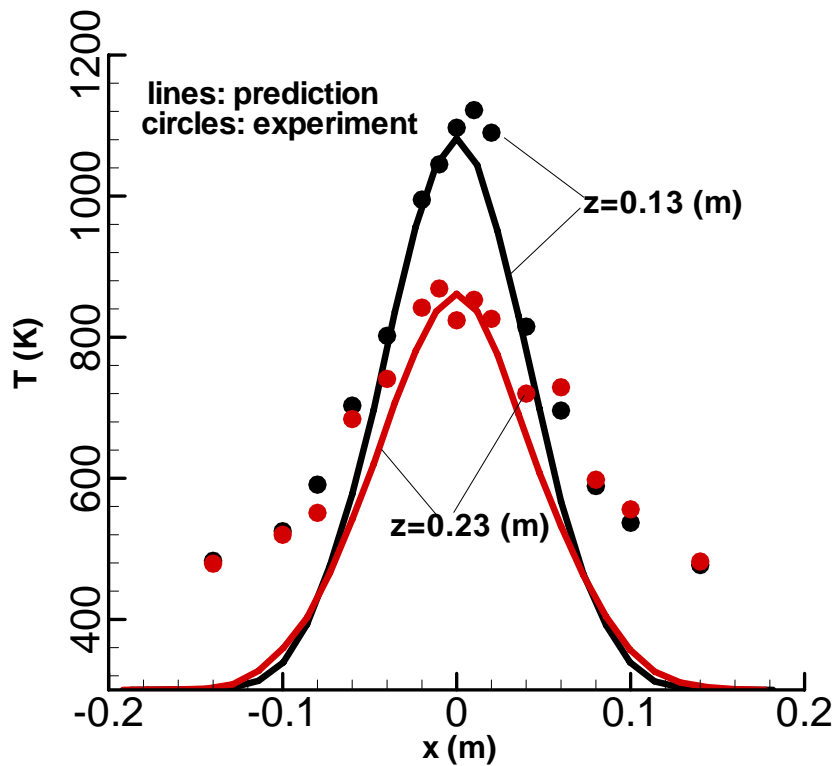
isothermes instantanées (LES)

Composante longitudinale, $w'w'$

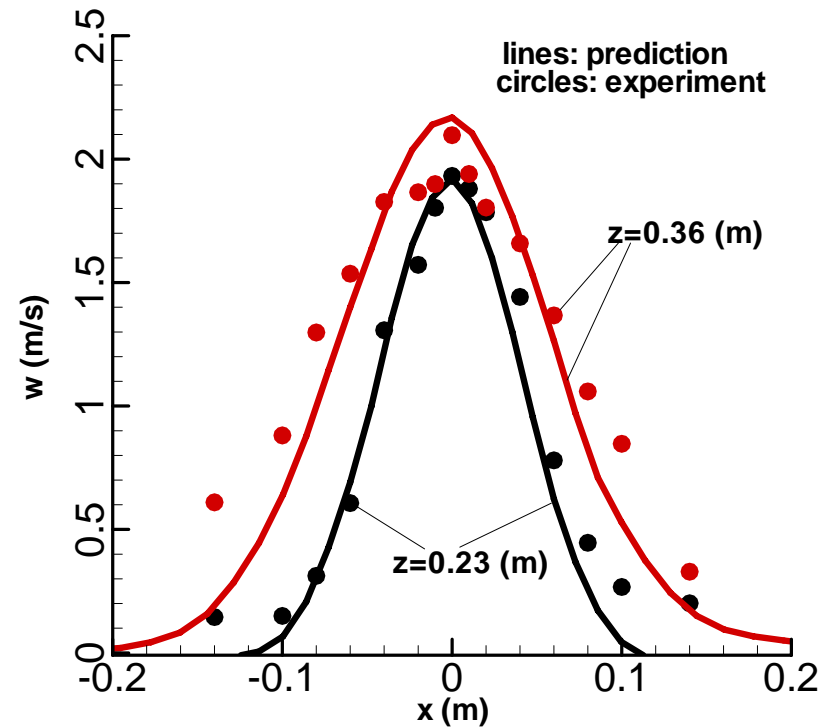


FEU DE NAPPE (LES)

Température

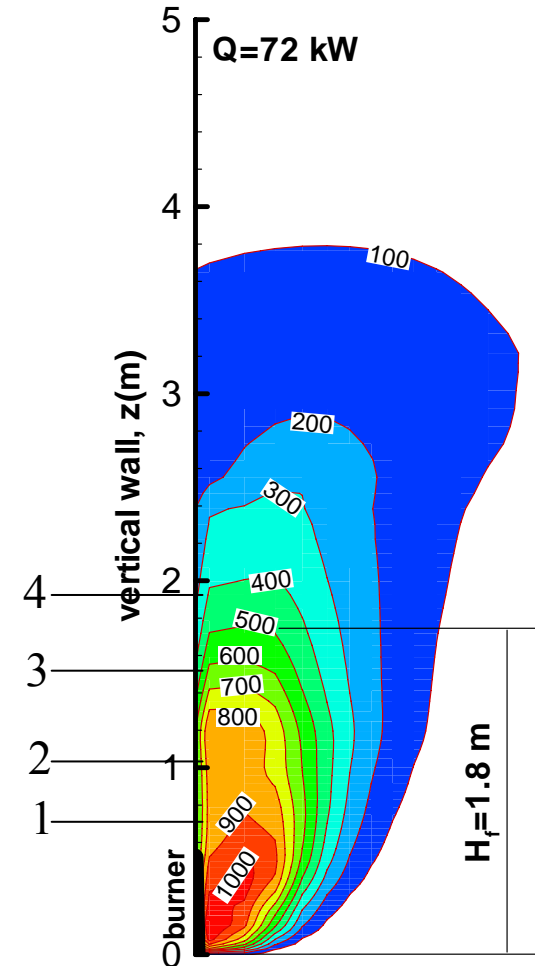
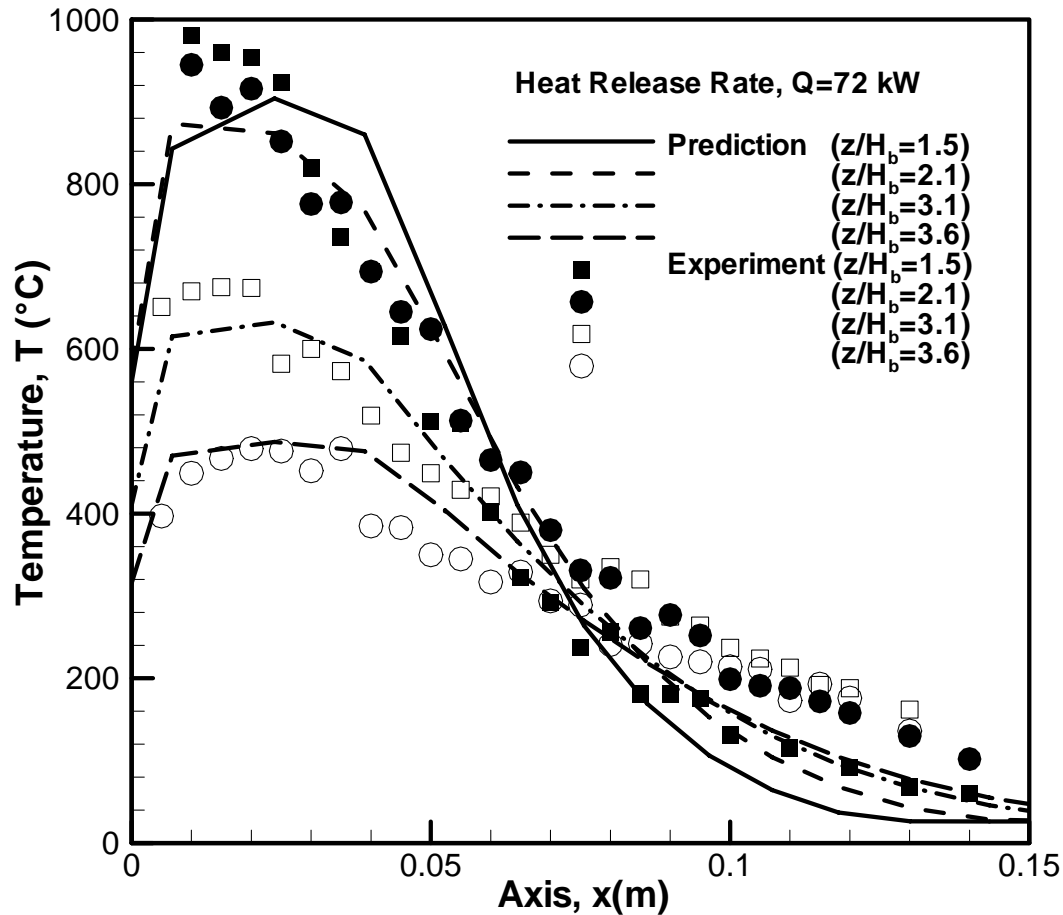


Composante longitudinale, w

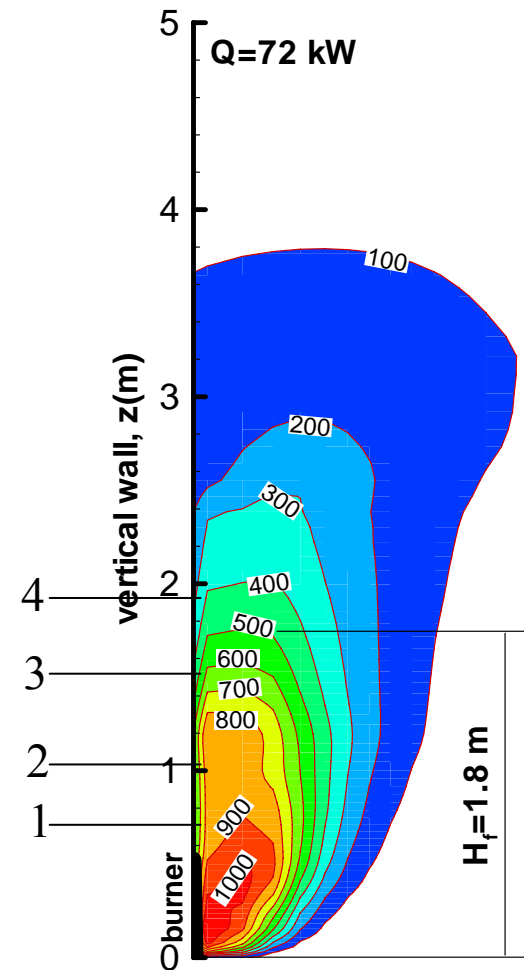
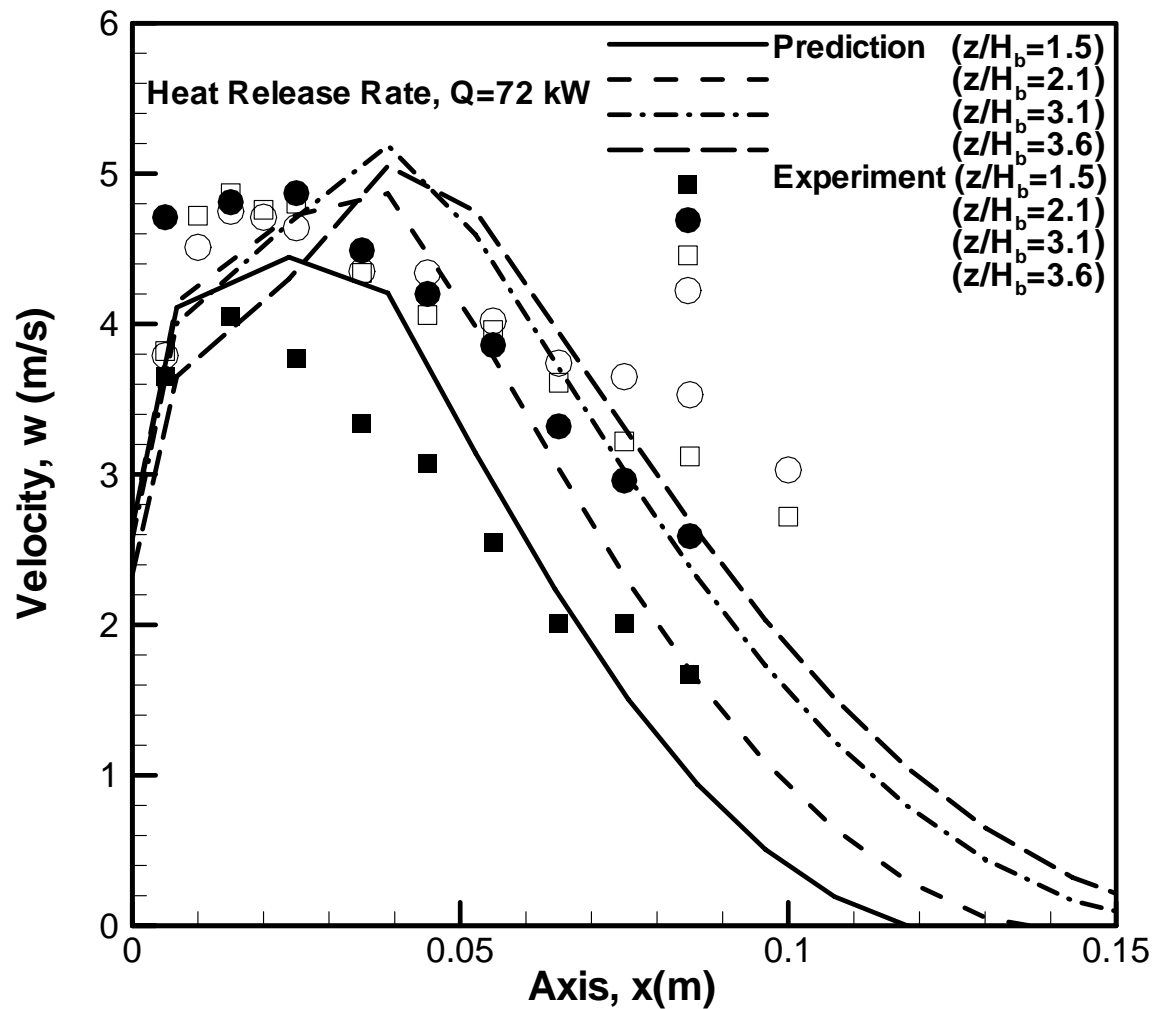


FEU DE PAROI VERTICALE (LES)

Température

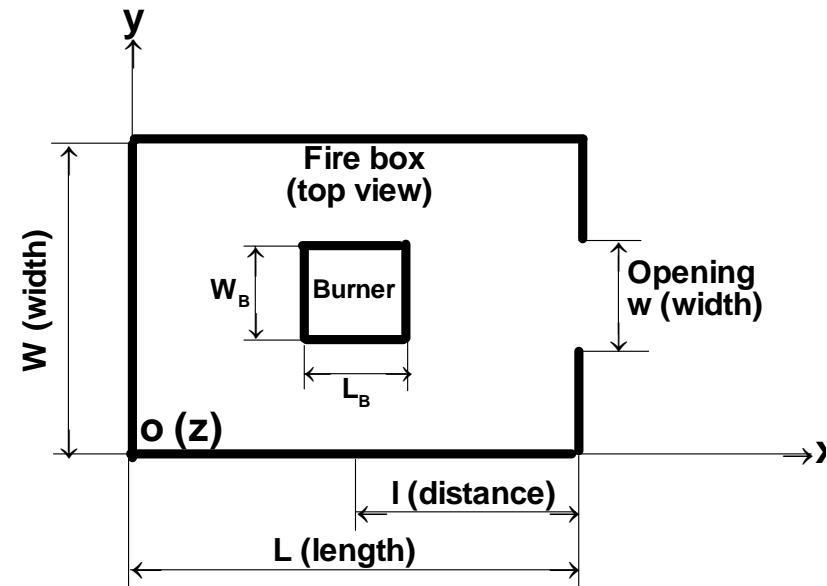
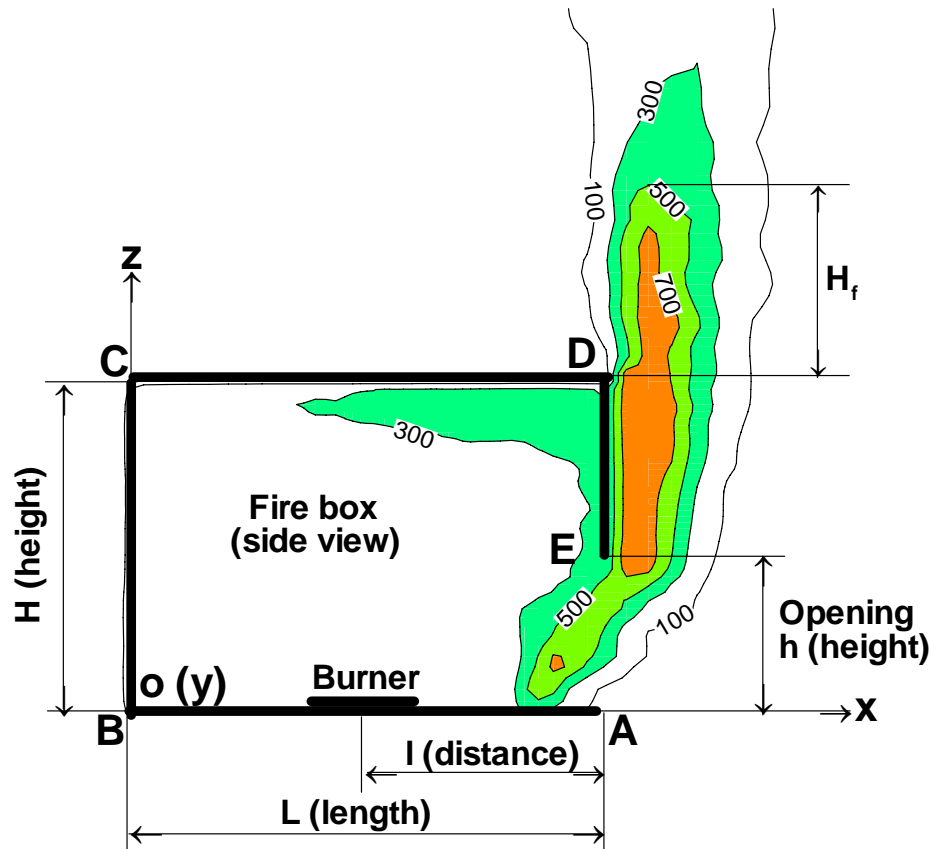


Composante longitudinale, w



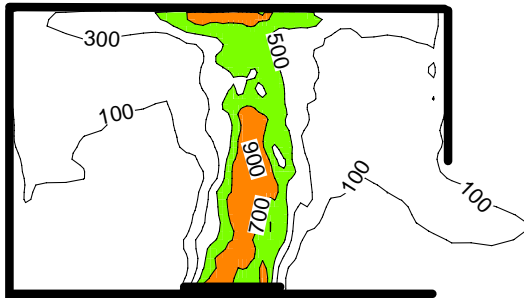
FEUX EN ESPACE CONFINE A VENTILATION LIMITEE

Influence de la nature des produits combustibles, de la géométrie d'une enceinte, de l'ouverture sur l'épuisement ou extinction naturelle de la flamme

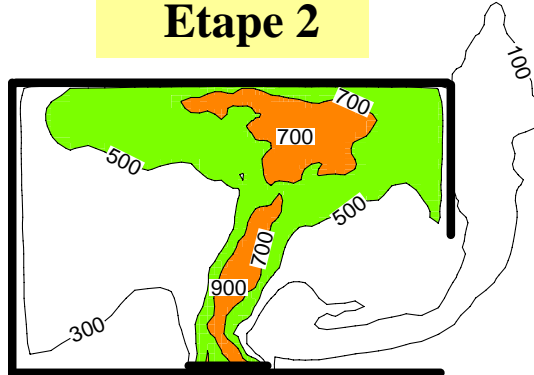


Evolution de la flamme dans une enceinte

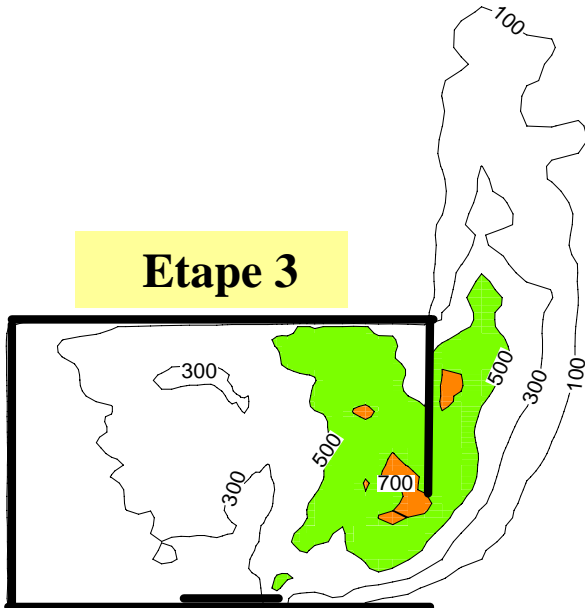
Etape 1



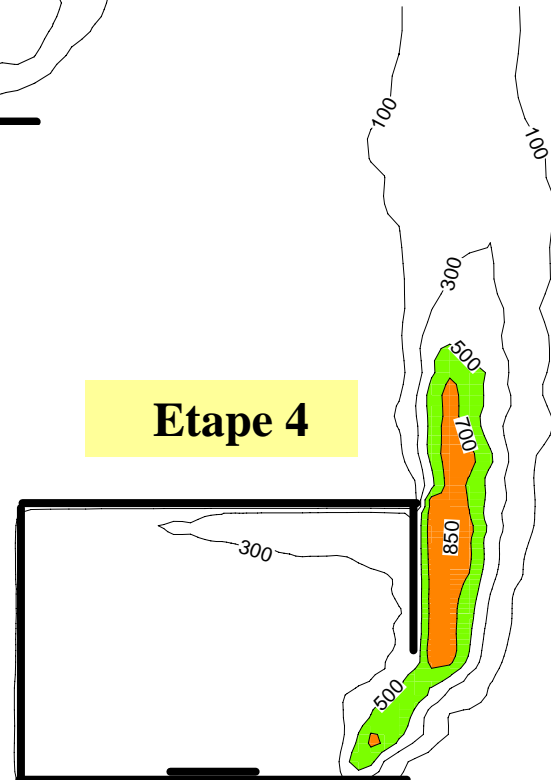
Etape 2



Etape 3



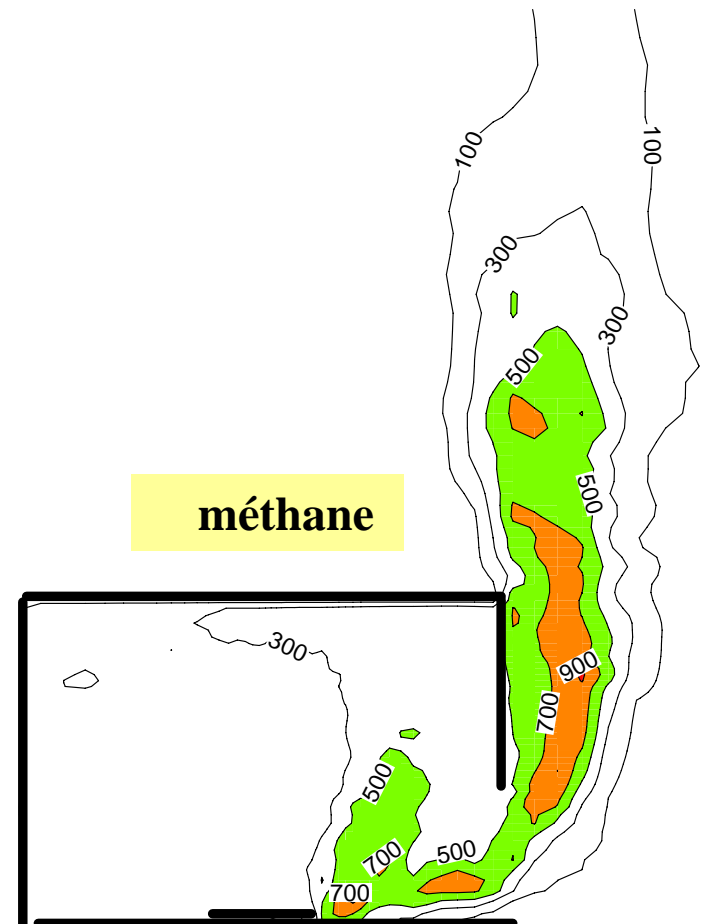
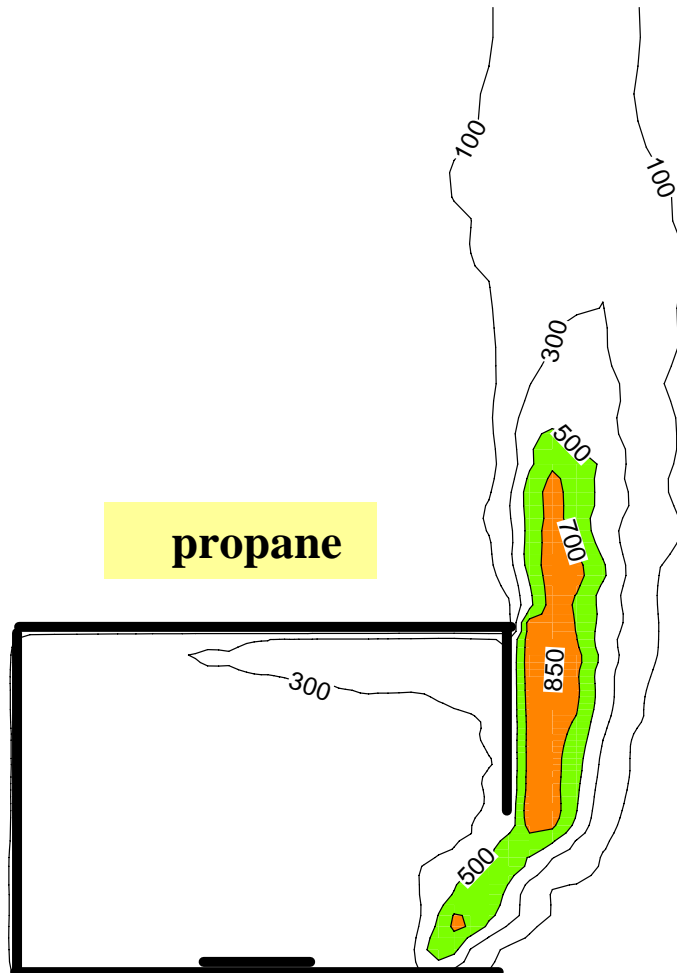
Etape 4



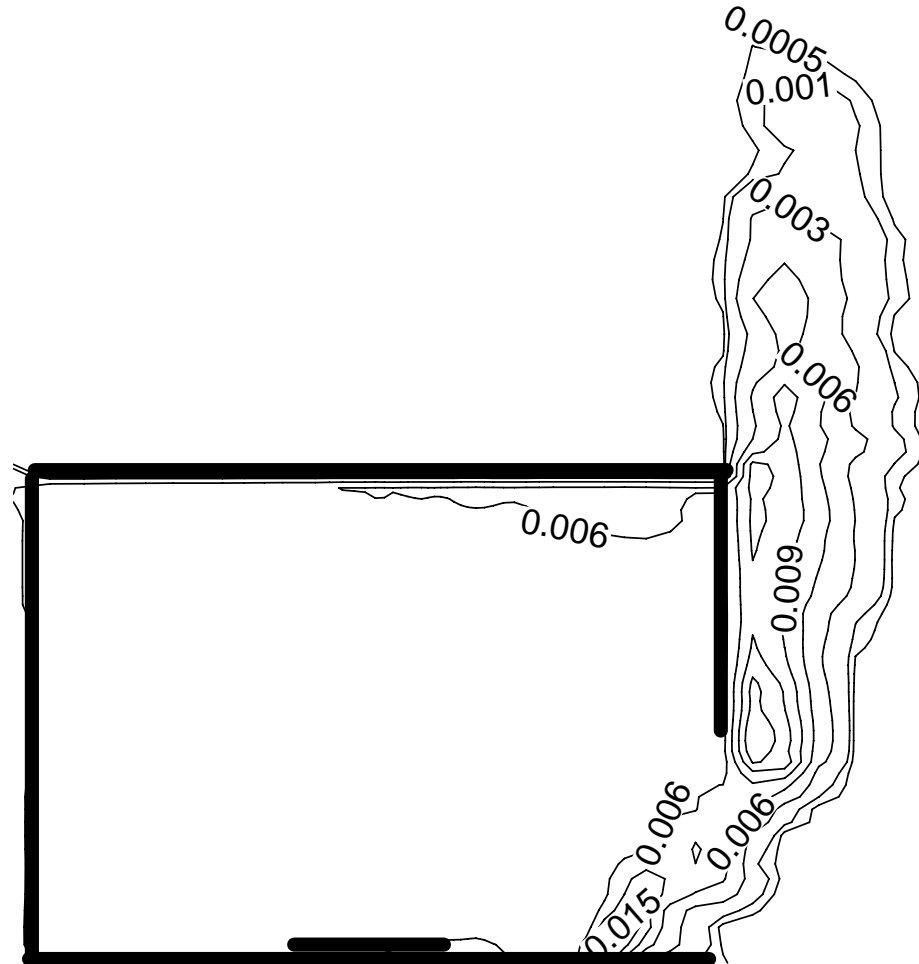
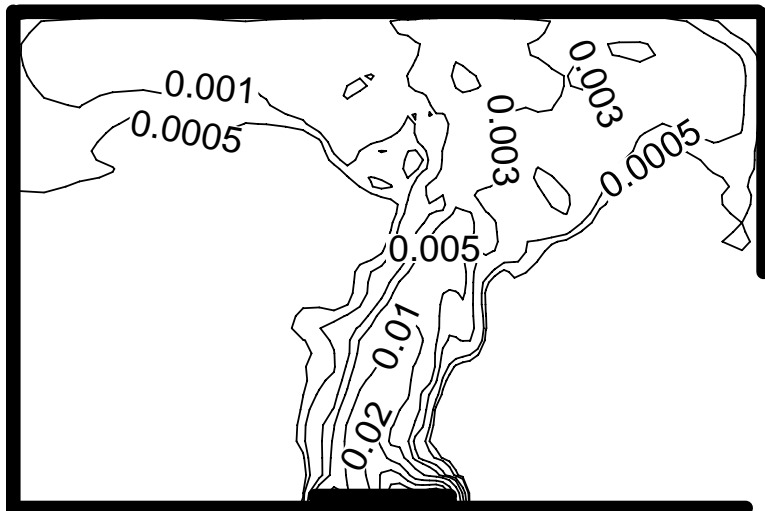
Influences de la nature des combustibles et du débit massique du combustible sur le délai d'épuisement de la flamme

Fuel supply rate (g/s)	Methane (CH ₄) Induction period (s)		Propane (C ₃ H ₈) Induction period (s)	
	Experiment	Prediction	Experiment	Prediction
1.5	∞	∞	∞	∞
2.0	∞	∞	40	40
2.5	30	33	25	27
3.0	18	20	12	15
4.0	12	13	10	12

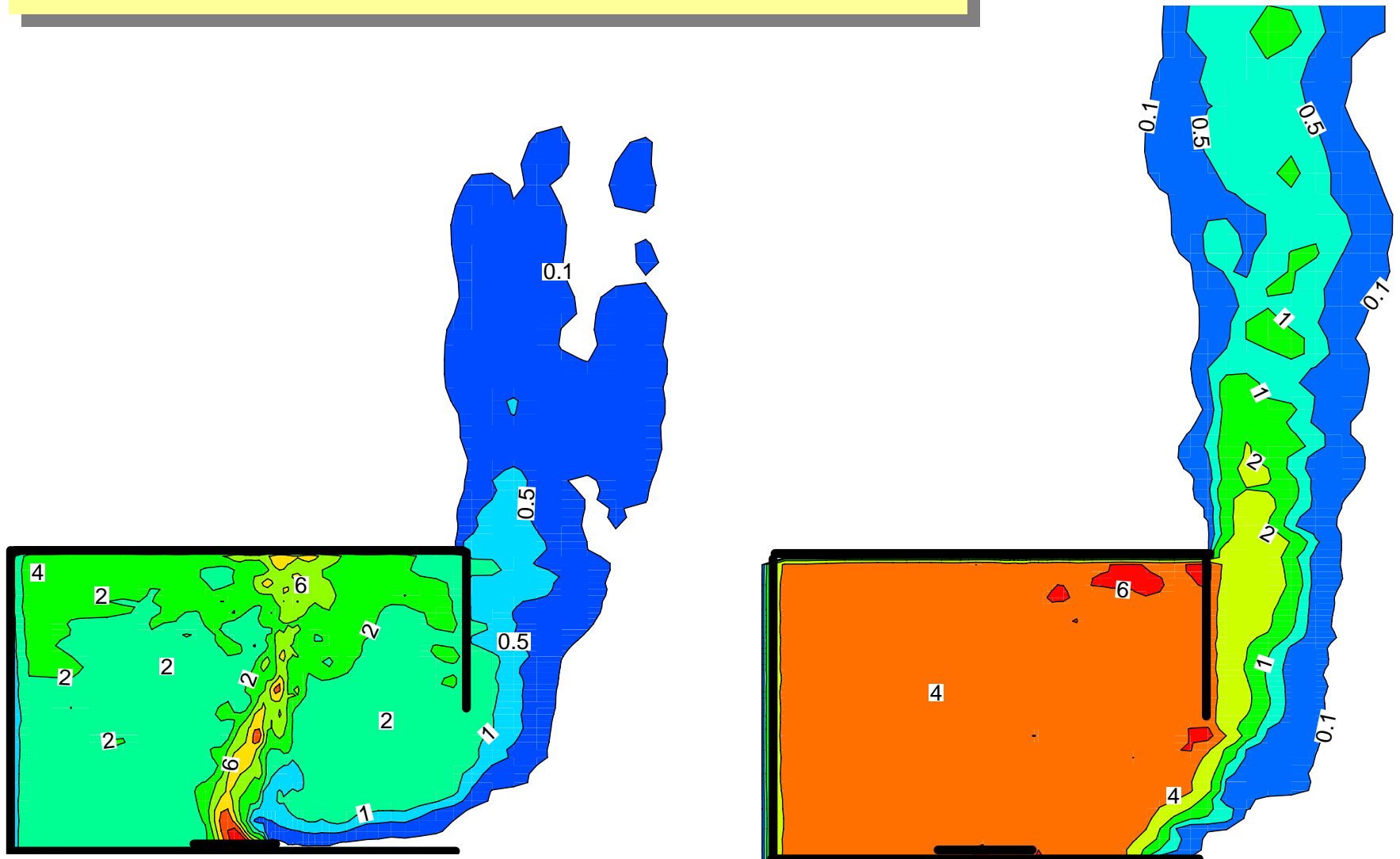
Influence de la nature des combustibles sur la structure de flamme



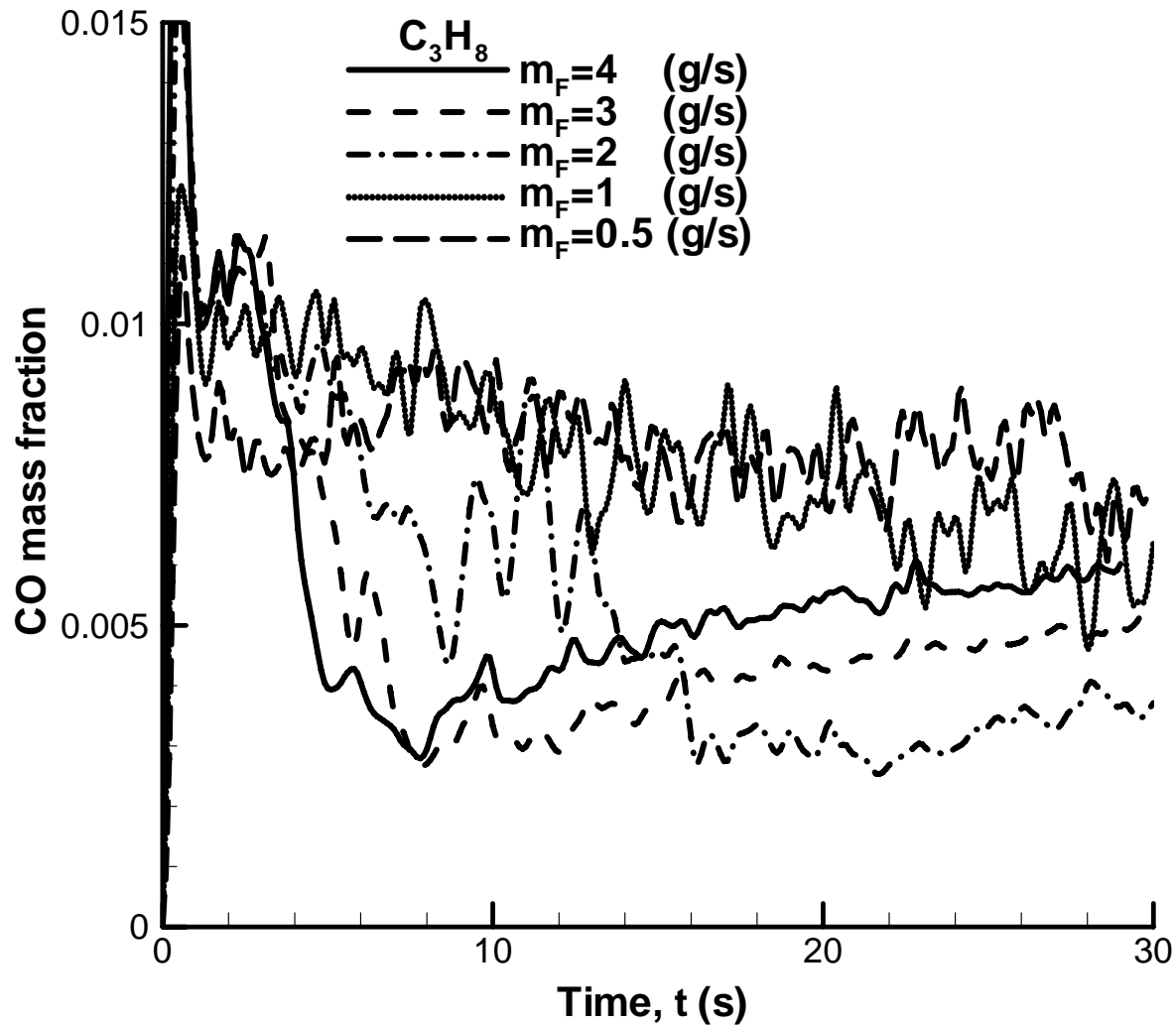
Evolution de monoxyde de carbone durant l'épuisement de la flamme



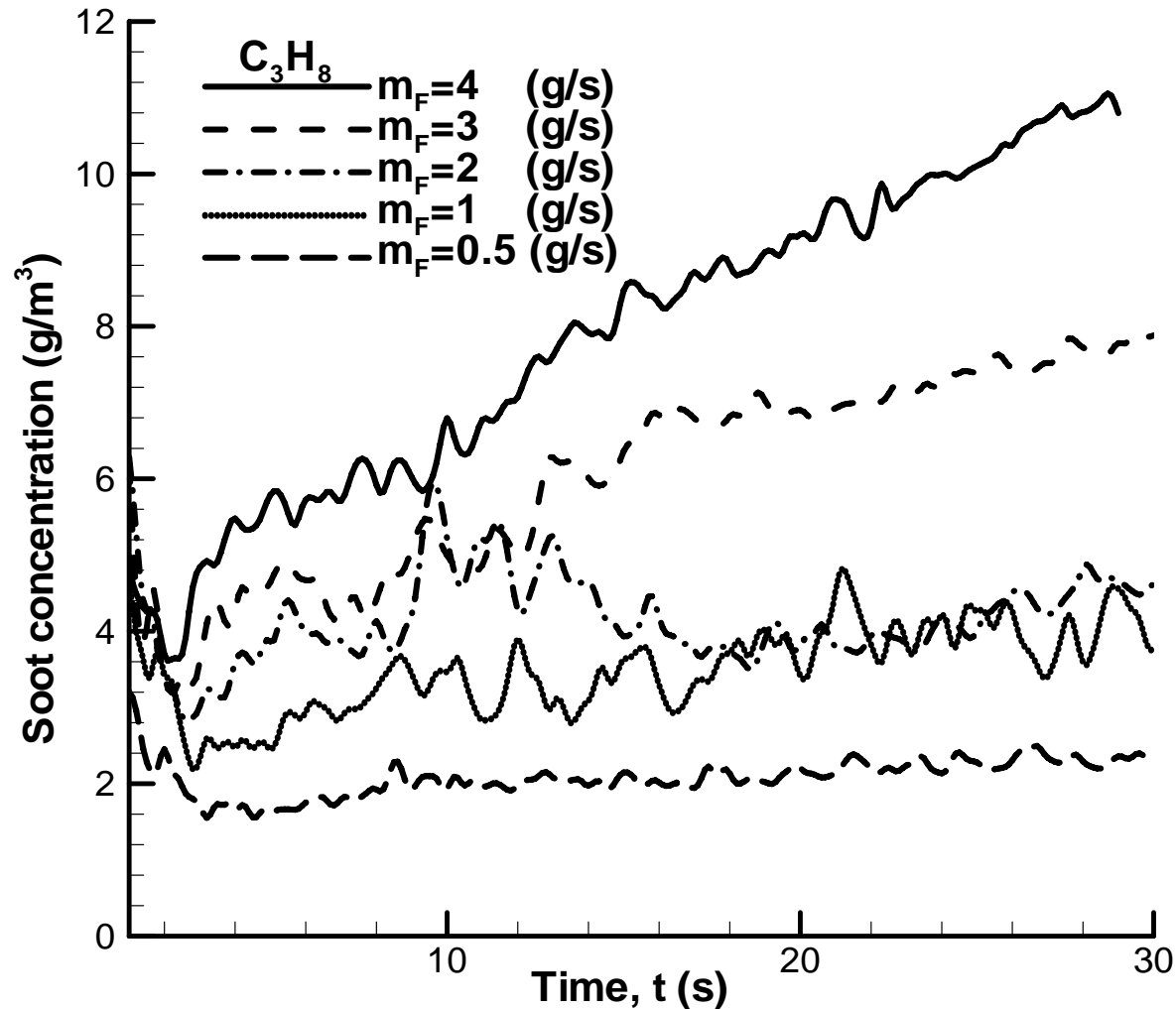
Evolution des suies durant l'épuisement de la flamme



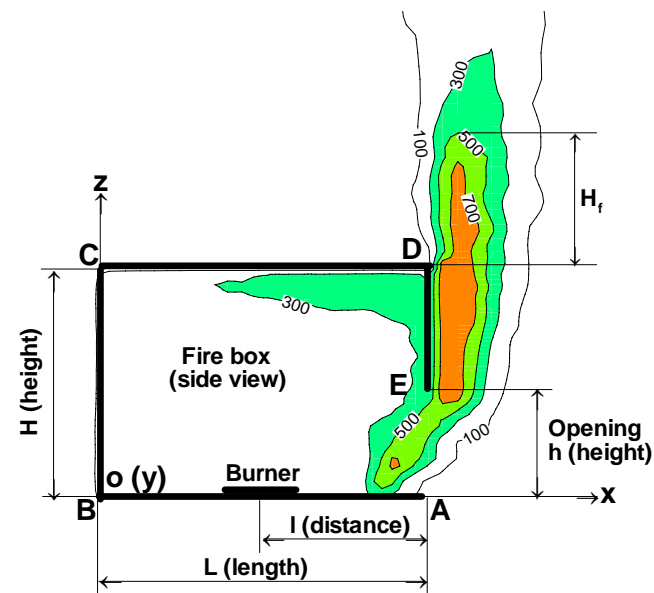
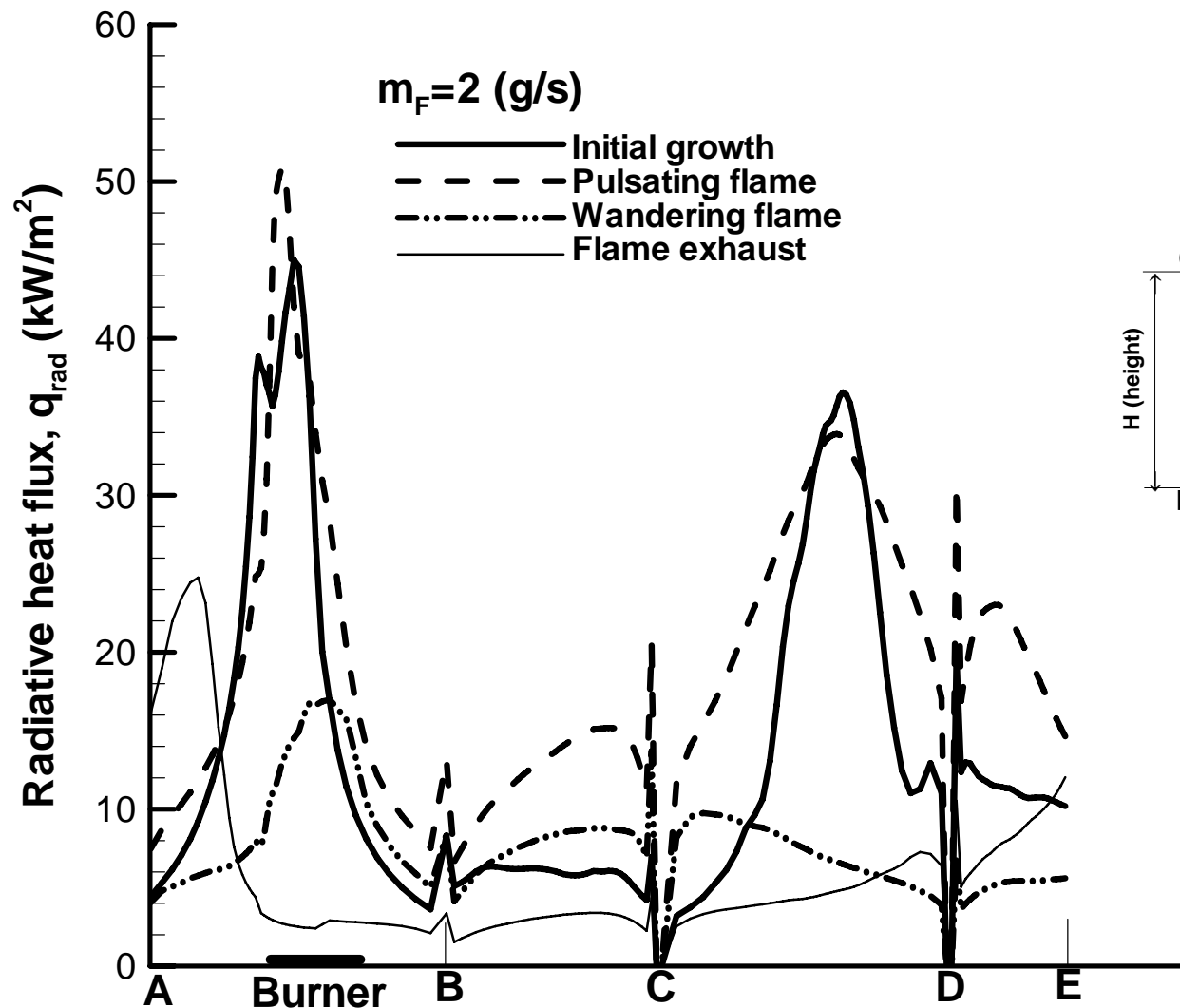
Evolution de la fraction massique de monoxyde de carbone en fonction du débit massique du combustible



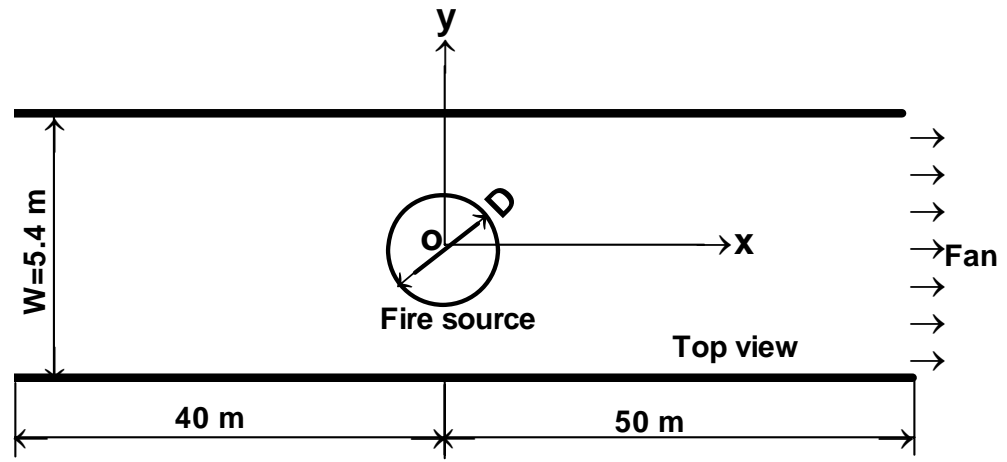
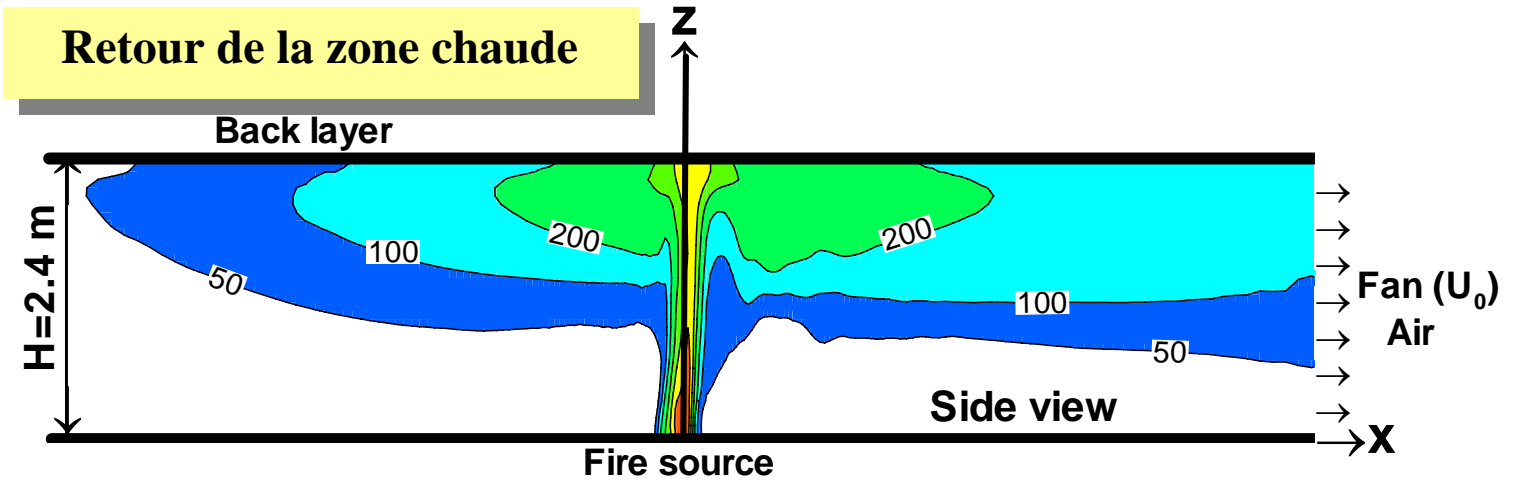
Evolution de la concentration des suies en fonction du débit massique du combustible



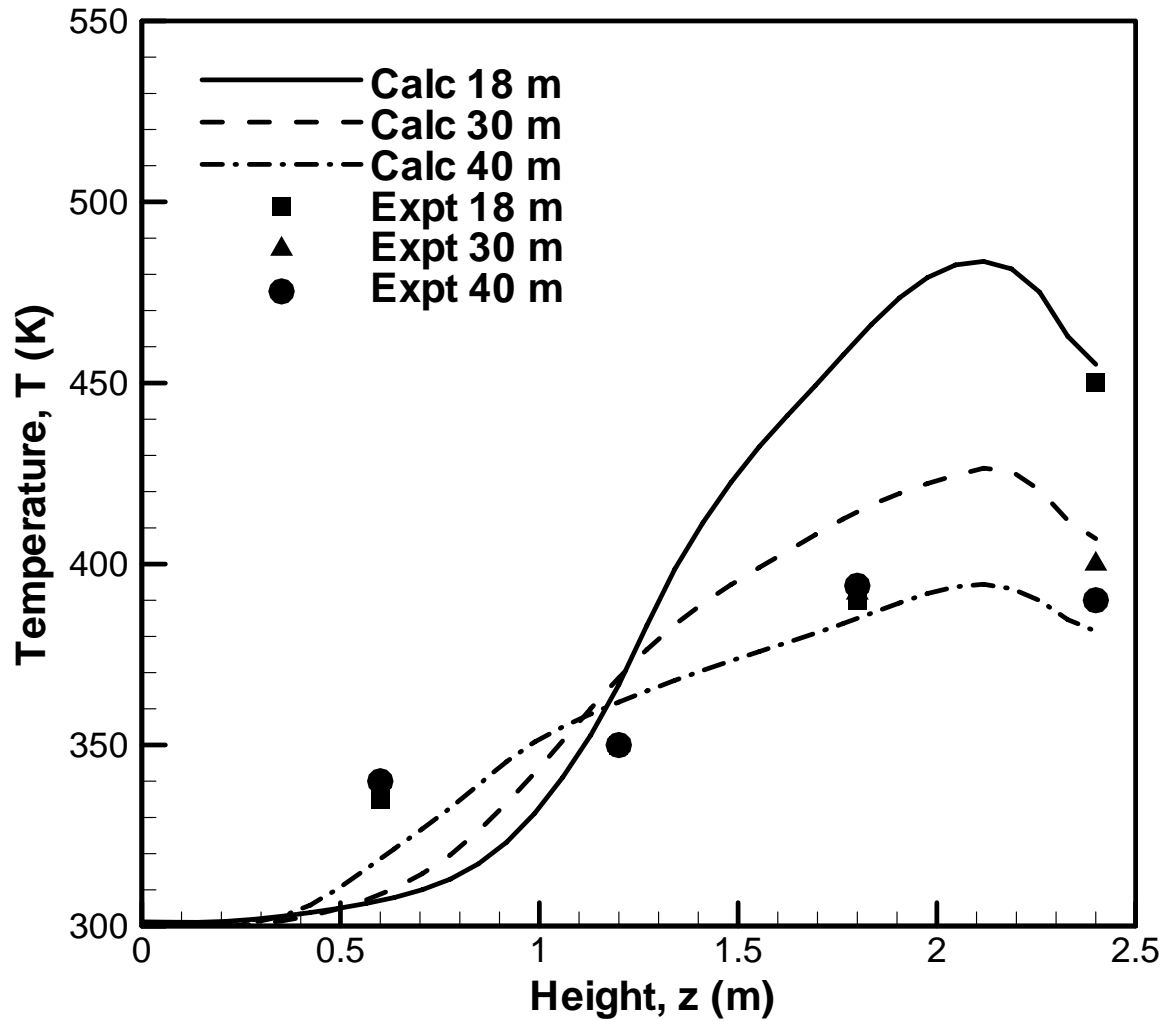
Evolution du flux radiatif durant l'épuisement de la flamme



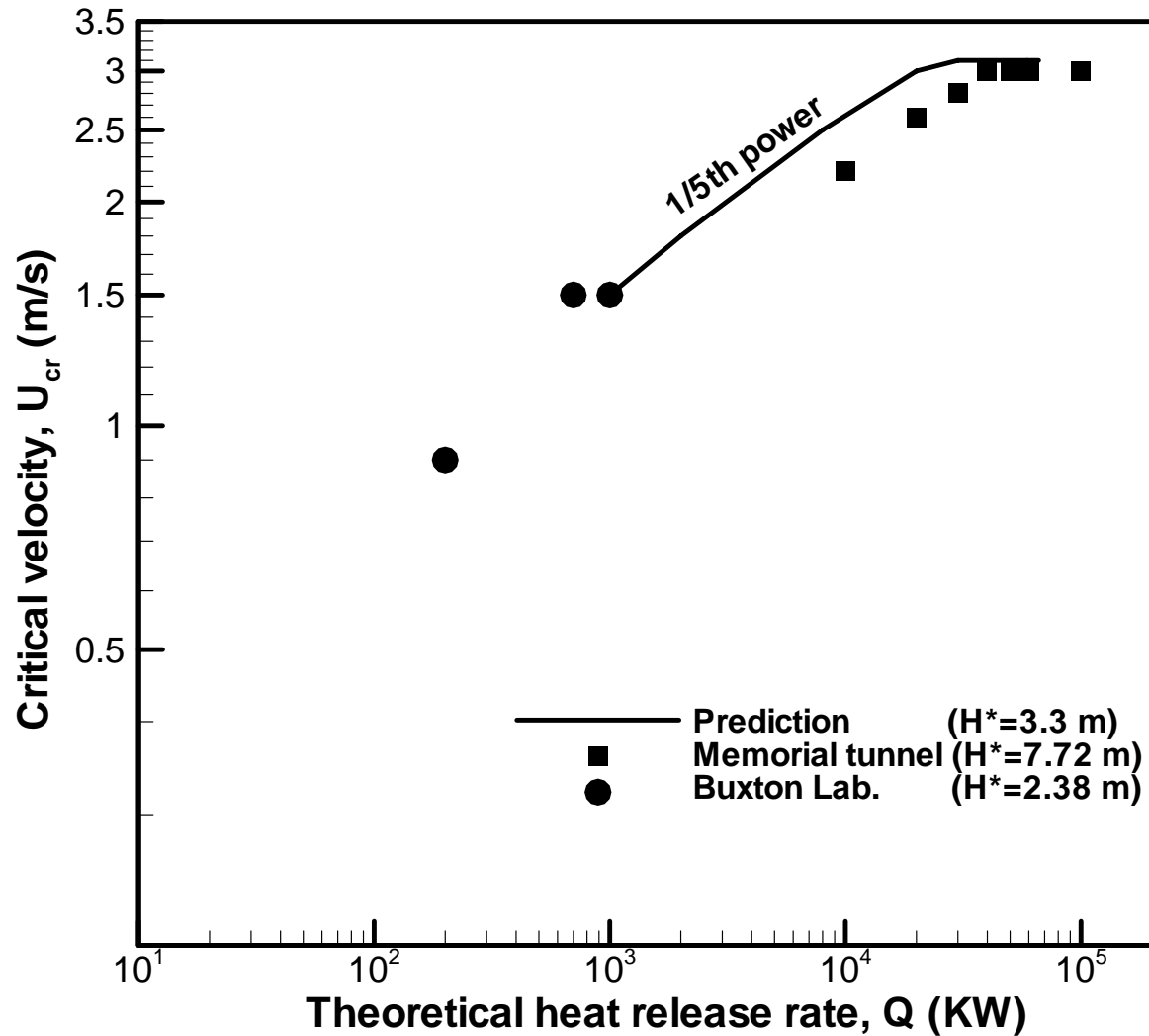
FEU DE NAPPE SOUMIS AU VENT TRAVERSIER (TUNNEL)



Profils de la température



Evolution de la vitesse critique de ventilation en fonction de la puissance du feu



- 1) Caractérisation des feux couvants et des fumées (combustion du solide ou liquide)**
- 2) Phénomène de flashover (embrasement généralisé du local)**
- 3) Extinction naturelle de la flamme**
- 4) Analyse des risques de ré-inflammation des fumées riches (retour de flamme)**