



**HAL**  
open science

## Prédiction des mécanismes d'accélération de la combustion dans les atmosphères explosives (EXPRES)

Christophe Proust

► **To cite this version:**

Christophe Proust. Prédiction des mécanismes d'accélération de la combustion dans les atmosphères explosives (EXPRES). Rapport Scientifique INERIS, 2009, 2008-2009, pp.66-68. ineris-01869250

**HAL Id: ineris-01869250**

**<https://ineris.hal.science/ineris-01869250>**

Submitted on 6 Sep 2018

**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.

# Prédiction des mécanismes d'accélération de la combustion dans les atmosphères explosives (EXPRES)

{ C. Proust }

## RÉFÉRENCES

SCI-Steel Construction Institute (2009), *Buncefield Explosion mechanisms: phase 1*, HSE Research Report RR718.

Bradley D., Cresswell T.M., Puttock J.S., 2001. *Flame acceleration due to flame-induced instabilities in large scale explosions*, *Comb. and Flame*, vol. 124, p. 551-559.

Cates A., Samuels B., 1991. *A simple assessment methodology for vented explosions*, *J. Loss Prev. Process Ind.*, vol. 4.

Janovsky B., Podstawska T., Horkel J., Vejs L., 2004. *Vented Confined Explosions: Experiment and AutoReaGas Simulation*, *Loss Prev Symp.*, Prague, June 2004.

Henneton N., 2007. *Propagation d'une flamme de prémélange gazeux d'une enceinte vers un tube : étude des mécanismes de transmission et de coincement au changement de section*, Thèse soutenue à l'Université de Poitiers le 5 décembre 2007.

Daubech J., 2008. *Contribution à l'étude de l'effet de l'hétérogénéité d'un prémélange gazeux sur la propagation d'une flamme dans un tube clos*, thèse soutenue à l'Université d'Orléans-Bourges le 18 juin 2008.

Daubech J., Sochet I., Proust C., 2007. *Flame front perturbations induced by concentration gradients*, *Proceedings of the 14<sup>th</sup> International Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems*, 23<sup>rd</sup>-27<sup>th</sup> July 2007, Poitiers, France.

La prédiction des conséquences des explosions est un enjeu important de la maîtrise des risques. Les méthodes analytiques complètes dont on dispose depuis longtemps sont fondées sur des hypothèses restrictives comme par exemple un mélange homogène et au repos [Cates, 1991] et concernent le plus souvent des géométries simples. Elles ont pourtant eu une influence décisive sur l'évolution des mentalités par leur caractère pédagogique et leur solidité conceptuelle. Mais, dans la pratique, les atmosphères explosives responsables des explosions sont souvent turbulentes, en écoulement, parfois fortement hétérogènes et l'explosion se développe dans une géométrie complexe, transitant parfois de volumes en volumes. Les analyses d'accident attestent que, plus l'histoire de l'explosion est compliquée, plus l'explosion est sévère. Il est important de tenir compte de cette réalité.

Les méthodes numériques qui tentent de résoudre point par point et instant par instant les équations différentielles représentatives apparaissent souvent comme une alternative crédible. Il existe pour cela des codes « commerciaux » (FLUENT, REAGAS-TNO, FLACS-Gexcon), de type dits « CFD » (« Computational Fluid Dynamics »), qui n'ont pu être adaptés aux études de risques qu'au prix d'une schématisation extrême de la physique et d'une réduction drastique de la résolution des calculs. Le potentiel prédictif est altéré, comme en témoignent les difficultés rencontrées par le groupe d'experts chargé de l'analyse de l'accident de Buncefield en 2005 (SCI, 2009).

Pour contourner la difficulté, l'INERIS développe depuis plusieurs années des outils de

prédiction intermédiaires (méthodes phénoménologiques) qui reposent sur la robustesse de modèles analytiques mais dans lesquels sont introduites des données supplémentaires pour tenir compte de l'environnement de l'explosion. C'est le cas de la méthode EFFEX pour les explosions confinées [Proust *et al.*, 2007]. On a tenté dans ce programme de clarifier les connaissances dans ce domaine de la modélisation des explosions pour alimenter une discussion sur les outils numériques associés et les faire progresser. Une collaboration a été mise en place avec des partenaires académiques (Universités de Poitiers et de Bourges), institutionnels (CNES, Institut Fraunhofer) et industriels (FIKE, GEXCON).

## Loi de comportement des flammes

Le programme comporte un volet de physique des flammes fondamental dans lequel on a cherché des lois de comportement des flammes. Sur cette base, on a tenté de préciser de façon paramétrique les relations entre la flamme et son environnement pratique (turbulence, géométrie). L'idée nouvelle est que l'incidence des instabilités de combustion peut être prédominante dans de nombreuses situations [Bradley *et al.*, 2001]. Nous avons exploré ces pistes en simulant l'effet de ces instabilités, très sensibles à l'effet de la richesse du mélange, par l'observation de la propagation de la flamme dans un gradient de réactivité du mélange.

On a choisi la configuration d'un tube transparent capable de résister à plus de 100 bar de section constante carrée, composé de plusieurs tronçons susceptibles d'être remplis par des mélanges de richesses différentes [Daubech,

2008]. Le mélange gazeux peut être ensemençé dans l'un des tronçons pour faire un suivi par traçage optique de la richesse. L'instrumentation a été mise au point, dont des capteurs optiques très spéciaux composés d'une diode laser collimatée et d'une cellule photoélectrique. Ces capteurs, utilisés comme opacimètres, permettent de suivre en temps réel la richesse du mélange, et de détecter le passage de la flamme. Un dispositif de tomographie laser éclairant toute la longueur du tube a été développé pour filmer la déformation de la flamme.

On a comparé la propagation des flammes dans des mélanges homogènes et hétérogènes dans lesquels un gradient de concentration contrôlé est préparé. On a eu recours à des mélanges stœchiométriques H<sub>2</sub>/O<sub>2</sub>/N<sub>2</sub>. On a découvert [Daubech, 2008] une forte interaction entre la propagation de la flamme et les ondes acoustiques émises dès la formation de la flamme autour du point d'allumage. Ces ondes pourraient augmenter la surface du front de flamme d'au moins un facteur 10 (figure 2). Cet ordre de grandeur a été trouvé également dans des enceintes de plus grandes tailles, si bien qu'on peut penser que ces interactions correspondent à un mode de propagation habituel pour toutes les flammes en milieu confiné. Le facteur d'amplification de la surface de la flamme dépend du nombre de modes acoustiques excités. On a découvert qu'il est possible de prédire cette amplification à l'aide d'un modèle de stabilité de Taylor (comportement d'une interface réactive soumise à une accélération) généralisé :

$$U_{LD} = \left( 1 + 4 \cdot \alpha \cdot \frac{(\alpha - 1)^2}{(\alpha^2 + \alpha^2 + 3 \cdot \alpha - 1)} \right) \cdot S_{lad}$$

$$U_{RT} = 0.51 \cdot \sqrt{\frac{\alpha - 1}{\alpha} \cdot \eta \cdot r}$$

$$U_{comp} = \sqrt{U_{RT}^2 + U_{LD}^2}$$

où  $\alpha$  est le taux d'expansion des produits de combustion,  $S_{lad}$  la vitesse laminaire de flamme,  $\eta$  l'accélération de l'écoulement et  $r$  le rayon de courbure caractéristique de la flamme.  $U_{comp}$  est la vitesse de combustion résultant de la contribution des instabilités

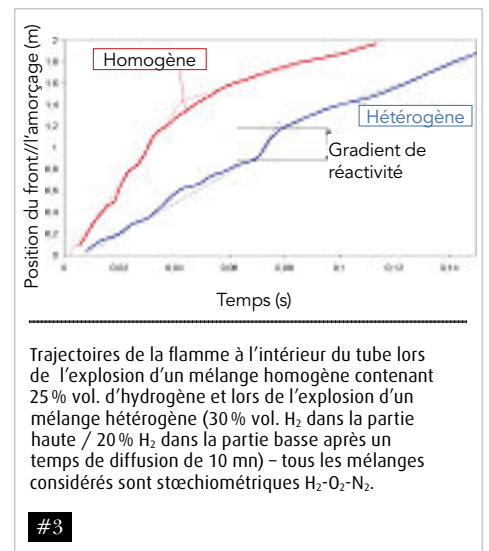
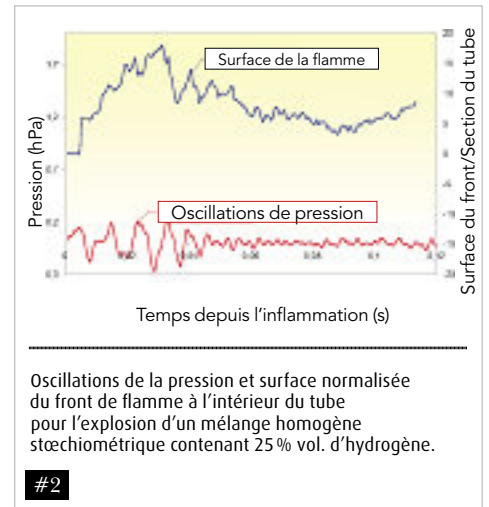
« hydrodynamiques » ( $U_{LD}$  induites par le gradient de densité à travers le front) et des instabilités de « Taylor » ( $U_{RT}$  induites par l'accélération).

Dans les mélanges hétérogènes, on observe systématiquement (figure 3) un accroissement de la vitesse de la flamme au passage dans le gradient de concentration. Cette augmentation peut être prédite avec précision au moyen du modèle de Taylor généralisé. On note que cette amplification est du même ordre de grandeur que la vitesse moyenne de la flamme en dehors du gradient.

Il en résulte que la prise en compte des instabilités de combustion est déterminante pour la prédiction des effets d'une explosion et qu'ils peuvent résulter à part égales de l'interaction avec les perturbations de l'écoulement (ondes acoustiques à coup sûr et turbulence sans doute) et des variations de réactivité du mélange. Le modèle de Taylor généralisé semble bien représenter ces effets. On a prolongé cette étude par l'examen spécifique des interactions flamme-obstacle (non présent) et flamme turbulence (voir article suivant sur la recherche partenariale avec Fike).

### Performances des outils de prédiction

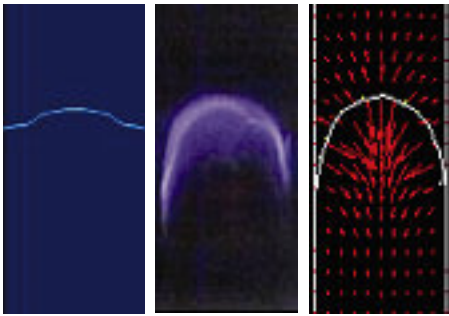
On s'est évidemment intéressé aux codes « commerciaux » de type CFD utilisés en matière de prédiction des effets de l'explosion : FLACS, REAGAS et FLUENT. Sur le fond, ces codes sont destinés au calcul des écoulements. Ils ont été adaptés pour faire du calcul d'explosion en ajoutant un terme de production de chaleur [Proust *et al.*, 2008] calculé dans un sous-programme à partir de corrélations expérimentales. Pour que cela fonctionne, ce terme de production doit être réparti sur plusieurs cellules du maillage ce qui est fort éloigné de la physique réelle. L'une des conséquences est que la flamme n'est pas d'épaisseur faible si bien que les effets d'instabilité peuvent être nettement sous-estimés (figure 4). Il en résulte une forte sous-estimation de l'accélération de la flamme lorsque l'écoulement n'est pas turbulent. Ce point avait été noté par Janovsky et a été confirmé dans le cadre de ce projet [Henetton, 2007]. En revanche, la capacité que ces codes possèdent pour prédire les



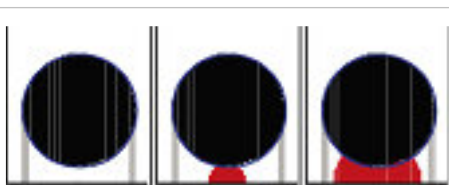
### RÉFÉRENCES

Proust C., Leprette E., Daubech S., Sochet I., 2007. *The usefulness of phenomenological tools to simulate the consequences of dust explosions*, 41<sup>st</sup> Annual Loss Prevention Symposium, April 23-25, 2007, Houston, USA.

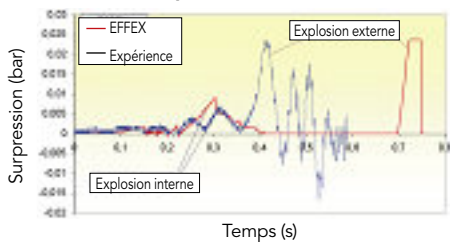
Proust C., Daubech J., Leprette E., 2008. *Differentiated routes for the simulation of the consequences of explosions*, accepted for publication in J. Loss Prev.



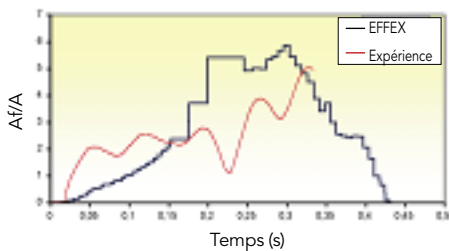
Simulation CFD (van Wingerden, 1994), observation (Proust *et al.*, 2008) et simulation MERLIN (Daubech, 2008) d'une flamme (6.3 % méthane in air) se propageant dans un tube vertical ouvert du côté de l'inflammation (bas) et fermé à l'autre extrémité. #4



Surpression interne



Surface de la flamme / section droite



EXPRES : contournement par une flamme d'un obstacle sphérique dans un cylindre ouvert au sommet - simulation et expérience (mélange méthane air stœchiométrique). #5

caractéristiques d'un écoulement peut être mise à profit pour interpréter des résultats expérimentaux lorsque cette information n'est pas directement accessible.

Malheureusement, il est peu probable que ce type de code puisse en l'état être capable de prédire les instabilités de combustion. On a examiné comment ces codes pourraient évoluer pour y parvenir. On a mis à l'étude une méthode originale [Daubech, 2008] qui consiste à considérer la flamme comme une interface semi-perméable dotée d'une vitesse propre séparant deux milieux de densités différentes. Une méthode de suivi de front est appliquée à l'interface avec des relations de saut spécifiques aux flammes (code MERLIN). Des résultats certes prometteurs ont été obtenus (figure 4) mais les temps de calculs peuvent être longs et de nombreux détails doivent être fournis pour faire une prédiction significative. C'est pourquoi ce type d'outil n'est sans doute envisageable que pour la recherche.

Est-il dès lors possible d'implémenter les instabilités de combustion dans un outil phénoménologique comme EFFEX ? Une modification a été initiée afin de permettre une prise en compte de la modification de la flamme par son environnement en suivant l'esprit de MERLIN. On suppose que la trajectoire de la flamme est globalement isotrope (c'est une sphère) et on admet une variation du taux de combustion en chaque point de la surface en fonction

des conditions locales (turbulence, richesse, obstacle, paroi étanche...). Cela permet de conserver le principe analytique de la formulation d'origine, y compris pour l'écoulement. Un exemple est présenté sur la figure 5, qui décrit raisonnablement le contournement d'un gros obstacle sphérique à l'intérieur d'un cylindre (comparaison avec l'expérience). Cette nouvelle version s'appelle désormais EXPRES.

## Conclusion

Ce projet a été consacré à la représentation physique de la propagation des flammes et à la simulation des effets de l'explosion. L'analyse des mécanismes d'accélération des flammes a fourni, outre des connaissances fondamentales nouvelles, un moyen d'investigation des forces et faiblesses des méthodes de simulation actuellement proposées. La force des méthodes numériques CFD est dans la finesse de la représentation de l'écoulement qui offre un moyen original d'analyse du comportement des flammes. Mais il n'est pas du tout évident que la modélisation de l'explosion soit fiable sauf si la propagation de la flamme est entièrement régie par la turbulence. Il n'existe pas de solution simple à cette difficulté même si une piste a été expérimentée. Il ressort que les méthodes phénoménologiques sont une voie crédible et un nouvel outil a été développé (EXPRES).

## ABSTRACT

This project was led as a relatively wide forum devoted to the physical representation of the flames propagation and to simulation means of explosion effects. In addition to new fundamental knowledge, the analysis of flame acceleration mechanisms provided a mean of investigation of strengths and weaknesses of the simulation methods proposed at present. We showed that instabilities of the combustion are more a reaction of flames to their environment than to initial turbulence of the atmosphere except of course for dust flames (it cannot have a cloud without a significant preliminary level of turbulence). In the two cases, some adapted formulations were proposed and validated: Common Taylor model in the first case and Gülder model in the second one). Regarding simulation tools, the strength of CFD codes is clearly in the acuteness of the flow representation which provides a new mean of flames behavior analysis. However it is not at all obvious that the explosion modeling with CFD be reliable except possibly if the flame propagation is totally driven by the turbulence. There is still no solution to this difficulty even if an attempt was tried with the development by INERIS of a new code called MERLIN. It also appears that phenomenological models may be a credible alternative for the modeling of flame propagation. A large effort was devoted to this topic along the project and a new tool was developed (EXPRES).