

---

## MODÉLISATION EN SCIENCES PHYSIQUES ET SCIENCES DE L'INGÉNIEUR

---

DURÉE: 5 HEURES

---

*Aucun document n'est autorisé.*

*Pour les épreuves d'admissibilité, l'usage de calculatrices électroniques de poche à alimentation autonome, non imprimantes et sans document d'accompagnement, est autorisé, une seule à la fois étant admise sur la table ou le poste de travail, et aucun n'échange n'est autorisé entre les candidats.*

---

## INTRODUCTION

---

L'épreuve se décompose en deux problèmes, à traiter de préférence dans l'ordre proposé. Ils concernent tous deux la modélisation mathématique des phénomènes de combustion et d'explosion.

Le premier problème se focalise plus particulièrement sur les réactions explosives. Leurs principales caractéristiques ont été étudiées au milieu du XIX<sup>e</sup> siècle par Van't Hoff et Bunsen. Elles présentent la particularité d'avoir un taux de réaction qui dépend de manière non-linéaire et forte de la température (par opposition aux réactions lentes dont la dépendance est faible). Cette propriété de forte dépendance est due à une grande énergie d'activation de la réaction de combustion ; elle se couple en général à une forte puissance thermique de la réaction. Dans ces conditions, un phénomène d'autocatalyse thermique peut se produire, provoquer l'emballement de la réaction et une très forte augmentation de la température ; ce phénomène est appelé *explosion thermique*. Divers travaux expérimentaux ont alors conduit N.N. Semenov à développer la théorie de l'explosion thermique dans les années 1920 pour le cas d'un réacteur homogène. Frank-Kamenetskii a ensuite repris cette théorie dans le cas non-homogène et proposé un traitement exhaustif dans un certain nombre de cas.

Le but du problème I est d'introduire ces théories et de saisir les mécanismes de base de couplage entre le terme source thermique issu de la réaction chimique, la conduction thermique et les pertes thermiques au bord des domaines considérés. Le but est d'obtenir les *conditions critiques d'explosion*, i.e. les valeurs limites de certains paramètres qui déterminent si le phénomène d'explosion a lieu ou non. Finalement, le dernier point que nous aborderons sera le couplage entre l'explosion thermique et la convection naturelle en présence du champ de gravitation. Ces études sont importantes et trouvent de nombreuses applications dans la détermination des conditions de sécurité pour le stockage de matières dangereuses.

Dans le problème I, nous nous contentons de considérer des phénomènes explosifs localisés mais nous ne traitons pas leur propagation car il s'agit d'un problème essentiellement plus difficile qui nécessite de prendre en compte les effets de densité volumique de masse et de pression puisque des ondes de chocs ou de détonations peuvent se former. On s'intéresse par contre, dans le problème II, à un modèle simple de déflagration à pression constante qui décrit la propagation d'une flamme à faible vitesse par rapport à la vitesse du son. L'étude fondatrice dans ce domaine date de 1928 avec les travaux de Zeldovich sur un modèle que nous allons étudier.

**Notation :** Dans toute l'épreuve, on utilisera les notations suivantes pour les dérivées,  $d_t\phi(t)$  désigne la dérivée temporelle à l'instant  $t$  de la fonction  $t \mapsto \phi(t)$ ,  $\partial_t\Phi(t, x)$ ,  $\partial_x\Phi(t, x)$  et  $\partial_{xx}\Phi(t, x)$  désignent respectivement la dérivée partielle par rapport au temps, la dérivée partielle par rapport à la variable spatiale  $x$  et la dérivée seconde par rapport à la variable  $x$ , au point  $(t, x)$  du champ  $(t, x) \mapsto \Phi(t, x)$ .

**Note :** Le premier problème requiert l'utilisation du théorème de Cauchy-Lipschitz. Il est rappelé dans l'énoncé.

## PROBLÈME I

---

### I PRÉSENTATION

---

Nous allons dans un premier temps considérer les équations qui régissent l'écoulement d'un mélange gazeux réactif compressible dans un domaine bi-dimensionnel  $\Omega$ ,  $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ . Le candidat ne devra pas être impressionné par la complexité du système car les quatre premières parties se concentrent sur des versions très simplifiées pour lesquelles le mouvement hydrodynamique du mélange est supposé inexistant (la vitesse du fluide est zéro, uniformément en temps et en espace).

Ce type d'écoulement est régi par un système d'équations aux dérivées partielles pour lequel le vecteur des variables est  $\mathcal{U} = (\rho_1, \dots, \rho_n, u, v, T)^t$ , où  $^t$  désigne la transposition et où  $\rho_k$  est la densité volumique de masse partielle de la  $k^{\text{ème}}$  espèce,  $k$  variant de 1 à  $n$ ,  $\rho = \sum_{k=1}^n \rho_k$ , la densité volumique de masse totale,  $u$  et  $v$  les composantes de la vitesse du fluide dans les directions  $x$  (horizontale) et  $z$  (verticale) et enfin  $T$ , la température du fluide. Ces quantités dépendent donc du temps et des coordonnées d'espace :  $\mathcal{U} = \mathcal{U}(t, x, z)$ . Il n'est pas nécessaire de détailler ce système d'équations, mais il faut souligner qu'il doit être accompagné par des relations thermodynamiques et une loi d'état. Cette loi d'état relie la pression (qui apparaît dans les équations pour la vitesse à travers son gradient) à la densité volumique de masse totale, à la température et à la composition du mélange gazeux. On peut alors écrire une équation sur le champ de température  $T(t, x, z)$  qui prend la forme :

$$\rho c_p \partial_t T + \rho c_p (u \partial_x T + v \partial_z T) = \nabla \cdot (\mathbf{j}_{\text{th}}) + \Pi + \partial_t p + u \partial_x p + v \partial_z p + \Gamma. \quad (\text{I.1})$$

où  $c_p$  est la capacité thermique massique à pression constante,  $\Pi$  représente la puissance des forces de viscosité,  $\mathbf{j}_{\text{th}}$ , le vecteur densité volumique de courant thermique et  $\nabla \cdot \mathbf{j}_{\text{th}}$  désigne sa divergence,  $\Gamma$ , la puissance thermique (terme source) due aux réactions chimiques.

La pression  $p$  vérifie la loi d'état des mélanges de gaz parfaits :

$$p = \rho \frac{R}{\bar{m}} T, \quad \frac{1}{\bar{m}} = \sum_{k=1}^n \frac{Y_k}{m_k}, \quad (\text{I.2})$$

où  $m_k$  est la masse molaire de la  $k^{\text{ème}}$  espèce,  $\bar{m}$  la masse molaire moyenne du mélange,  $R$  la constante universelle des gaz,  $Y_k = \rho_k / \rho$  la fraction massique de l'espèce  $k$  et on a  $\sum_{k=1}^n Y_k = 1$ ,

par définition de  $\rho$ . Cette loi est la simple généralisation de la loi d'état des gaz parfaits à un mélange gazeux.

Le système de base que nous venons d'évoquer est souvent utilisé dans l'approximation de Oberbeck-Boussinesq qui considère que la pression et la densité volumique de masse sont quasiment constantes  $p - p_0 \ll p_0$  et  $\rho - \rho_0 \ll \rho_0$  (le signe  $\ll$  signifie "très petit devant" et indique une séparation d'échelles. Ce genre d'hypothèse implique par exemple que  $1 + \frac{p-p_0}{p_0} \approx 1$ , i.e. que cette expression peut être approchée formellement par 1, ou encore que les variations de pression ou de densité volumique de masse par rapport à un état de référence  $p_0$  ou  $\rho_0$  sont négligeables).

**I.1** On suppose que le mélange gazeux est initialement à la température  $T_0$ , à la densité  $\rho_0$  et à la pression  $p_0$ , uniformément en espace. On néglige les différences de masse molaire, c'est-à-dire  $m_k = m$ ,  $\forall k = 1, \dots, n$ . Montrer que la loi d'état (I.2) se réduit alors à la loi d'état d'un gaz parfait simple  $p = \rho \frac{R}{m} T$ .

**I.2** Montrer, en utilisant cette loi d'état, que l'approximation de Oberbeck-Boussinesq est valable pour de faibles variations de température, c'est-à-dire  $T - T_0 \ll T_0$ .

Avant de revenir sur les équations dans la dernière partie du problème, nous allons commencer par comprendre les mécanismes de base sur des modèles simplifiés.

## II EXPLOSION ADIABATIQUE HOMOGENÈE

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

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

$$d_t T = (T_b - T_0) B e^{-\frac{E}{RT}} Y. \quad (\text{II.2})$$

$B$  est le facteur de fréquence (homogène à l'inverse d'un temps),  $E$  est l'énergie d'activation de la réaction,  $T_b$  la température du mélange lorsque tout le fuel est consommé ; cette température est associée à une enthalpie de réaction, à la capacité thermique du milieu et à une quantité de fuel présente dans le réacteur. On suppose dans ce problème que la réaction est exothermique et donc que  $T_b - T_0 > 0$ . Par ailleurs  $B$ ,  $E$  et  $R$  sont des constantes

strictement positives. On ne prend en compte, dans ce modèle, que le chauffage du milieu par la réaction et l'on suppose que le système est isolé thermiquement de l'extérieur ; on parle alors d'explosion thermique adiabatique.

**Note :** On donne ici un théorème utile pour la suite sous la forme d'une adaptation du théorème d'existence et unicité de solution de Cauchy-Lipschitz. On considère un système d'équations différentielles ordinaires autonome :

$$d_t \Psi = F(\Psi), \quad t > 0, \quad (\text{II.3})$$

avec  $\Psi(0) = \Psi_0$  comme donnée initiale du problème de Cauchy et  $\Psi \in \mathbb{R}^n$ .

**THÉORÈME :** On considère un ensemble compact  $\Omega$  de  $\mathbb{R}^n$  sous la forme d'un produit d'intervalles fermés  $\Omega = [a_1, b_1] \times [a_2, b_2] \times \dots \times [a_n, b_n]$ , avec  $a_i < b_i$ ,  $i = 1, \dots, n$ . On suppose que  $F$  applique  $\Omega$  dans  $\mathbb{R}^n$ , que  $F$  est  $C^k$ ,  $k \geq 0$ , Lipschitz sur  $\Omega$  et que  $\Psi_0$  appartient à  $\Omega$ . On fait par ailleurs l'hypothèse que dans le cas où la donnée initiale  $\Psi_0$  appartient à  $\partial\Omega$ , la frontière de  $\Omega$ , le vecteur  $F(\Psi_0)$  est soit nul (point singulier) soit non dirigé vers l'extérieur du domaine  $\Omega$ . Alors il existe une unique solution maximale  $\Psi(t)$ ,  $t > 0$ , du système (II.3) de régularité  $C^{k+1}$  sur un intervalle de temps  $[0, t_{\max}[$ , avec éventuellement  $t_{\max} = +\infty$ , telle que  $\Psi(t) \in \Omega$ . Dans le cas où  $t_{\max}$  est fini, on a  $\Psi(t) \rightarrow \mu$ ,  $\mu \in \partial\Omega$ , quand  $t \rightarrow t_{\max}$ .

**COROLLAIRE :** Sous les hypothèses du théorème précédent, si deux solutions  $\Psi_1$  et  $\Psi_2$  du système (II.3) sont égales en un instant  $t_0$ ,  $\Psi_1(t_0) = \Psi_2(t_0) = \chi$ , même si  $\chi \in \partial\Omega$  (par exemple si  $t_0 = 0$  ou si  $t_0$  est un temps d'existence maximal fini), alors ces deux solutions sont égales sur l'intersection des intervalles de temps d'existence des deux solutions maximales.

L'idée sous-jacente est que sous des hypothèses de régularité de  $F$ , deux solutions distinctes du système (II.3) ne peuvent pas "se croiser" dans le domaine  $\Omega$ .

**II.1** Le but de cette question est de montrer l'existence d'une solution pour tout temps et d'obtenir des renseignements sur la structure qualitative de la solution du système (II.1-II.2).

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

**II.1.b** En déduire une équation autonome sur la variable  $Y(t)$

$$d_t Y = \Phi(Y), \quad (\text{II.4})$$

et expliciter la fonction  $\Phi$ .

**II.1.c** En appliquant le théorème donné ci-dessus, montrer qu'il existe une unique solution maximale  $C^\infty$  sur l'intervalle de temps  $[0, t_{\max}[$ . Montrer que la fonction  $Y(t)$  est monotone strictement décroissante, puis que  $t_{\max} = +\infty$ . En déduire que  $Y(t)$  est strictement positive (Indication : supposer que  $t_{\max}$  est fini, montrer que la seule possibilité est que  $Y(t) \rightarrow 0$  quand  $t \rightarrow t_{\max}$ , considérer la solution constante égale à zéro et conclure en utilisant le corollaire ci-dessus).

**II.1.d** Montrer que  $T(t)$  est monotone croissante bornée supérieurement par  $T_b$ .

**II.1.e** Déduire de II.1.c que la limite de  $Y(t)$  en  $+\infty$  est 0.

**II.1.f** Représenter graphiquement le comportement qualitatif de la solution.

**II.1.g** Proposer une équation différentielle autonome décrivant l'évolution de la température  $T(t)$ , ne faisant pas intervenir  $Y$ , sous la forme  $d_t T = \Lambda(T)$  et donner une expression explicite pour la fonction  $\Lambda(T)$ .

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

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

$$\beta = \frac{E}{RT_0} \gg 1.$$

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

$$(T_b - T_0) \gg \frac{RT_0^2}{E},$$

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

**II.1.g** On se place dans le cas où  $T_b = 3000\text{K}$ ,  $T_0 = 600\text{K}$ . Représenter sur deux graphiques les fonctions  $T \rightarrow \Lambda(T)$  pour  $\beta = 50$  et  $\beta = 100$ , et pour  $T \in [T_0, T_b]$ . (Afin de pouvoir comparer les deux non-linéarités, on divisera la fonction par sa valeur maximum  $\Lambda_{\max}$  sur l'intervalle  $[T_0, T_b]$ ). En comparant les valeurs de  $\Lambda(T)/\Lambda_{\max}$  pour  $T = 1000\text{K}$  et pour  $T = 2400\text{K}$ , dans les deux situations et en observant les graphiques, expliquer ce que signifie "une forte non-linéarité dépendant de l'énergie d'activation".

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

**II.2.a** Adimensionner l'équation vérifiée par la température et écrire pour cela une équation sur la température réduite  $\theta = (T - T_0)/T_{FK}$ . Cela revient à utiliser comme température de référence la température initiale et comme échelle, la température de Frank-Kamenetskii.

**II.2.b** Montrer que, sous les hypothèses [H1] et [H2], et tant que  $\theta \ll \beta$ ,  $\theta$  peut être approchée par une fonction  $\tilde{\theta}(t)$ , solution de l'équation différentielle :

$$d_t \tilde{\theta} = \frac{1}{\tau_I} \exp(\tilde{\theta}), \quad (\text{II.5})$$

avec la condition initiale  $\tilde{\theta}(0) = 0$ . Le paramètre  $\tau_I$  est appelé temps d'induction et l'on donnera son expression explicite en fonction de  $B$ ,  $R$ ,  $E$ ,  $T_b$  et  $T_0$ .

**II.2.c** Dans l'équation précédente, on a remplacé sous l'hypothèse [H1], l'argument de l'exponentielle par  $\tilde{\theta}$ . Reprendre cette approximation dans les variables dimensionnées et expliquer pourquoi on l'appelle "linéarisation de Frank-Kamenetskii".

**II.2.d** On pose  $\tau = t/\tau_I$ ; déduire de (II.5) l'équation différentielle sur  $\Theta(\tau) = \tilde{\theta}(t)$ . Résoudre l'équation correspondante et donner une formule explicite pour  $\Theta(\tau)$ .

**II.2.e** Décrire le comportement “explosif” de cette solution. Tracer l'évolution temporelle de la solution  $\tilde{\theta}(t)$ , pour  $t \in [0, \tau_I[$ , et ceci selon deux échelles différentes pour l'axe des ordonnées : la première est telle que le maximum de l'axe des ordonnées est 5, et la seconde telle que le maximum est  $\beta$  (on prendra  $\beta$  égal à 50 pour l'exemple). Décrire le comportement aux deux échelles et commenter.

**II.2.f** On appelle  $t_1$  le temps pour lequel  $\theta$  atteint  $\beta/10 = 5$ . Exprimer la différence relative entre  $t_1$  et  $\tau_I$ , ainsi que le pourcentage de  $\tau_I$  que représente  $t_1$ .

**II.3** Il s'agit de montrer que l'équation simplifiée (II.5) est un “bon modèle” et d'en déduire le comportement qualitatif général de la solution de (II.1-II.2).

**II.3.a** Montrer que la condition de validité  $\theta \ll \beta$  n'est pas contraignante en utilisant la fin de la question II.2 et en déduire le comportement du système de départ sur l'intervalle  $[0, \tau_I[$ .

**II.3.b** Calculer la température correspondant au taux de réaction maximum, en valeur absolue, pour le système (II.1-II.2), sachant que le taux de réaction est le second membre de l'équation sur  $Y$  et vaut donc  $-B \exp(-E/RT) Y$ . Comment se situe-t-elle par rapport à  $T_b$  ?

**II.3.c** Quel scénario peut-on déduire sur l'évolution du système (II.1-II.2) dans la mesure où le taux de réaction maximum est atteint dans un proche voisinage de  $\tau_I$  ?

**II.3.d** Caractériser l'évolution du système dans le plan des variables dimensionnées  $(Y, T)$ ,  $Y \in [0, 1]$  et  $T \in [T_0, T_b]$  (appelé aussi plan de phase). Tracer par ailleurs les fonctions  $Y(t)$  et  $T(t)$ . Décomposer l'évolution du système en trois étapes que l'on précisera.

**II.3.e** Que se passe-t-il pour la consommation de fuel (caractérisée par la fraction massique de fuel  $Y$ ) dans l'intervalle  $t \in [0, \tau_I[$  ? Interpréter l'hypothèse [H2].

**II.3.f** Que devient l'évolution du système quand l'énergie d'activation devient de plus en plus grande ?

**II.3.g** On choisit une application numérique avec  $T_0 = 600\text{K}$ ,  $T_b = 3000\text{K}$ ,  $\beta = 50$ . On donnera la valeur de la température de Frank-Kamenetskii et on referra les diagrammes de la question II.3.d en marquant les points particuliers suivants tels que

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

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

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

### III TRAITEMENT DES PERTES THERMIQUES

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

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

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

$$d_t T = (T_b - T_0) B e^{-\frac{E}{RT}} Y - \frac{1}{\tau_p} (T - T_0), \quad (\text{III.2})$$

où  $\tau_p$  est un temps de transfert à la paroi et où l'on prend les mêmes données initiales que dans la partie II. On suppose que les deux hypothèses [H1] et [H2] sont vérifiées.

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

**III.1.a** Appliquer le théorème donné dans l'énoncé et montrer l'existence d'une solution maximale  $C^\infty$  sur l'intervalle  $t \in [0, t_{\max}[$ .

**III.1.b** Montrer que  $T > T_0$  sur l'intervalle  $]0, t_{\max}[$  (indication : écrire une équation sur  $\mathcal{T} = \exp(t/\tau_p)(T - T_0)$ ).

**III.1.c** Montrer que la quantité  $H$  introduite dans la partie II n'est plus conservée au cours du temps par (III.1-III.2) en présence de pertes thermiques. Montrer qu'elle est majorée par la valeur obtenue pour  $H$  dans le cas adiabatique de la partie II.

**III.1.d** Montrer que  $T < T_b$ .

**III.1.e** Montrer, en utilisant le même type d'argument que dans la partie II, que  $t_{\max} = +\infty$  et que  $Y(t) > 0, \forall t \in [0, +\infty[$  (Indication : utiliser  $H \leq T_b$  et montrer que la seule possibilité, si  $t_{\max}$  est fini, est que  $Y \rightarrow 0$  et  $T \rightarrow T^*$  quand  $t \rightarrow t_{\max}$ . Construire alors une solution telle que  $\tilde{Y} = 0$  et qui passe par le point  $(\tilde{Y} = 0, \tilde{T} = T^*)$  en  $t_{\max}$ ).

**III.1.f** Dédire des questions qui précèdent que  $Y$  tend vers zéro à l'infini et par conséquent que  $T$  tend vers  $T_0$  à l'infini.

**III.1.g** Donner le comportement qualitatif du système. Tracer la forme de  $Y(t)$  et  $T(t)$ .

**III.1.h** Adimensionner les équations (III.1-III.2) en utilisant le même adimensionnement que dans la partie II, et en prenant comme temps adimensionné  $\tau = t/\tau_I$  (donner  $d_\tau Y$ ,  $d_\tau \theta$  en fonction de  $Y$  et  $\theta$ ).

**III.2** Comme la quantité  $H$  n'est plus conservée, on ne peut plus se ramener à une seule équation et il subsiste alors le problème de la présence de la fraction massique dans l'équation sur  $\theta$  qui décrit l'influence de la consommation de fuel sur la vitesse de la réaction chimique.

**III.2.a** Montrer que, sous les hypothèses [H1] et [H2], l'équation sur  $\theta$  peut être approchée par :

$$d_\tau \tilde{\theta} = \exp(\tilde{\theta}) - q^-(\tilde{\theta}), \quad (\text{III.3})$$

où  $q^-(\tilde{\theta}) = \gamma \tilde{\theta}$  et donner l'expression de  $\gamma$ .

**III.2.b** Sur quel intervalle de temps peut-on considérer que l'équation précédente est représentative de la physique du système (III.1-III.2) ? Quelle hypothèse implique son utilisation sur la consommation de fuel dans cet intervalle ?

**III.2.c** Représenter sur un diagramme les graphes des deux fonctions  $\exp(\tilde{\theta})$  et  $q^-(\tilde{\theta})$  en fonction de  $\tilde{\theta}$  pour diverses valeurs de  $\gamma$ . Etudier les points stationnaires de l'équation (III.3) définis par  $\exp(\tilde{\theta}) = q^-(\tilde{\theta})$ , en fonction du rapport  $\gamma = \tau_I/\tau_p$ . Proposer trois scénarios. On donnera en particulier la valeur critique  $\gamma_{cr}$  de  $\gamma$  ainsi que la température  $\tilde{\theta}_{cr}$  du point stationnaire correspondant. Interpréter physiquement les trois cas.

**III.2.d** Relier  $\theta_{cr}$ , en variables dimensionnées, à la température de Frank-Kamenetskii.

**III.2.e** Classifier et caractériser les diverses dynamiques possibles pour l'équation (III.3) en fonction de rapport  $\gamma$ . On étudiera en particulier les limites  $\gamma \rightarrow 0$  et  $\gamma \rightarrow +\infty$ .

**III.2.f** Que dire de la stabilité des points stationnaires quand ils existent (un point stationnaire est dit stable pour l'équation différentielle (III.3) si l'évolution d'une solution, dont la donnée initiale est prise dans un voisinage du point, est la convergence vers cet état stationnaire et instable dans le cas contraire) ?

**III.3** Parmi les divers scénarios proposés, certains correspondent au comportement du système (III.1-III.2) et d'autres non. Nous allons étudier ce point dans cette sous-partie.

**III.3.a** Montrer que cette correspondance est effective dans le cas  $\gamma \rightarrow 0$  et faire le lien avec la partie II.

**III.3.b** Pour  $\gamma > \gamma_{cr}$ , montrer que l'existence d'un état stationnaire vers lequel converge la solution de (III.3) implique une borne sur la température réduite  $\theta$  pour le système (III.1-III.2) et garantit la non-explosion.

**III.3.c** Dans le cas où il y a explosion pour l'équation (III.3), c'est-à-dire pour  $\gamma < \gamma_{cr}$ , on estime  $\tilde{\tau}_I$ , le temps d'induction non-adiabatique, par :

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

Justifier la borne d'intégration en utilisant les hypothèses.

**III.3.c** On cherche la limite de ce temps quand  $\gamma$  tend vers  $\gamma_{cr}$  par valeur inférieure. Pour cela on pose  $\tilde{\theta} = \tilde{\theta}_{cr} + \chi$  et  $\gamma = \gamma_{cr}(1 - \xi)$  et l'on suppose  $\xi \ll 1$  et donc

$\chi \ll 1$  (cette dernière estimation, que l'on admettra, vient du fait que lorsque  $\xi \ll 1$ , la température s'établit en un temps de l'ordre de 1 autour de  $\theta = 1$  et reste dans ce voisinage pendant une grande partie de la dynamique). Donner une estimation de  $\tilde{\tau}_I$  en fonction de  $\xi$ , pour  $\xi$  petit et montrer que  $\tilde{\tau}_I$  tend vers l'infini quand  $\xi$  tend vers 0 (indication : on écrira l'intégrale en fonction de  $\chi$  et  $\xi$ , puis on remplacera  $\exp(\chi)$  par  $1 + \chi + \chi^2/2$  puisque  $\chi$  supposé petit et enfin on utilisera l'égalité  $\xi + \chi\xi + \chi^2/2 \approx \xi + ((\chi + \xi)/\sqrt{2})^2$ ). En déduire la dynamique de l'explosion quand l'on s'approche des conditions critiques par valeur inférieure, et la représenter sur un diagramme  $(t, \theta(t))$ .

**III.3.d** Que conclure sur le modèle (III.3) au voisinage des conditions critiques en terme de l'hypothèse [H2] : "on néglige la consommation de fuel et l'on suppose  $Y(t) \approx 1$  sur  $t \in [0, \tau_I]$ " ?

**III.4** En fait, la restriction sur l'applicabilité du modèle quand on s'approche des conditions critiques n'a d'effet que dans un très petit voisinage inférieur de  $\gamma_{cr}$ .

**III.4.a** Présenter un diagramme des diverses évolutions temporelles possibles de la température dans le cas général du système (III.1-III.2).

**III.4.b** Donner l'évolution dans le plan de phase  $(Y, T)$  et faire le lien avec la partie II, afin de synthétiser les scénarios possibles.

**III.4.c** Conclure cette étude.

#### IV LE CAS INHOMOGÈNE : DIFFUSION

Nous allons maintenant considérer le cas inhomogène pour lequel les champs de température et fraction massique dépendent non seulement du temps, mais aussi de la variable d'espace. On se place dans le cadre particulier d'une bande infinie dans la direction horizontale  $x$  et de hauteur  $2L$  dans la direction  $z$ . On suppose le problème homogène dans la direction  $x$  ce qui revient donc à travailler sur un problème monodimensionnel présenté sur la Figure 1.

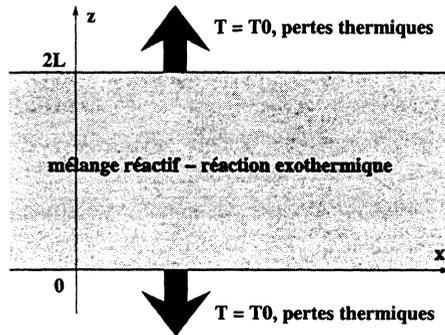


Figure 1 : Configuration

On considère alors le système de deux équations aux dérivées partielles suivant :

$$\partial_t Y - D \partial_{zz} Y = -B e^{-\frac{E}{kT}} Y, \quad (\text{IV.1})$$

$$\partial_t T - D \partial_{zz} T = (T_b - T_0) B e^{-\frac{E}{kT}} Y, \quad (\text{IV.2})$$

où  $\partial_{zz}$  désigne la dérivée partielle seconde en la variable d'espace,  $\partial_t$  la dérivée partielle en temps, avec les conditions initiales  $Y(0, z) = 1$  et  $T(0, z) = T_0$ , pour tout  $z \in [0, 2L]$  et les conditions aux limites  $T(t, 0) = T(t, 2L) = T_0$  et  $\partial_z Y(t, 0) = \partial_z Y(t, 2L) = 0$ . La condition aux limites sur  $Y$  impose la non pénétration du fuel dans la paroi du tube et le fait d'imposer la température au bord induit des pertes thermiques. On peut alors montrer qu'il existe une solution régulière  $C^\infty$  de ce système pour  $z \in [0, 2L]$ ,  $t \in [0, +\infty[$ , telle que  $Y(t, z) \in [0, 1]$ ,  $T(t, z) \in [T_0, T_b[$  et telle que la fonction  $z \rightarrow T(t, z)$  est concave pour tout  $t \in [0, +\infty[$ .

#### IV.1

**IV.1.a** Ecrire une équation d'évolution sur la moyenne  $\bar{Y}(t) = \frac{1}{2L} \int_0^{2L} Y(t, z) dz$  de  $Y$  sur l'intervalle  $[0, 2L]$  et sur  $\bar{T}(t) = \frac{1}{2L} \int_0^{2L} T(t, z) dz$ , celle de  $T$ .

**IV.1.b** En utilisant les conditions aux limites, le signe de  $T - T_0$ , et donc le signe du gradient de  $T$  aux limites en  $z = 0$  et  $z = 2L$ , évaluer les champs de température et de fraction massique à la limite  $t \rightarrow +\infty$ .

**IV.1.c** Faire le lien avec le modèle homogène de la partie III.

**IV.2** On introduit un temps de diffusion  $\tau_{\text{dif}} = L^2/D$ , ainsi que  $\lambda = \tau_{\text{dif}}/\tau_I$ , son rapport au temps d'induction introduit dans la partie II. En utilisant  $L$  comme échelle de longueur, en notant  $\xi = z/L$ ,  $\tau = t/\tau_I$ , et  $\theta$  défini comme précédemment, donner la forme adimensionnée de l'équation aux dérivées partielles sur  $\theta$  lorsque l'on néglige la consommation de fuel et que l'on prend  $Y \equiv 1$  comme nous l'avons fait auparavant. La mettre sous la forme

$$\partial_\tau \theta - \frac{1}{\lambda} \partial_{\xi\xi} \theta = \exp(\theta), \quad (\text{IV.2})$$

où on explicitera et justifiera le calcul de  $\lambda$ .

**IV.3** Donner une expression analytique implicite de l'état stationnaire  $\theta^{\text{st}}(\xi)$  associé à l'équation (IV.2) (indication : remarquer que l'équation différentielle sur  $\theta^{\text{st}}$  en  $\xi$  admet une intégrale première en multipliant par la dérivée, utiliser la symétrie et la concavité pour caractériser  $d_\xi \theta^{\text{st}}$  en  $\xi = 1$  au centre du réacteur. La seconde intégration se fait par changement de variable adéquat  $\phi^2(\xi) = \exp(\theta^{\text{st}}(1)) - \exp(\theta^{\text{st}}(\xi))$  que l'on justifiera) ainsi qu'une équation du type

$$\Psi(\theta_m^{\text{st}}) = \sqrt{\lambda/2},$$

reliant  $\lambda$  à la température maximum  $\theta_m^{\text{st}}$  au centre.

**IV.4** Tracer et donner la forme de cette fonction  $\Psi$ ; montrer qu'elle admet un maximum et un paramètre critique  $\sqrt{\lambda_{\text{cr}}/2} = \Psi^{\text{max}}$  associé. En déduire, comme dans la partie III, trois scénarios, sur l'existence ou non de profils de température réduite stationnaires, suivant si  $\lambda < \lambda_{\text{cr}}$ ,  $\lambda = \lambda_{\text{cr}}$  ou  $\lambda > \lambda_{\text{cr}}$ .

**IV.5** Dans le cas  $\lambda < \lambda_{\text{cr}}$ , combien existe-t-il de profils stationnaires? En se référant à la partie III, que peut-on prédire sur leur stabilité?

## V LES PHÉNOMÈNES CONVECTIFS

---

Nous n'envisageons pas dans cette partie une étude complète des phénomènes de couplage entre l'explosion thermique dans une bande, comme dans le cas précédent, et la convection naturelle qui va se déclencher lorsque la température au centre dépasse un seuil de stabilité. Ce genre d'étude demande un ensemble de simulations numériques sur ordinateur et une investigation paramétrique. Dans ce contexte, le modèle à utiliser est un couplage entre une équation sur la température en variables adimensionnées :

$$\partial_\tau \theta + \bar{u} \partial_\eta \theta + \bar{v} \partial_\xi \theta = \frac{1}{\lambda} (\partial_{\eta\eta} \theta + \partial_{\xi\xi} \theta) + \exp(\theta), \quad (\text{V.1})$$

où  $\eta$  est la variable adimensionnée dans la direction  $x$ , et les équations de Navier-Stokes pour un fluide incompressible sur  $(\bar{u}, \bar{v})$  avec un terme source, dans l'équation de la vitesse verticale adimensionnée  $\bar{v}$ , qui inclue les variations de densité volumique de masse dues aux faibles variations de température.

V.1 Expliquer, à la lumière des parties précédentes, pourquoi un modèle qui néglige la consommation du fuel, suppose de faibles variations de température et considère l'équation (V.1) permet de rendre compte d'une grande partie des phénomènes d'explosion pour un modèle plus complet quand les hypothèses [H1] et [H2] sont vérifiées.

## PROBLÈME II

---

Dans ce second problème, nous allons aborder la théorie de la propagation de flammes planes laminaires. Ces objets monodimensionnel peuvent se voir, dans certains cas simples, comme des structures auto-similaires (c'est-à-dire dont le profil spatial est invariant au cours du temps) se propageant à vitesse  $c$ .

### I PRÉSENTATION

---

Nous allons aborder ces structures que l'on appelle "ondes progressives" pour des systèmes d'équations aux dérivées partielles, en dimension un d'espace, qui modélisent le couplage instationnaire entre des phénomènes de conduction thermique et des phénomènes de réaction chimique. Nous allons considérer une chimie simple du type "Fuel  $\rightarrow$  Produits" ; l'évolution physique peut alors être décrite par celles de la fraction massique de fuel (qui donne le degré d'avancement de la réaction) et de la température :

$$\partial_t Y - D \partial_{xx} Y = -B \tilde{\psi}(T) Y, \quad (\text{I.1})$$

$$\partial_t T - D \partial_{xx} T = (T_b - T_0) B \tilde{\psi}(T) Y, \quad (\text{I.2})$$

pour  $Y \in [0, 1]$  et  $T \in [T_0, T_b]$ . On rappelle que  $\partial_{xx}$  désigne la dérivée partielle seconde en la variable d'espace  $x$ ,  $\partial_t$  la dérivée partielle en temps ;  $Y(t, x)$  désigne le champ de fraction massique de fuel et  $T(t, x)$  le champ de température. Par ailleurs,  $B$  est le facteur de fréquence homogène à l'inverse d'un temps ;  $\tilde{\psi}$  est une fonction monotone de  $T$  qui vaut 0 en  $T = T_0$ . La température du mélange où tout est brûlé de manière adiabatique est notée  $T_b$ , comme dans le Problème I. On suppose dans ce problème que la réaction est exothermique et donc que  $T_b - T_0 > 0$ . Par ailleurs  $B$  est une constante strictement positive. On remarquera que le coefficient de diffusion de masse et conduction thermique sont pris égaux pour simplifier l'analyse menée dans ce problème.

## II ONDES PROGRESSIVES

Nous allons donc chercher des profils  $\phi(y)$  et  $\theta(y)$ ,  $y \in \mathbb{R}$  et une vitesse  $c$  ( $c$  fait partie des inconnues du problème), tels que  $y = x - ct$  et  $Y(t, x) = \phi(y)$  et  $T(t, x) = \theta(y)(T_b - T_0) + T_0$  soient solution de (I.1-I.2). Ils nous faut aussi imposer des conditions aux limites et c'est sur les comportements à l'infini que nous les fixons en supposant que  $\lim_{y \rightarrow +\infty} \phi(y) = 1$ ,  $\lim_{y \rightarrow -\infty} \phi(y) = 0$  et  $\lim_{y \rightarrow +\infty} \theta(y) = 0$ ,  $\lim_{y \rightarrow -\infty} \theta(y) = 1$ . Les gaz frais sont donc du "côté  $+\infty$ " et les gaz brûlés du "côté  $-\infty$ ". La fraction massique  $Y$  vaut 1 quand la réaction n'a pas eu lieu et 0 quand tout le fuel a été brûlé. On suppose que  $\theta(y) \in ]0, 1[$  et  $\phi(y) \in ]0, 1[$ . La flamme se déplace à la vitesse inconnue  $c$  strictement positive, des gaz brûlés vers les gaz frais (Figure 2).

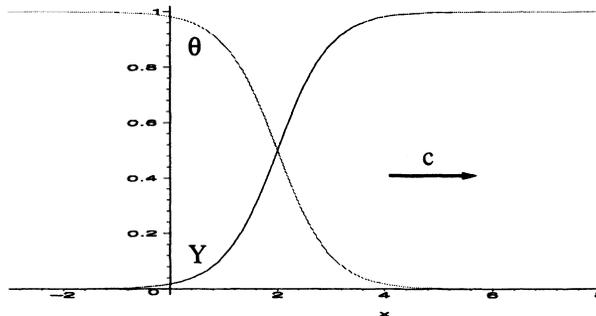


Figure 2 : Onde progressive

**II.1** De la même manière que dans le problème I, on peut se ramener à une seule équation sur la température ; c'est l'objet de cette question.

**II.1.a** Dans un premier temps, on se donne une vitesse de flamme  $c$  positive. Ecrire le système de deux équations différentielles ordinaires satisfaites par les deux fonctions  $\phi(y)$  et  $\theta(y)$ .

**II.1.b** On note  $\mathcal{H} = \phi + \theta$ . Montrer que cette quantité est constante, c'est-à-dire qu'elle ne dépend ni du temps ni de l'espace. Donner sa valeur. (Indication : résoudre l'équation différentielle satisfaite par  $\mathcal{H}$  en utilisant les conditions à l'infini pour déterminer les constantes).

**II.1.c** Montrer alors que le problème se réduit à une équation sur  $\theta(y)$  du type

$$c\theta' + D\theta'' + \psi(\theta) = 0,$$

et donner une expression explicite pour la non-linéarité  $\psi$ .

**II.2** On suppose que l'équation sur  $\theta$  ci-dessus admet une solution régulière  $C^2$ . Montrer que cette solution est monotone en  $y$  (indication : supposer l'existence d'un minimum et montrer qu'il y a une contradiction en étudiant la convexité de la solution).

**II.3** Nous allons maintenant faire quelques hypothèses sur la non-linéarité  $\psi$  afin de montrer l'existence et surtout l'unicité du profil de température  $\theta$  et de la vitesse  $c$ . On suppose donc qu'il existe  $\eta \in ]0, 1[$  tel que,  $\psi(\theta) = 0$  pour  $\theta \in [0, \eta[$ ,  $\psi(\theta) > 0$  pour  $\theta \in ]\eta, 1[$  et  $\psi(1) = 0$ ,  $d_\theta\psi(1) = \gamma$ , avec  $\gamma < 0$  et fini. Une telle fonction est représentée sur la Figure 3.

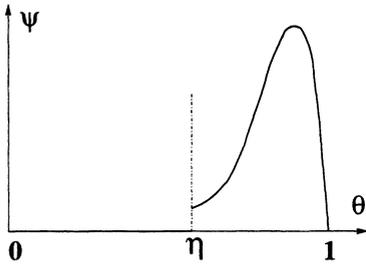


Figure 3 : Structure de la non-linéarité

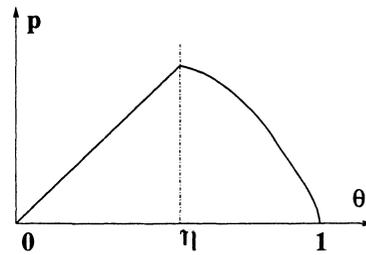


Figure 4 : Onde dans le plan de phase

On va réduire l'étude d'une équation du second ordre à celle d'un système de deux équations à deux inconnues du premier ordre et traiter l'existence dans le plan de phase  $(\theta, \theta')$ . Par souci de simplicité, on suppose que  $D = 1$ .

**II.3.a** On note  $\tilde{p} = \theta' = d_y\theta$ , la dérivée de  $\theta$ . Ecrire le système de deux équations différentielles du premier ordre sur le couple de nouvelles variables  $(\theta(y), \tilde{p}(y))$ . Le plan  $(\theta, \tilde{p})$  est appelé le plan de phase.

**II.3.b** Montrer que l'on peut reposer ce système dans le plan  $(\theta, \tilde{p})$  avec  $\tilde{p} \geq 0$  et  $\theta \in [0, 1]$  sous la forme

$$p d_\theta p = cp - \psi(\theta), \quad (\text{II.1})$$

avec  $p(\theta(y)) = \tilde{p}(y)$  et les conditions aux limites  $p(\theta = 0) = p(\theta = 1) = 0$ , dont la solution (courbe intégrale) permet de joindre les deux états stationnaires  $(0, 0)$  et  $(1, 0)$  comme on le montre sur la Figure 4.

**II.3.c** On cherche dans un premier temps  $\alpha = d_\theta p(1)$ , la pente de la solution près du point  $(1, 0)$ . On peut effectuer un développement de Taylor et supposer  $p = \alpha(1 - \theta)$  et  $\psi(\theta) = \gamma(1 - \theta)$ , avec  $\gamma = d_\theta \psi(1)$ . En utilisant le fait que  $p$  vérifie l'équation (II.1), déterminer  $\alpha$  en fonction de  $c$  et de  $\gamma$ .

**II.3.d** On se place sur l'intervalle  $\theta \in [\eta, 1]$ . On peut alors considérer qu'à une vitesse  $c$  donnée, on peut trouver un profil  $p(\theta)$  qui vérifie (II.1). Montrer que la solution sur cet intervalle est une fonction décroissante de  $c$ , donner l'expression de cette solution  $\bar{p}$  pour  $c = 0$  ainsi que la valeur de  $\bar{p}(\eta)$  en fonction de  $I = \int_0^1 \psi(\theta) d\theta$ .

**II.3.e** Résoudre l'équation dans l'intervalle  $\theta \in [0, \eta[$ . Quel est le sens de variation de cette solution sur  $[0, \eta[$  en fonction de  $c$ ? En déduire l'existence d'une unique vitesse  $c_0$  telle qu'il existe une courbe intégrale continue qui joigne  $(0, 0)$  et  $(1, 0)$  dans le plan de phase  $(\theta, p)$ . On note  $p_0(\theta)$  cette solution.

### III VITESSE ET LIMITE $\eta \rightarrow 1$

Nous allons maintenant donner une estimation sur la vitesse de flamme et en déduire sa limite dans le cas  $\eta \rightarrow 1$  avec  $I$  fixé.

**III.1** Dans cette question, on cherche à obtenir un encadrement de la vitesse de flamme en fonction de  $\eta$ .

**III.1.a** Montrer que  $c_0 = p_0(\eta)/\eta$ .

**III.1.b** En utilisant les mêmes arguments que dans la partie précédente et la fonction  $\bar{p}$ , montrer que  $p_0(\eta) \leq \sqrt{2I}$ .

**III.1.c** Pour obtenir une borne inférieure, utiliser la solution  $\underline{p}$ , de l'équation différentielle :

$$d_\theta \underline{p} = c_0 - \psi(\theta)/\underline{p}(\theta)$$

sur l'intervalle  $\theta \in [\eta, 1]$  avec  $\underline{p}(1) = 0$ . On montrera que dans cet intervalle  $\underline{p}(\theta) \leq p_0(\theta)$ .

**III.1.d** En déduire :

$$\frac{\sqrt{2I}}{\eta} - c_0 \frac{1 - \eta}{\eta} \leq c_0 \leq \frac{\sqrt{2I}}{\eta}, \quad (\text{III.1})$$

qui permet donc d'encadrer la vitesse de flamme en fonction du paramètre  $\eta$ .

**III.2** En supposant que  $I$  reste constant en fonction de  $\eta$  et que l'on change donc simplement la forme de la non-linéarité  $\psi$ , que dire de la vitesse de flamme lorsque  $\eta \rightarrow 1$ ? Que devient alors le taux de réaction? Donner une idée de la structure du profil de température dans ce cas? Où se trouve concentrée toute la réaction? Le profil de température reste-t-il régulier? Le tracer.