

UNIVERSITÉ DU QUÉBEC

MÉMOIRE PRÉSENTÉ À
L'UNIVERSITÉ DU QUÉBEC À TROIS-RIVIÈRES

COMME EXIGENCE PARTIELLE
DE LA MAÎTRISE EN PHYSIQUE

PAR
BENJAMIN ANGERS

SIMULATIONS DE FUITES D'HYDROGÈNE EN PROVENANCE D'UN
RÉSERVOIR DE STOCKAGE À HAUTE PRESSION : DISPERSION ET
CONSÉQUENCES DE L'ALLUMAGE

AOÛT 2006

Université du Québec à Trois-Rivières

Service de la bibliothèque

Avertissement

L'auteur de ce mémoire ou de cette thèse a autorisé l'Université du Québec à Trois-Rivières à diffuser, à des fins non lucratives, une copie de son mémoire ou de sa thèse.

Cette diffusion n'entraîne pas une renonciation de la part de l'auteur à ses droits de propriété intellectuelle, incluant le droit d'auteur, sur ce mémoire ou cette thèse. Notamment, la reproduction ou la publication de la totalité ou d'une partie importante de ce mémoire ou de cette thèse requiert son autorisation.

Résumé

La recherche de nouvelles sources d'énergie pouvant éventuellement remplacer les hydrocarbures est l'une des préoccupations principales des sociétés modernes en ce début de 21e siècle. L'une des alternatives sérieusement considérées est l'utilisation de l'hydrogène. Ce gaz pourrait éventuellement jouer un rôle important dans l'atteinte de cet objectif. L'élaboration de procédures, normes et standards de sécurité est l'une des étapes nécessaires au développement de l'hydrogène comme vecteur énergétique acceptable aux yeux de la société. Ce mémoire tente d'améliorer notre compréhension des phénomènes liés à la sécurité, soit la dispersion et la combustion de nuages d'hydrogène résultant de la fuite de réservoirs à haute pression.

L'objectif de ce travail est spécifiquement d'effectuer une étude dynamique des jets d'hydrogène provenant d'un réservoir de stockage à haute pression et d'estimer les risques que posent les surpressions qui résultent de l'allumage d'une fuite supersonique, à l'aide de simulations numériques. À cet effet, différentes fuites à vitesse variables sont étudiées : des jets subsoniques, des jets soniques et finalement des jets supersoniques. La méthodologie de travail est validée à l'aide de résultats présentés par *Seifert, H.* et al. [1]. L'étude de chaque fuite passe premièrement par une simulation de dispersion suivie par l'allumage et la simulation de la déflagration résultante. Une fuite horizontale provenant d'un réservoir de 700 bars à travers une ouverture de 6 mm de diamètre est étudiée en détail. Différents phénomènes sont observés. Par exemple, l'influence du sol sur la forme d'un nuage résultant d'un jet horizontal comparativement à un nuage provenant d'un jet vertical est étudiée. L'influence de la vitesse d'un nuage de gaz sur la force de la déflagration est aussi observée. Finalement, les résultats obtenus sont comparés à ceux de *Xu, B.P.* et al. [4] et *Takeno, K.* et al. [3].

Remerciements

Je voudrais premièrement remercier les professeurs Tapan K.Bose et Richard Chahine directeurs de l’Institut de Recherche sur l’Hydrogène pour leur soutien financier et matériel tout au long de mes études universitaires. De même, je remercie Air Liquide pour nous avoir proposé ce projet. Sans leur soutien financier et leur expertise, ce travail n’aurait pu être possible.

Je remercie les professeurs du département de physique et d’informatique pour leur enseignement impeccable, particulièrement mon directeur de recherche, le professeur Pierre Bénard qui m’a donné plusieurs occasions inespérées. Son soutien moral et financier, son enthousiasme et son intérêt constant pour nos travaux m’ont permis de persévirer tout au long de mes études. Je veux tout spécialement souligner le soutien que le Dr. Ahmed Hourri, chercheur à l’IRH, m’a apporté tout au long de mes études. Sans ses précieux conseils, je ne serais pas au point où j’en suis aujourd’hui.

Je remercie aussi les étudiants qui m’ont apporté de l’aide directe ou indirecte tout au long de ce travail. Pour n’en nommer que quelques-uns : David Nolet, Philipe Lachance, Ambrish Raghoonundun, Michaël Durocher, Étienne Dauphinais-Rivard, Jérôme Demers.

Je me dois aussi de remercier mes parents pour leur soutien tout au long de mes études. Je leur dois tout et sans eux rien de tout cela n’aurait été possible. Finalement, je remercie mon Dieu pour m’avoir donné l’intelligence de faire ce que j’ai fait. Merci pour ton salut si merveilleux qui donne un sens à ma vie.

Table des matières

Résumé	i
Remerciements	ii
Table des matières	iii
Liste des tableaux	v
Liste des figures	vii
Liste des symboles et abréviations	xii
1. Introduction	1
2. Jets d'hydrogène et conséquences de leur allumage	2
3. Théorie : dispersion et conséquences de l'allumage	12
3.1 Fuite de gaz en provenance d'un réservoir	12
3.1.1 Trois régimes : subsonique, sonique, supersonique	13
3.1.2 Modélisation de la fuite	16
3.1.3 Courbes du débit, de la pression et de la température	18
3.2 Dispersion du gaz	21
3.2.1 Modèle de Birch	21
3.3 Explosion du gaz dispersé	24
3.3.1 Mécanismes physiques et types d'explosions	24
3.3.2 Ondes de choc	28
3.3.3 Explosion de jets d'hydrogène	30
3.3.4 Modélisation des explosions	31
4. Méthodologie	33
4.1 Outils informatiques utilisés	33
4.1.1 Fluent	33
4.1.2 AutoReaGas (ARG)	37
4.1.3 Calibration des outils informatiques	42
4.2 Cas considérés	45
4.3 Validation de la méthodologie sur les jets verticaux	47
4.3.1 Dispersion	47
4.3.2 Explosion	49
5. Résultats et discussion	55
5.1 Subsonique	56
5.1.1 Dispersion	56
5.1.2 Explosion	59
5.2 Sonique	67
5.2.1 Dispersion	67
5.2.2 Explosion	68
5.3 Supersonique	71
5.3.1 Dispersion	71
5.3.2 Explosion	89
6. Conclusion	97
7. Bibliographie	99

Annexe 1 – Code	101
A1.1 Importation des données de Fluent à AutoReaGas	101
A1.2 Optimisation de l'importation des données de Fluent à AutoReaGas	108
A1.3 Fonction définie par l'usager pour la pression, température et débit dans Fluent	111
Annexe 2 – Capture d'écran	114
A2.1 Fluent	114

Liste des tableaux

Tableau 3.1 Dommages produits par une onde de choc en fonction de son intensité. <i>Lees (V.J. Clancey, 1772b)</i> [13]	30
Tableau 4.1 Comparaison entre les données simulées et expérimentales pour un jet horizontal de 20 cm à 45 secondes. (<i>Hourri, A. et al.</i> [18])	35
Tableau 4.2 Étendue du nuage inflammable simulé pour un jet vertical en fonction de la vitesse de la fuite.	48
Tableau 4.3 Surpressions simulées en fonction de la distance et de la vitesse de combustion pour un jet d'hydrogène vertical.	50
Tableau 4.4 Surpressions expérimentales obtenues par <i>Seifert, H. et al.</i> [1] en fonction de la distance pour un jet d'hydrogène vertical.	50
Tableau 4.5 Temps de montée simulés en fonction de la distance et de la vitesse de combustion pour un jet d'hydrogène vertical.	52
Tableau 4.6 Temps de montée expérimentaux obtenus par <i>Seifert, H. et al.</i> [1] en fonction de la distance pour un jet d'hydrogène vertical.	52
Tableau 4.7 Volume d'hydrogène en fonction de la vitesse de fuite et du programme de simulation.	53
Tableau 4.8 Surpressions en fonction de la dimension des cellules cubiques centrales pour un jet de 250 m/s utilisant une vitesse de combustion pour l'hydrogène de 1.35 m/s.	54
Tableau 5.1 Étendue du nuage inflammable simulé pour un jet horizontal subsonique en fonction de la vitesse de la fuite.	57
Tableau 5.2 Étendue du nuage inflammable simulé pour un jet horizontal subsonique en fonction de la vitesse de la fuite (mur à 1 m en avant de l'ouverture).	58
Tableau 5.3 Amplitude maximale de la surpression incidente en fonction de la distance pour un jet d'hydrogène horizontal subsonique obtenue avec ARG (Allumage 0.5 m en avant de l'ouverture, sans mur, jauge du côté y ⁺).	60
Tableau 5.4 Amplitude maximale de la surpression la plus puissante en fonction de la distance pour un jet d'hydrogène horizontal subsonique obtenue avec ARG (Allumage 0.5 m en avant de l'ouverture, sans mur, jauge du côté y ⁺).	60

Tableau 5.5 Amplitude maximale de la surpression en fonction de la distance pour un jet d'hydrogène horizontal subsonique obtenue avec ARG (fuite de 250 m/s, vitesse de combustion laminaire 3.5 m/s, allumage 0.25 m en avant de l'ouverture). 62

Tableau 5.6 Amplitude maximale de la surpression en fonction de la distance pour un jet d'hydrogène horizontal subsonique obtenue avec ARG (fuite de 250 m/s, vitesse de combustion laminaire 3.5 m/s, allumage 0.25 m en avant de l'ouverture, avec mur à 1 m de l'ouverture). 63

Tableau 5.7 Amplitude maximale de la surpression en fonction de la distance pour un jet d'hydrogène horizontal subsonique obtenue avec ARG (fuite de 250 m/s, vitesse de combustion laminaire 3.5 m/s, allumage 0.25 m en avant de l'ouverture, avec plafond à 4 m). 65

Tableau 5.8 Volume d'hydrogène en fonction de la vitesse de fuite et du programme de simulation pour le maillage horizontal. 66

Tableau 5.9 Étendue du nuage inflammable simulé pour un jet horizontal sonique en fonction de la vitesse de la fuite. 67

Tableau 5.10 Amplitude maximale de la surpression en fonction de la distance pour un jet d'hydrogène horizontal sonique obtenue avec AutoReaGas (fuite de 1209 m/s à 3.55 g/s, vitesse de combustion laminaire 3.5 m/s, allumage 0.25 m en avant de l'ouverture, sans plafond). 69

Tableau 5.11 Étendue du nuage inflammable simulé pour un jet horizontal supersonique en fonction de la concentration d'hydrogène et du temps écoulé depuis le début de la fuite. L'étendue maximale de chaque concentration est en caractère gras. 76

Tableau 5.12 Amplitude maximale de la surpression en fonction de la distance pour un jet d'hydrogène horizontal supersonique à 0.082 sec après le début de la fuite obtenue avec AutoReaGas (vitesse de combustion laminaire 3.5 m/s, allumage 0.5 m en avant de l'ouverture, sans importation des vecteurs de vitesses). 92

Liste des figures

Figure 2.1 Surpressions obtenues expérimentalement par <i>Seifert, H.</i> et al. [1] pour trois jets d'hydrogène de 140, 190 et 250 m/s à travers un orifice de 10mm de diamètre. Δ = valeur moyenne. Les surpressions maximales pour un jet de 250 m/s tournent autour de 100 Pa.	4
Figure 2.2 Temps de montée des surpressions obtenues expérimentalement par <i>Seifert, H.</i> et al. [1] pour des jets d'hydrogène et de gaz naturel.	4
Figure 2.3 Vecteurs de vitesse et contour du nombre de Mach tels que présentés par <i>Xu, B.P.</i> et al. [4].	6
Figure 2.4 Profils des variables physiques simulées en fonction de la position normalisé par le diamètre le long de l'axe axisymétrique tels que présentés par <i>Xu, B.P.</i> et al. [4].	7
Figure 2.5 Étendue du nuage d'hydrogène à différents temps après le début de la fuite. <i>Takeno, K.</i> et al. [3]	9
Figure 2.6 Surpression typique à 3.9m du point d'allumage. ($P_0 = 40$ MPa, $d = 10$ mm, Temps d'allumage = 2 sec) <i>Takeno, K.</i> et al. [3]	10
Figure 2.7 Effet du temps d'allumage sur la surpression maximale mesurée. ($P_0 = 40$ MPa, $d = 10$ mm, Position de l'allumage = 4 m) <i>Takeno, K.</i> et al. [3]	10
Figure 2.8 Comparaison d'une courbe de surpression obtenue expérimentalement et numériquement. ($P_0 = 40$ MPa, $d = 10$ mm, Temps d'allumage = 5 sec, Position de la jauge = 6m) <i>Takeno, K.</i> et al. [3]	11
Figure 2.9 Comparaison entre les surpressions obtenues expérimentalement et numériquement. ($P_0 = 40$ MPa, $d = 10$ mm, Temps d'allumage = 5 sec) <i>Takeno, K.</i> et al. [3]	11
Figure 3.1 Réservoir théorique.	14
Figure 3.2 Réservoir haute pression utilisé lors des simulations.	19
Figure 3.3 Débit à l'ouverture en fonction du temps pour une fuite de 700 bars à travers un orifice de 6 mm de diamètre.	19
Figure 3.4 Pression à l'ouverture en fonction du temps pour une fuite de 700 bars à travers un orifice de 6 mm de diamètre.	20
Figure 3.5 Température à l'ouverture en fonction du temps pour une fuite de 700 bars à travers un orifice de 6 mm de diamètre.	20

Figure 3.6 Propagation du front de flamme dans le nuage. Une zone de réchauffement des gaz est présente en avant de la zone de réaction où la flamme consume le combustible. <i>AutoReaGas Theory Manual [5]</i>	26
Figure 3.7 Profil d'une surpression résultante d'une déflagration	29
Figure 3.8 Profil d'une surpression résultante d'une détonation	29
Figure 4.1 Résultats de simulations 30 secondes après le début de la fuite. Le maillage dans le plan de symétrie est aussi affiché. (<i>Hourri, A. et al. [18]</i>)	36
Figure 4.2 Tuyère utilisée lors des simulations de jets verticaux.	45
Figure 4.3 Réservoir à haute pression utilisé lors des simulations de jets horizontaux.	46
Figure 4.4. Contour de concentration de 4 % (vol), gauche à droite : 140, 190 et 250 m/s.	48
Figure 4.5 Surpressions 0.016 sec après l'allumage d'un nuage inflammable d'hydrogène provenant d'une fuite de 250 m/s à travers un trou de 10 mm de diamètre à l'extrémité d'un tuyau vertical en fonction de la distance.	51
Figure 4.6 Définition du temps de montée.	52
Figure 4.7 Maillage structuré utilisé lors des simulations avec AutoReaGas.	53
Figure 4.8 Maillage structuré, nuage importé et gauges utilisés dans AutoReaGas pour une fuite verticale de 250 m/s.	54
Figure 5.1 Géométrie schématisée du problème étudié, vue de haut, origine au centre de l'ouverture.	55
Figure 5.2 Maillage utilisé dans Fluent (avec mur). La première et la deuxième image montrent un maillage plus raffiné près de l'ouverture. La troisième image illustre le maillage du domaine entier.	57
Figure 5.3 Contours de la concentration d'hydrogène formée par une fuite de 250 m/s passant à travers une ouverture de 6mm de diamètre d'un cylindre en l'absence (dessus) et présence (dessous) d'un mur à 1 m de l'ouverture. De gauche à droite, les contours de concentration sont : 2 % (vol), 4 % (vol) et 15 % (vol).	58
Figure 5.4 Courbe de surpression à 5 m du point d'allumage d'un jet horizontal de 250 m/s. On voit clairement le second maximum de plus forte amplitude que le maximum incident (Allumage à 0.5m de l'ouverture, sans mur, jauge du côté y+).	61

Figure 5.5 Surpressions générées par l'allumage d'un jet d'hydrogène de 250 m/s. a) Image à gauche : plan perpendiculaire au jet (parallèle aux jauge). b) Image à droite : plan parallèle au jet (perpendiculaire aux jauge). 62

Figure 5.6 Surpressions générées par l'allumage d'un jet d'hydrogène de 250 m/s avec un mur à 1 m en avant de l'ouverture. Plan parallèle au jet et sol illustré. On remarque sur les deux images l'évolution de l'onde de choc réfléchie par le mur. 64

Figure 5.7 Surpression générée par l'allumage d'un jet d'hydrogène de 250 m/s en présence d'un plafond (en vert). Plan parallèle au jet et au sol illustrés. 65

Figure 5.8 Contours de la concentration d'hydrogène formés par une fuite de 1209 m/s, sonique, passant à travers une ouverture de 6mm de diamètre d'un cylindre en l'absence (dessus) et présence (dessous) d'un plafond à 3 m du sol. De gauche à droite, la concentration des contours est 4 % (vol), 2 % (vol) et 0.5 % (vol). 68

Figure 5.9 Courbe de surpression à 2 m en avant (x+) du point d'allumage d'un jet horizontal sonique de 1209 m/s (allumage à 0.25 m de l'ouverture, sans plafond). 69

Figure 5.10 Surpression générée par l'allumage d'un jet d'hydrogène de 1209 m/s. La prédominance de l'onde de choc dans la direction du jet (vers la droite) est clairement visible. 70

Figure 5.11 Maillage formé de 1 031 390 mailles, utilisé initialement pendant 0.3 sec de simulation. La première image illustre le maillage du domaine au complet. La deuxième, la troisième et la quatrième image montrent le maillage plus raffiné près de l'ouverture. La longueur totale du domaine est de 25 m. 72

Figure 5.12 Maillage raffiné final formé de 1 801 905 mailles, utilisé après 5 secondes de simulation. La première image illustre le maillage du domaine au complet. La deuxième et la troisième image montrent le maillage plus raffiné près de l'ouverture. La longueur totale du domaine est de 82 m. 73

Figure 5.13a Distance du contour de la concentration d'hydrogène à 4% (vol) sur l'axe du jet (x) en fonction du temps écoulé depuis le début de la simulation. 74

Figure 5.13b Vitesse instantanée du contour de la concentration d'hydrogène de 4 % (vol) sur l'axe du jet en fonction du temps écoulé depuis le début de la simulation. La vitesse est mesurée à un intervalle de 0.5 sec à partir de 1 sec de simulation. 75

Figure 5.14 Concentration de H₂ 4.5 secondes après le début de la fuite en fonction de la position sur l'axe central du jet. On remarque la chute de la concentration à 38m qui correspond au mouvement du tourbillon présent à l'extrémité du jet. 77

Figure 5.15 L'inverse de la concentration de H₂ 4.5 secondes après le début de la fuite en fonction de la position sur l'axe central du jet tronqué à 36 m. On remarque un régime linéaire de 10 m à 36 m. 77

Figure 5.16 Perspective utilisée sur les figures suivantes. Les images sont toutes présentées selon le plan XZ, à l'exception de la série d'images à droite de la figure 5.17. 78

Figure 5.17 Contour de la concentration (0-100 % (vol)) issu d'une fuite supersonique provenant d'un réservoir de 700 bars à travers une ouverture de 6 mm de diamètre à différents temps après le début de la fuite. 81

Figure 5.18 Contours de la vitesse absolue sur les figures de gauche et du cône de Mach sur les figures de droite à différent temps après le début de la fuite à la sortie de l'ouverture. 83

Figure 5.19 Contours de la densité à différent temps après le début de la fuite. Les trois images sont graduellement prises à des zooms plus faibles. L'onde de choc se propageant dans l'espace immédiatement après le début de la fuite est illustrée par le contour bleu pâle circulaire. 84

Figure 5.20 Contours de la densité lorsque la zone supersonique est complètement formée 0.5 sec après le début de la fuite. La deuxième image met en évidence les augmentations de densité associées aux ondes de choc présentes à l'intérieur de la zone supersonique. 85

Figure 5.21a Contours de l'intensité du rotationnel dans le fluide 0.5 sec après le début de la fuite. Les zones de création de vortex sont illustrées en bleu pâle. 85

Figure 5.21b Vecteur d'intensité de la vitesse dans le fluide 0.5 sec après le début de la fuite. Zoom effectué sur la zone centrale. 86

Figure 5.22 Température statique en fonction de la position directement à l'ouverture 0.5 sec après le début de la fuite. 87

Figure 5.23 Vitesse du gaz en fonction de la position directement à l'ouverture 0.5 sec après le début de la fuite. 87

Figure 5.24 Pression statique en fonction de la position directement à l'ouverture 0.5 sec après le début de la fuite. Tronqué à 1.60 bars. Le maximum se trouve à environ 275 bars. 88

Figure 5.25 Fraction massique d'hydrogène en fonction de la position directement à l'ouverture 0.5 sec après le début de la fuite. La valeur moyenne tourne autour de 0.5.8

88

Figure 5.26 Concentration d'hydrogène 0.082 sec après le début de la fuite en fonction de la position sur l'axe centrale x dans la direction du jet. Le nuage s'étend jusqu'à 4.5 m. 89

Figure 5.27 Concentration d'hydrogène selon deux plans de perspective, 0.082 sec après le début de la fuite. 90

Figure 5.28 Nuage inflammable d'hydrogène (contour à 4 % (vol)) à 0.082 sec après le début de la fuite pour (a) le calcul original effectué dans Fluent (à gauche) et (b) après l'importation et la moyenne sur le maillage d'ARG (à droite). On remarque l'exagération de l'étendue du nuage près de l'ouverture dans ARG. 91

Figure 5.29 Surpression prédictive en fonction de la distance 0.024 sec après l'allumage, obtenue par ARG pour un jet supersonique, 0.082 sec après le début de la fuite. On remarque la puissance marquée de l'onde de choc dans la direction du jet. (Allumage à 0.5 m de l'ouverture, sans importation des vecteurs de vitesse) 93

Figure 5.30 Surpressions maximales en fonction de la distance de l'ouverture obtenue par ARG pour un jet supersonique 0.082 sec après le début de la fuite le long de l'axe du jet. 94

Figure 5.31 Surpression prédictive en fonction de la distance à 0.025 sec et 0.04 sec après l'allumage, obtenue par ARG pour un jet supersonique à 0.082 secondes après le début de la fuite. 95

Figure 5.32 Surpression maximale en fonction de la distance à 2.5 m de l'ouverture sur l'axe du jet obtenue par ARG pour un jet supersonique à 0.082 sec après le début de la fuite. (Allumage à 4 m de l'ouverture, sans tenir compte de la distribution de la vitesse dans le nuage) 96

Liste des symboles et abréviations

Suffixe 0	À l'intérieur du réservoir
Suffixe e	À l'ouverture/sortie du volume de contrôle
Suffixe a	Aux conditions ambiantes
atm	atmosphère
m_{mol}	Masse molaire
c_e	Concentration à la sortie
c_{li}	Concentration minimal d'inflammabilité
u_{eq}	Vitesse initiale subsonique
r	Distance de l'ouverture
T	Température
p	Pression
V	Volume
ρ	Densité
R	Constante des gaz parfait
T_e	Température à l'ouverture
T_0	Température à l'intérieur du réservoir
p_0	Pression à l'intérieur du réservoir
p_e	Pression du jet à l'ouverture
ρ_0	Densité à l'intérieur du réservoir
γ	Rapport des chaleurs spécifiques (1.4 pour l'hydrogène)
M	Nombre de Mach
v	Vitesse du son
c.v.	Volume de contrôle
m_i	Masse à l'entrée du c.v.
$m_{c.v.}$	Masse dans le c.v.
m_e	Masse à la sortie du c.v.
t	Temps
$Q_{c.v.}$	Quantité de chaleur dans le volume de contrôle
h_i	Enthalpie à l'entrée du c.v.
h_e	Enthalpie à la sortie du c.v.
V_i	Vitesse à l'entrée du c.v.
V_e	Vitesse à la sortie du c.v.
$E_{c.v.}$	Énergie
$W_{c.v.}$	Quantité de travail
ρ_t	Densité à l'état stagnant
Ψ	Volume interne du réservoir
A_e	Aire de l'ouverture
v_e	Vitesse du gaz à l'ouverture
v_{fluide}	Vitesse du fluide
m_e	Débit à l'ouverture
u	Énergie interne
h	Enthalpie
C_{p0}	Chaleur spécifique à pression constante
C_{v0}	Chaleur spécifique à volume constant

η_{fm}	Fraction molaire moyenne
K	Constante d'entraînement (5.4)
d_{eff}	Diamètre effectif
x	Position sur l'axe du jet
x_0	Origine virtuelle du jet
ρ_a	Densité du fluide ambiant
ρ_{gas}	Densité du gaz dispersé évalué à la pression et température ambiante
ρ_e	Densité du jet à l'ouverture
u_e	Vitesse du jet à l'ouverture
u_{eff}	Vitesse effective
d_e	Diamètre de l'ouverture
p_a	Pression ambiante
W_f	Masse de combustible en jeu
W_{TNT}	La masse équivalente en TNT
H_f	La chaleur de combustion du combustible en jeux
H_{TNT}	L'énergie de l'explosion TNT
α_e	Facteur d'équivalence TNT basé sur l'énergie
α_m	Facteur d'équivalence TNT basé sur la masse
W_{eff}	Masse stœchiométrique de l'hydrocarbure en fonction de la masse de gaz en milieux confiné
V_{con}	Volume total de gaz dans la zone confiné
V_{nuage}	Volume total du nuage de gaz
R'	Facteur d'échelle Sachs
R_d	Distance réelle du centre de l'explosion considérée
P_s	Surpression
ΔP_s	Surpression Sachs
t_+	Durée de la phase positive
t_+'	Durée de la phase positive Sachs
E	Énergie
c_a	Vitesse du son aux conditions atmosphérique
ARG	AutoReaGas
Re	Nombre de Reynolds
I	Intensité de la turbulence
L	Échelle de la longueur de turbulence
D	Diamètre à l'ouverture
s	Quantité stœchiométrique
C_t	Constante de modélisation, paramètre de calibration utilisé par AutoReaGas dans les équations de combustion en mode turbulent. (70)
F_s	Facteur de proportionnalité, paramètre de calibration utilisé par AutoReaGas dans les équations de combustion en mode laminaire. (0.15)
$M_{product}$	Masse des produits de combustion
M_{O2}	Masse d'oxygène
m_{fuel}	Masse de carburant
S_t	Vitesse de combustion en mode turbulent
δ	Épaisseur du front de combustion

Min	Fonction de la fraction de masse du carburant, de l'oxygène et des produits de la combustion
D_{fuel}	Coefficient de diffusion en mode turbulent
u'	Intensité de la turbulence
L_t	Longueur caractéristique de turbulence (échelle intégrale)
ν_{is}	Viscosité du mélange inflammable
S_b	Vitesse de combustion
S_l	Vitesse de combustion laminaire
R_f	Rayon de la flamme sphérique
R_c	Taux de combustion
S_t	Vitesse de combustion en mode turbulent
δ	Épaisseur du front de combustion
H_2	Hydrogène
F_{mol}	Fraction molaire

1. Introduction

Les contextes sociaux, économiques et environnementaux en ce début de 21e siècle poussent les chercheurs à trouver de nouvelles sources d'énergie pouvant remplacer le pétrole. L'hydrogène est l'une des options sérieusement considérées en ce moment. La transition d'une économie basée sur le pétrole à une basée sur l'hydrogène passe par plusieurs étapes. L'une de ces étapes est l'élaboration de standards de sécurité permettant une utilisation sécuritaire de ce gaz. Ce mémoire tente de contribuer au développement de standards de sécurité en augmentant notre compréhension des dangers liés à l'allumage de fuite d'hydrogène dans l'air. L'étude s'intéresse particulièrement aux jets d'hydrogène horizontaux à proximité du sol provenant de fuites de réservoirs à très haute pression.

Les conséquences thermiques de l'allumage de jet de gaz inflammable ont fait l'objet de recherches actives au cours des dernières décennies puisqu'elles sont la principale source de danger à laquelle font face les installations utilisant l'hydrogène. De plus, les niveaux d'une émission thermique provenant d'un jet enflammé peuvent servir à délimiter des zones de sécurités séparant les installations d'approvisionnement en hydrogène des installations critiques. En comparaison, il y a peu d'études détaillées sur les surpressions accompagnant l'allumage de jet d'hydrogène, encore moins sur des jets supersoniques. L'objectif principal de ce travail est donc d'étudier en détail à l'aide de simulations numériques les jets d'hydrogène non prémixés en provenance de réservoirs à haute pression et ainsi pouvoir estimer les risques associés aux surpressions générées par l'allumage d'une fuite supersonique. Différentes fuites à vitesse variable sont étudiées dans ce mémoire : des jets subsoniques, des jets soniques et finalement des jets supersoniques. Des jets émanant de réservoirs pressurisés à 700 bar sont étudiés en détail à cause de leurs pertinences à l'égard de leur utilisation dans de futures stations d'approvisionnement.

2. Jets d'hydrogène et conséquences de leur allumage

Même si l'hydrogène est considéré comme un vecteur énergétique prometteur, le nombre d'études portant sur les surpressions résultantes de l'allumage de jets d'hydrogène reste limité. Les publications portant sur l'allumage de jets supersoniques d'hydrogène sont presque inexistantes. Deux études sur des jets subsoniques d'hydrogène ont toutefois été recensées par le *Center for Chemical Process Safety*, réf. [8]. *Seifert, H.* et al. [1] ont étudié expérimentalement les surpressions qui résultent de l'allumage de jets subsoniques d'hydrogène, propane et méthane tout en proposant un modèle décrivant les surpressions en fonction des propriétés du carburant. Ces résultats expérimentaux sont utilisés lors de la validation de la méthodologie liée aux simulations de suppression présentées plus loin dans ce mémoire. *Gundelach, V.G* [2] a aussi étudié les surpressions résultantes de l'allumage de jet de propane et il a observé des surpressions de 50 mbar à 10 m pour une ouverture de 80 mm de diamètre.

L'analyse de la combustion d'un jet de gaz passe premièrement par la compréhension des phénomènes de dispersion précédant l'allumage. L'impact sur les résultats des conditions physiques présentes à l'intérieur d'un nuage lors de son allumage est non négligeable. C'est en partie pour cette raison que l'étude détaillée des mécanismes de dispersion est au centre de ce mémoire. Un article présenté à la conférence internationale sur la sécurité à Pise, Italie en 2005, écrit par *Xu, B.P.* et al. [4] présente des résultats de simulations de dispersion spécifiques aux jets supersoniques. Ces résultats ont contribué à la validation de la méthodologie ainsi qu'à la validation des résultats obtenus lors de la simulation d'une fuite supersonique. À cette même conférence, un article de *Takeno, K.* et al. [3] présente une étude complète, expérimentale et numérique, sur l'allumage de jets supersoniques d'hydrogène. Leur méthodologie lors de l'analyse par simulation est conforme à celle qui a été adoptée dans ce mémoire. De plus, certaines de leurs observations sur le comportement des explosions ont pu être corroborées.

Dans un premier article intitulé *Safer design of inflammable gas vents*, *Seifert, H.* et al. [1] se sont posés les trois questions suivantes. Quelles sont les conditions nécessaires

pour que l'allumage soit possible? Quelles sont les conditions nécessaires pour qu'une flamme stable, aussi appelée torchère, se forme? Et, quelles sont les surpressions qui résultent de l'allumage? Les deux premières questions font principalement référence à la stabilité du front de flamme ainsi qu'à l'efficacité de la source de l'allumage. La troisième question dépend essentiellement du profil de la concentration dans le nuage et de la vitesse du jet. Après avoir effectué une recherche dans la littérature, *Seifert, H.* et al. [1] ont conclu que plus la vitesse du jet est grande, plus la position du front de flamme sera éloignée de la source, jusqu'au point où aucune flamme stable ne pourra être maintenue. La flamme devrait littéralement être soufflée par le jet. La force de la source d'allumage ainsi que la nature du gaz impliqué sont des facteurs décisifs influençant ce phénomène. Lors de leurs recherches bibliographiques, aucune information sur les surpressions n'a pu être recensée pour l'hydrogène. Selon *Seifert, H.* et al. [1] ce manque d'études s'explique par les faibles risques liés à l'allumage de jets subsoniques. En effet, les surpressions générées par l'allumage de tels jets ne sont pas très élevées.

Donc pour approfondir toutes ces questions des jets d'hydrogène et de gaz naturel ont été étudiés expérimentalement. Deux ouvertures de 10 mm et 20 mm de diamètre ont été considérées pour des vitesses de jets de 140 m/s, 190 m/s et 250 m/s. L'ouverture des fuites était à 1 m du sol et orientée vers le haut. La figure 2.1 présente les résultats expérimentaux obtenus par *Seifert, H.* et al. [1] pour trois jets d'hydrogène à travers une ouverture de 10 mm de diamètre. Ces résultats ont été utilisés lors de la validation de la méthodologie présentée dans la section 4.3 de ce mémoire. La figure 2.2 présente les temps de montée des surpressions incidentes pour l'hydrogène et le gaz naturel tels qu'obtenus expérimentalement par *Seifert, H.* et al. [1].

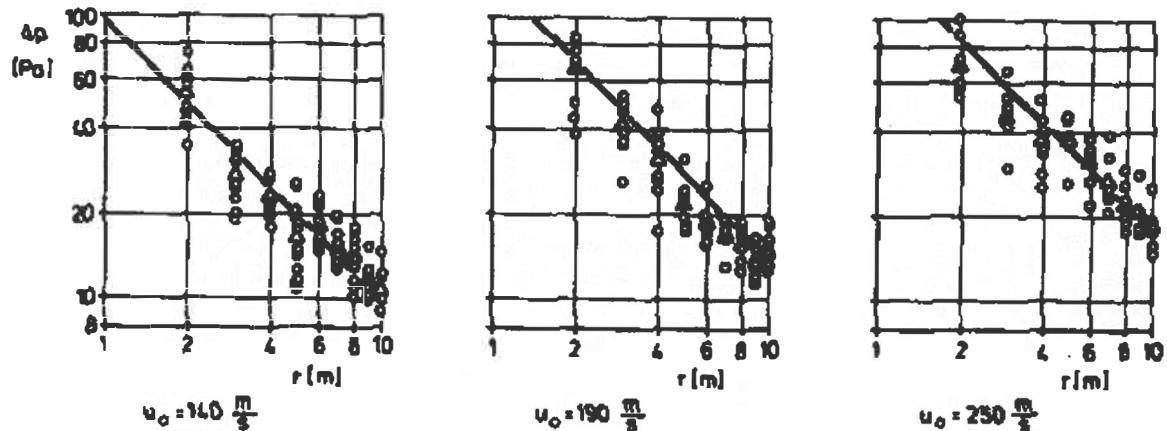


Figure 2.1 Surpressions obtenues expérimentalement par Seifert, H. et al. [1] pour trois jets d'hydrogène de 140, 190 et 250 m/s à travers un orifice de 10mm de diamètre. Les surpressions maximales pour un jet de 250 m/s tournent autour de 100 Pa. Δ = valeur moyenne.

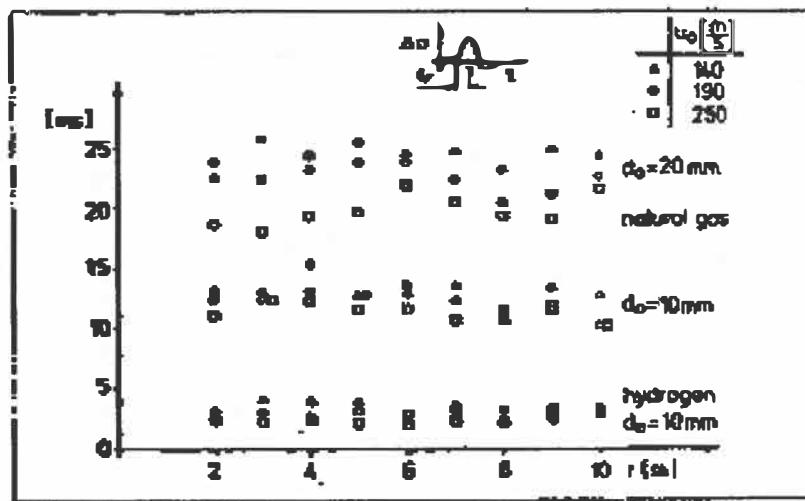


Figure 2.2 Temps de montée des surpressions obtenues expérimentalement par Seifert, H. et al. [1] pour des jets d'hydrogène et de gaz naturel.

À partir des résultats expérimentaux, une fonction (équation 2.1) liant la surpression mesurée à une distance r de l'ouverture au diamètre de l'ouverture ainsi qu'à la vitesse de la fuite, a été interpolée.

$$\Delta p = 350 s_l^2 \left(\frac{c_e}{c_{li}} \right)^{\frac{2}{3}} u_{eq} \left(\frac{\rho_e}{\rho_a} \right)^{1.86} d_e^{1.6} \frac{1}{r} \quad \text{Eq 2.1}$$

où

p = pression

s_l = vitesse de flamme laminaire

c_e = concentration à la sortie

c_{li} = concentration minimale d'inflammabilité

u_{eq} = vitesse initiale subsonique

ρ_e = densité à la sortie

ρ_a = densité atmosphérique

d_e = diamètre de la fuite

r = distance de l'embouchure

Seifert, H. et al. [1] prédisent donc qu'une ouverture de 100 mm de diamètre soutenant une fuite de 100 m/s produirait une surpression maximale de 3 mbar mesurée à 10 m de l'orifice.

Dans un article intitulé *Numerical study of highly under-expanded hydrogen jet*, *Xu, B.P.* et al. [4] ont analysé en détail la structure de la zone supersonique qui se situe directement à la sortie d'une fuite supersonique à l'aide du logiciel de simulation CFX. Ils ont aussi étudié la dispersion du nuage résultant de la fuite à l'aide d'une version modifiée de KIVA (logiciel de simulation de la dynamique des fluides) supportant le modèle de turbulence *larges eddy simulations* (LES). Dans le passé, les auteurs d'études similaires sur la dispersion ont rarement pris la peine de simuler cette zone supersonique en détail. Ils ont plutôt tendance à utiliser un pseudo orifice placé au-delà de la zone supersonique avec une vitesse, une pression et un débit équivalant à ce que l'on trouverait à cet endroit si une simulation complète avait été faite. Cette extrapolation mathématique entraîne des erreurs plus ou moins importantes dans la géométrie du nuage simulé. Ces erreurs pourraient influencer les résultats lors d'un allumage. Donc au lieu d'utiliser

directement un pseudo orifice, Xu, B.P. et al. [4] ont simulé numériquement la zone supersonique puis ils ont utilisé ces résultats comme données initiales pour les simulations de dispersion.

Les conditions suivantes ont été considérées lors des simulations. La pression initiale de l'hydrogène à l'intérieur du conduit était de 20 MPa et la température de 300K. Le diamètre de l'orifice (D sur la figure ci-dessous) était de 0.01 m. La fuite était supersonique, la pression à la sortie était de 10.6 MPa, la température de 251 K et la vitesse de 1020 m/s. Une simulation axisymétrique fut utilisée pour simuler la zone supersonique à l'ouverture. Le modèle de turbulence Reynolds-Averaged Navier-Stokes (RANS) fut utilisé sur 200 000 mailles non structurées. Le modèle d'énergie totale ainsi que le modèle de turbulence k-oméga SST furent aussi utilisés. La figure 2.3 montre supersonique à l'ouverture tel que simulé par Xu, B.P. et al. [4].

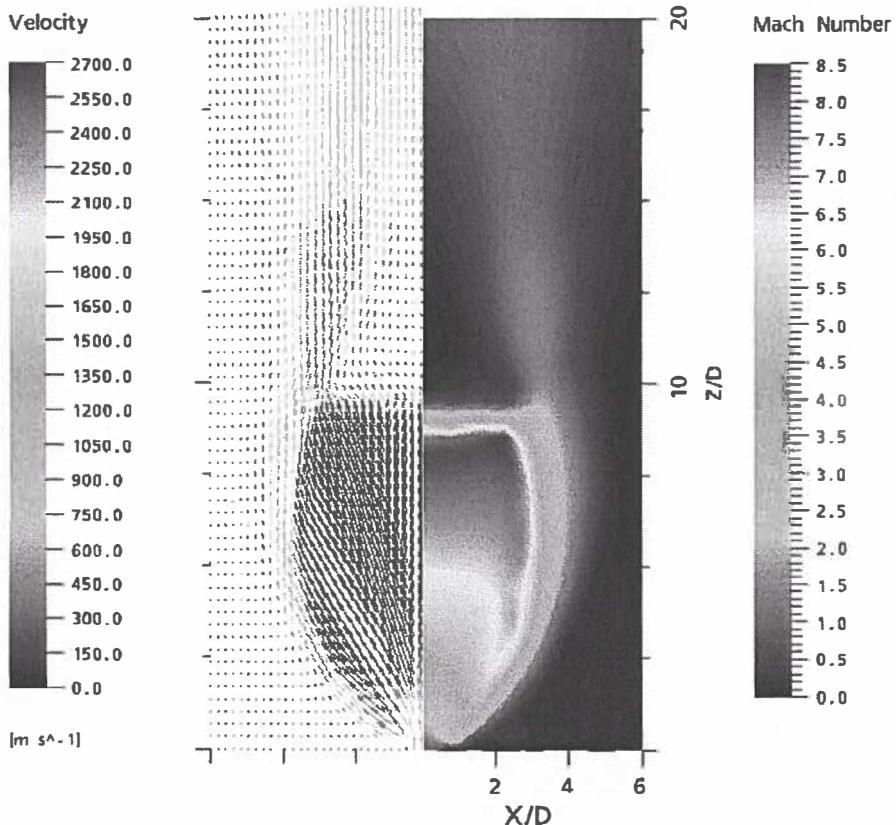


Figure 2.3 Vecteurs de vitesse et contour du nombre de Mach tels que présentés par Xu, B.P. et al. [4].

La figure 2.4 montre le comportement des variables physiques sur l'axe axisymétrique. Ces données sont utilisées dans la section 5.3.1 lors de la validation des simulations de dispersion de jets supersoniques.

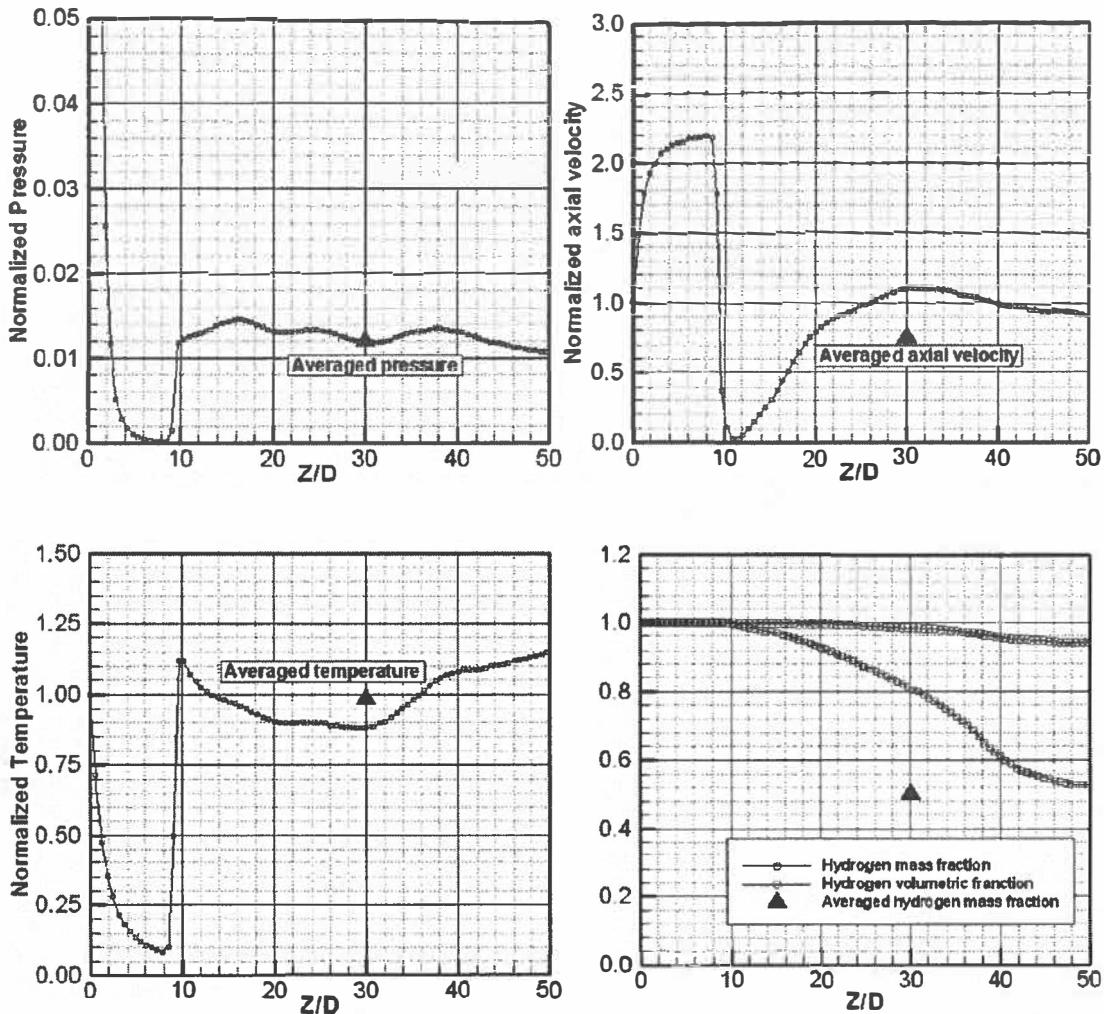


Figure 2.4 Profils des variables physiques simulées en fonction de la position normalisée par le diamètre le long de l'axe axisymétrique tels que présentés par Xu, B.P. et al. [4]. La valeur moyenne de la fraction massique d'hydrogène présentée sur le quatrième graphique nous signale qu'une erreur s'y est glissée. En effet, la courbe de la fraction massique de l'hydrogène représente plutôt celle de la fraction massique de l'air. Comparant avec les résultats obtenus dans la section 5.3.1, la valeur moyenne de la fraction massique coïncide tout de même avec le résultat présenté dans ce mémoire.

Un troisième article intitulé *Phenomena of Dispersion and explosion of high pressurized hydrogen*, *Takeno, K.* et al. [3] présente une étude expérimentale et numérique complète d'une fuite de réservoir d'hydrogène à haute pression suivie par l'allumage du nuage en atmosphère.

Takeno, K. et al. [3] ont considéré une fuite d'un réservoir d'hydrogène pressurisé à 65 MPa à travers une ouverture de 10 mm de diamètre. La pression initiale à l'ouverture était de 40 MPa. Pour simuler un accident dans une situation réelle, cinq réservoirs de 50 L furent remplis d'hydrogène et connectés ensemble par un tube de 25 mm de diamètre. L'allumage fut effectué à l'aide d'une étincelle électrique amorcée à 0.5-7.5 m de l'origine de la fuite 0.5-20 secondes après le début de celle-ci. Lors de l'expérience, les jauge étaient placées à un angle de 20° de l'axe central.

La figure 2.5 montre l'étendue du nuage expérimental selon l'axe de la fuite en fonction du temps écoulé depuis le début de l'expérience. À une concentration de 2 % (vol), le nuage s'étendait maximalement à 25 m, 1 seconde après le début de la fuite. La figure 2.6 montre une surpression typique obtenue lors de l'explosion. La figure 2.7 montre l'effet du temps d'allumage sur la surpression maximale mesurée.

À partir de ces résultats, *Takeno, K.* et al. [3] sont parvenus à certaines conclusions non observées auparavant lors d'expériences utilisant des nuages statiques en chambre fermée. Premièrement, la montée de la surpression fut extrêmement rapide pour une déflagration. De plus, la diminution de pression à 10~15 m du point d'allumage fut minime, indiquant des surpressions très élevées près du point d'allumage. Suivant le maximum de la surpression initiale, une onde de plus faible amplitude apparaissait. Celle-ci était causée par la combustion résiduelle de l'hydrogène sortant du réservoir.

Deuxièmement, sous les conditions présentées à la figure 2.6, la vitesse de propagation de la flamme se situait aux alentours de 325 m/s. *Takeno, K.* et al. [3] ont avancé l'hypothèse qu'une vitesse de flamme aussi élevée à 4 m du point d'allumage devait être alimentée par la turbulence générée par la fuite à haute pression.

Troisièmement, selon les résultats expérimentaux présentés sur la figure 2.5 et les résultats de dispersions des simulations numériques (dont aucun résultat n'est présenté dans l'article), le contour de concentration de 10 % (vol) atteint son maximum 3 secondes après le début de la fuite et le contour de concentration de 4 % (vol) est maximal 7 secondes après le début de la fuite. Par contre, selon les données de la figure 2.7, le plus tôt l'allumage se faisait, plus les surpressions mesurées étaient élevées. Selon *Takeno, K.* et al. [3], ceci montre que l'intensité de la turbulence, qui est directement liée à la vitesse de la fuite, a une plus grande influence sur le risque que présente l'explosion du nuage que la concentration du gaz.

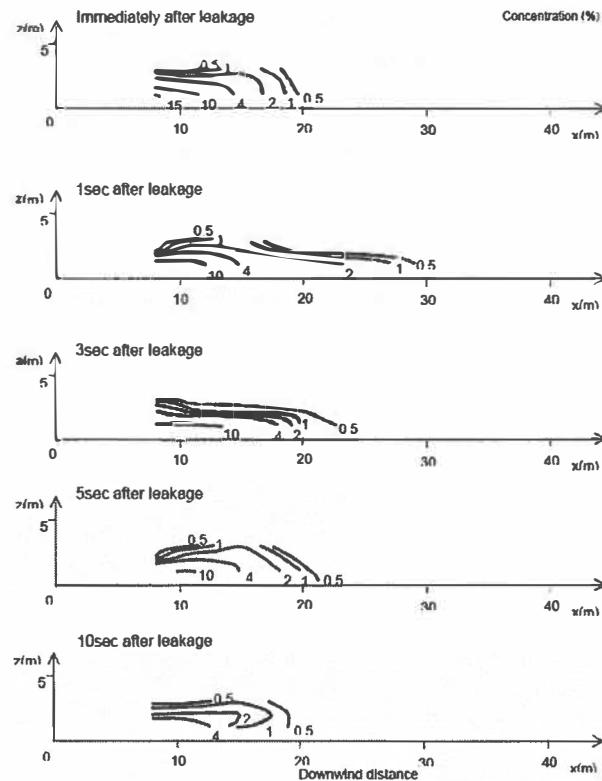


Figure 2.5 Étendue du nuage d'hydrogène à différents temps après le début de la fuite.
Takeno, K. et al. [3]

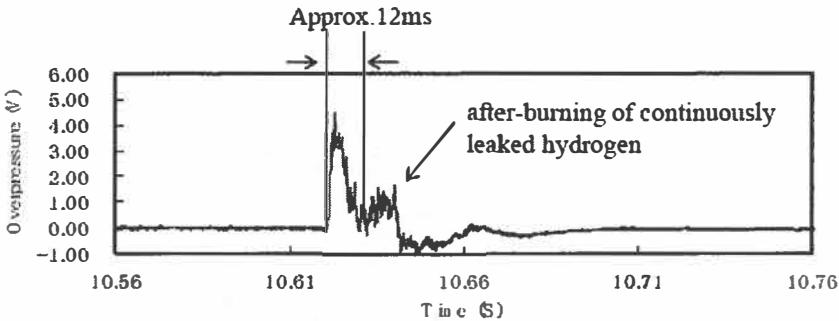


Figure 2.6 Surpression typique à 3.9m du point d'allumage. ($P_0 = 40$ MPa, $d = 10$ mm, Temps d'allumage = 2 sec) *Takeno, K. et al.* [3]

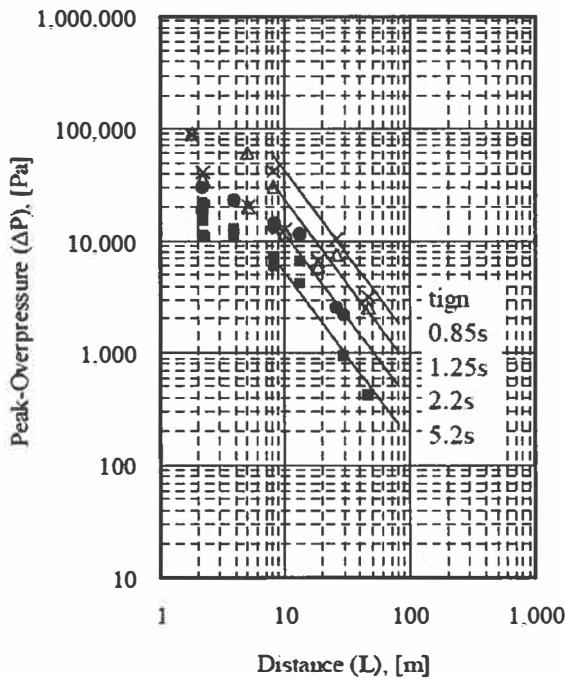


Figure 2.7 Effet du temps d'allumage sur la surpression maximale mesurée. ($P_0 = 40$ MPa, $d = 10$ mm, Position de l'allumage = 4 m) *Takeno, K. et al.* [3]

Finalement, les figures 2.8 et 2.9 montrent une comparaison entre les résultats obtenus expérimentalement et ceux obtenus numériquement à l'aide d'AutoReaGas (ARG). Pour ce faire *Takeno, K. et al.* [3] ont importé les profils de concentration, vitesse et température dans ARG à partir de leurs simulations de dispersion. Ils ont trouvé que pour une explosion avec les conditions initiales de la figure 2.8, la surpression maximale sur l'axe central était de 20 kPa.

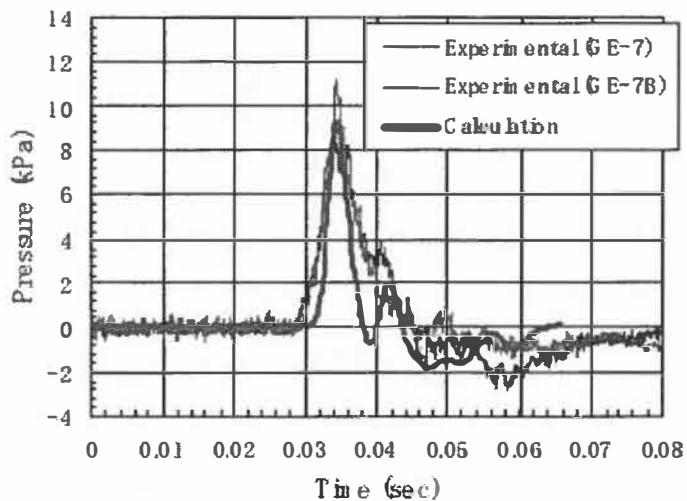


Figure 2.8 Comparaison d'une courbe de surpression obtenue expérimentalement et numériquement. ($P_0 = 40 \text{ MPa}$, $d = 10 \text{ mm}$, Temps d'allumage = 5 sec, Position de la jauge = 6m) *Takeno, K. et al.* [3]

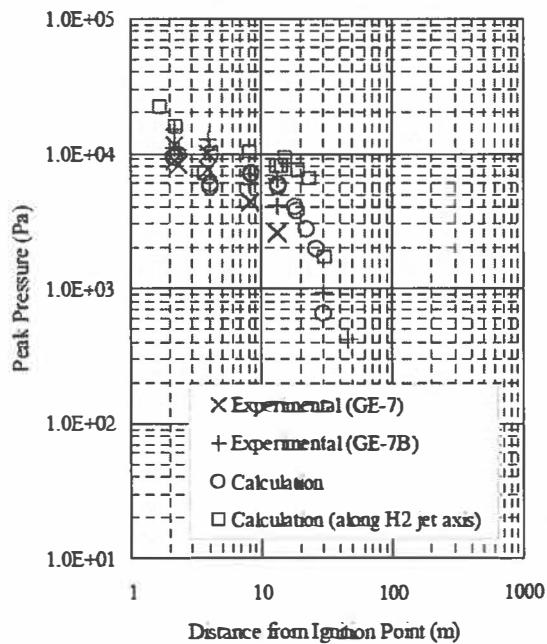


Figure 2.9 Comparaison entre les surpressions obtenues expérimentalement et numériquement. ($P_0 = 40 \text{ MPa}$, $d = 10 \text{ mm}$, Temps d'allumage = 5 sec) *Takeno, K. et al.* [3]

3. Théorie : dispersion et conséquences de l'allumage

L'étude de l'allumage d'un nuage d'hydrogène à partir d'un réservoir requiert l'étude de 3 processus physiques : la fuite elle-même, la dispersion subséquente du gaz et la propagation des flammes dans le nuage lors de l'allumage. Chaque phénomène peut-être modélisé par différents modèles et équations. Ces aspects sont présentés plus en détail dans la section suivante.

3.1 Fuite de gaz en provenance d'un réservoir

Il existe plusieurs modèles pouvant être utilisés pour décrire les propriétés thermodynamiques de l'écoulement des fluides, en particulier l'écoulement d'un gaz, qui fuit à travers une ouverture. Les programmes de simulations commerciaux fonctionnent habituellement par défaut avec l'équation des gaz parfaits. Ces programmes se contentent de simuler la dispersion du gaz en ignorant les conditions thermodynamiques à l'intérieur du réservoir. En effet, bien qu'il soit possible pour ceux-ci de calculer ces conditions, le problème est simplifié lorsque les conditions à l'ouverture de la fuite sont importées comme conditions aux frontières et calculées par une approche thermodynamique. Cette approche a été utilisée dans le présent travail. Lors du calcul des conditions aux frontières à l'ouverture de la fuite, l'utilisation d'une équation d'état propre à l'hydrogène différente des équations de travail utilisées par défaut par le programme de simulation pourrait provoquer des incohérences. En effet, Fluent modélise la dispersion utilisant l'équation d'état des gaz parfaits. Pour cette raison l'équation d'état des gaz parfaits sera utilisée dans ce travail. Pour les cas où la pression étudiée est faible, l'approximation des gaz parfaits est tout à fait appropriée. Il est à noter que dans le cas de la fuite supersonique, la pression du réservoir est de 700 bar. À cette pression, même pour l'hydrogène, l'équation des gaz parfaits tend à introduire des erreurs notables lors des calculs liés aux débit, température et pression à la sortie de la fuite.

3.1.1 Trois régimes : subsonique, sonique, supersonique

Trois régimes de flux de gaz sont possibles lors d'une fuite de réservoir en fonction de la pression à l'intérieur du réservoir. La fuite supersonique se produit lorsque la pression d'un réservoir est supérieure à 1.89 fois la pression extérieure. La vitesse du gaz à la sortie du réservoir correspond à la vitesse du son. Puisque la densité du gaz est dépendante de la pression, le débit variera en fonction de la pression à la sortie. Bien que la vitesse des gaz au col de l'ouverture de la fuite soit exactement la vitesse du son, le gaz en aval de la sortie subit une forte expansion ce qui résulte en une zone supersonique très proche de la sortie où le gaz peut atteindre des vitesses quelques fois supérieures à la vitesse du son. Cette fuite est caractérisée par des ondes de choc stationnaires près de la sortie formant une région appelée cône de Mach. Le deuxième régime est celui de la fuite sonique. Dans ce régime, la pression dans le réservoir correspond exactement à 1.89 fois la pression à l'extérieur. Le troisième régime est celui de la fuite subsonique, qui se produit lorsque la pression est inférieure à 1.89 fois la pression extérieure. Le débit dépend alors directement de la vitesse de la fuite. La pression de transition 1.89 provient de l'étude de l'écoulement isentropique d'un gaz à travers une tuyère (équation 3.3).

Les trois exemples suivants illustrent l'utilisation des équations de travail normalement utilisées lors de l'étude de ces trois régimes. Les variables sont définies dans la figure 3.1. Le suffixe « 0 » réfère à l'intérieur du réservoir, le suffixe « e » directement à l'ouverture et le suffixe « a » réfère aux conditions ambiantes.

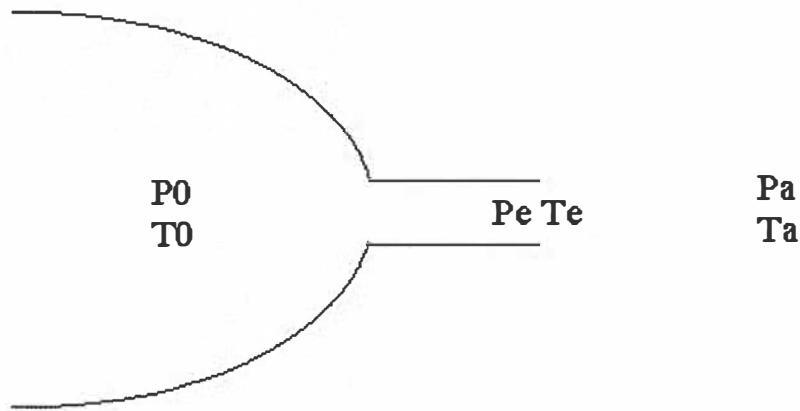


Figure 3.1 Réservoir théorique.

Exemple de calcul en régime supersonique:

Calculons le débit théorique initial en régime supersonique d'une fuite d'un réservoir (figure 3.1) de 700 bar à travers une ouverture de 6 mm de diamètre à l'aide de l'équation des gaz parfaits et des équations isentropiques de l'écoulement d'un gaz à travers une tuyère.

Sachant que l'équation des gaz parfaits est :

$$pV = RT \quad \text{Eq. 3.1}$$

où R = constante des gaz parfaits = $8.31451 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$, p = pression, V = volume, T = température, on trouve la densité à l'ouverture :

$$\rho_e = \frac{P_e}{RT_e} m_{\text{mol}} \quad \text{Eq. 3.2}$$

où m_{mol} = masse molaire de l'hydrogène = $0.0020158 \text{ kg} \cdot \text{mole}^{-1}$.

Selon les équations isentropiques de l'écoulement d'un gaz à travers une tuyère, si la vitesse à l'ouverture est égale à la vitesse du son, la pression et la température à la l'ouverture seront :

$$\frac{p_0}{p} = \left(1 + \frac{\gamma+1}{2} M^2 \right)^{\frac{\gamma}{\gamma-1}} \quad \text{si } M=1 \Rightarrow p_e = p_0 \left(\frac{2}{\gamma+1} \right)^{\frac{\gamma}{\gamma-1}} \quad \text{Eq. 3.3}$$

$$\frac{T_0}{T} = 1 + \frac{\gamma - 1}{2} M^2 \text{ si } M=1 \Rightarrow T_e = T_0 \frac{2}{\gamma + 1} \quad \text{Eq. 3.4}$$

où γ = rapport des chaleurs spécifiques = $C_p/C_v = 1.4$, M = nombre de Mach = v_{fluide}/v , $T_0 = 293.15\text{K}$ et $P_0 = 700$ bar correspondent à la température et pression initiales dans le réservoir. Comme la pression $P_0 = 700$ bar est plus de 1.89 fois la pression atmosphérique $P_a = 1.013$ bar, l'hypothèse que $M=1$ est valide. Au départ la fuite est en régime supersonique. La pression et température à l'ouverture seront de $P_e = 369.8$ bar et $T_e = 244.3$ K.

La vitesse du son est définie comme :

$$v = \sqrt{\gamma T \frac{R}{m_{mol}}} \quad \text{Eq. 3.5}$$

Le débit à l'ouverture sera donc le produit de la densité du gaz = 36.7 kg/m^3 , la vitesse du gaz = 1187.7 m/s et l'aire de l'orifice = $2.82 \times 10^{-5} \text{ m}^2$

$$\dot{m}_e = \rho_e v_e A_e, \quad \text{Eq. 3.6}$$

d'où l'on trouve un débit initial théorique d'environ 1.23 kg/s . Ce débit diminuera avec le temps au fur et à mesure que la fuite progresse pour atteindre zéro quand la pression interne du réservoir P_0 sera devenue égale à la pression atmosphérique.

Exemple de calcul en régime sonique :

Calculons le débit théorique d'une fuite en régime sonique à travers une ouverture de 6 mm de diamètre à l'aide de l'équation des gaz parfaits et des équations isentropiques de l'écoulement d'un gaz à travers une tuyère. La température et la pression initiales dans le réservoir sont de 293.15 K et 1.89 atmosphère.

Une fuite d'hydrogène passe en régime sonique lorsque le rapport entre la pression du réservoir et la pression atmosphérique est égal à 1.89. Selon l'équation 3.3 où $M=1$, la pression à la sortie serait donc de 1 atmosphère. Selon l'équation 3.4, la température serait de 244.2 K . Pour faciliter le calcul, un réservoir qui se vide directement à partir du régime sonique est considéré. Ici la densité à la sortie serait de 0.1 kg/m^3 selon l'équation

3.2. La vitesse serait de 1187.5 m/s selon l'équation 3.5. Le débit serait donc de 0.00337 kg/s.

Exemple de calcul en régime subsonique :

Le débit théorique d'une fuite subsonique varie en fonction de la vitesse du jet. La pression à l'ouverture sera égale à la pression atmosphérique. La température à l'ouverture sera plus faible que la température dans le réservoir, mais avec un ratio différent de celui de l'équation 3.4. Considérant les échanges de chaleur avec le milieu ambiant, l'hypothèse que la température à l'ouverture équivaut à la température à l'extérieur du réservoir est valide. Le débit se calcule alors directement à l'aide de l'équation 3.6.

3.1.2 Modélisation de la fuite¹

Un modèle de fuite de réservoir à haute pression utilisant une approche de volume de contrôle basée sur les travaux de Paraschiovu et al (2005) a été développé par M. Dauphinais-Rivard (étudiant en maîtrise des sciences de l'énergie et des matériaux à l'UQTR en 2006). Ce modèle fut utilisé pour calculer les conditions physiques à l'ouverture de la fuite d'un réservoir sous une pression de 700 bar.

Le modèle se limite à certaines conditions physiques. En voici la liste :

- Les propriétés physiques du fluide sont uniformes dans le réservoir.
- Les transferts de chaleur entre le réservoir et l'air ambiant sont considérés.
- Pour des pressions de stockage assez élevées, la vitesse du gaz à la sortie est égale à la vitesse du son. Une fois que la pression de stagnation chute au dessous du niveau critique, la vitesse du fluide à la sortie devient subsonique et la pression à la sortie est égale à la pression atmosphérique.

¹ Basé sur les travaux de maîtrise d'Étienne Dauphinais-Rivard, UQTR (2006).

- L'expansion de l'hydrogène à partir de l'état stagnant à l'intérieur du réservoir vers l'état critique à l'ouverture s'effectue dans une petite région près de la sortie et est modélisée par une équation de flux isentropique quasi unidimensionnelle.
- Le modèle fonctionne aussi bien avec les gaz réels que parfaits. Par contre pour notre étude dans ce mémoire, uniquement l'équation des gaz parfaits fut utilisée, conservant ainsi la cohérence entre les outils informatiques.
- Le volume de contrôle correspond aux limites du réservoir.

Le modèle est basé sur les équations de conservation de masse et la première loi de la thermodynamique. Pour un volume de contrôle défini nous avons :

$$\frac{dm_{c.v.}}{dt} + \sum \dot{m}_i - \sum \dot{m}_e = 0 \quad \text{Eq. 3.7}$$

$$\dot{Q}_{c.v.} + \sum \dot{m}_i \left(h_i + \frac{V_i^2}{2} + gZ_i \right) = \frac{dE_{c.v.}}{dt} + \sum \dot{m}_e \left(h_e + \frac{V_e^2}{2} + gZ_e \right) + W_{c.v.} \quad \text{Eq. 3.8}$$

Où m , t , Q , h , V , E et W sont la masse, le temps, la quantité de chaleur, l'enthalpie, la vitesse, l'énergie et la quantité de mouvement et où c.v., i et e signifient volume de contrôle, entré et sorti du volume de contrôle respectivement. Après quelques simplifications, les équations se réduisent à

$$\frac{d\rho_t}{dt} = \frac{-\dot{m}}{\Psi} \quad \text{Eq. 3.9}$$

$$\frac{du_t}{dt} = \frac{\dot{Q}_{c.v.} + \dot{m}(u_t - h_t)}{m_{c.v.}} \quad \text{Eq. 3.10}$$

où

$$\dot{m}_e = \rho_e v_e A_e \quad \text{Eq. 3.6}$$

ce qui correspond à l'équation 3.6. Dans les équations précédentes, ρ , Ψ et u sont respectivement la densité, le volume interne du réservoir et l'énergie interne. L'indice t signifie : l'état stagnant. L'indice e signifie : à l'ouverture.

Pour évaluer le débit, les conditions à l'ouverture doivent être déterminées. Pour faire le lien entre l'état stationnaire dans le réservoir et les propriétés à la sortie, les équations

pour l'écoulement d'un flux isentropique à travers une tuyère pour un gaz parfait sont utilisées. Nous retrouvons donc les équations 3.3 et 3.4, plus une équation similaire pour la densité.

$$\frac{p_0}{p} = \left(1 + \frac{\gamma+1}{2} M^2\right)^{\frac{\gamma}{\gamma-1}} \quad \text{Eq. 3.3}$$

$$\frac{T_0}{T} = 1 + \frac{\gamma-1}{2} M^2 \quad \text{Eq. 3.4}$$

$$\frac{\rho_0}{\rho} = \left(1 + \frac{\gamma-1}{2} M^2\right)^{\frac{\gamma}{\gamma-1}} \quad \text{Eq. 3.11}$$

Donc en spécifiant le nombre de Mach (M) à l'ouverture et les propriétés à l'intérieur du réservoir, il est possible de calculer les propriétés à la sortie.

Pour les autres valeurs physiques, les relations thermodynamiques des gaz parfaits sont utilisées :

$$h = C_{p0} T \quad \text{Eq. 3.12}$$

$$u = C_{v0} T \quad \text{Eq. 3.13}$$

L'intégration numérique est effectuée avec l'aide d'un algorithme du quatrième et cinquième ordre de Runge-Kutta-Fehlberg.

3.1.3 Courbes du débit, de la pression et de la température

Le réservoir utilisé lors des simulations est représenté dans la figure 3.2. La configuration principale considérée est un jet horizontal provenant d'un réservoir de 150 litres (0.15 m^3) pressurisé à un maximum de 700 bar. Les dimensions externes sont 413 x 1534 mm les dimensions internes sont 372 x 1381 mm, diamètre et longueur respectivement. Le réservoir possède des extrémités semi-sphériques. L'ouverture de 6 mm de diamètre est située à 500 mm du sol à 100 mm de l'axe de symétrie et à une distance de 100 mm de l'extrémité du cylindre, dirigé perpendiculairement par rapport à l'axe de symétrie. La température et la pression ambiante sont de 293.15 K et 101.3 kPa.

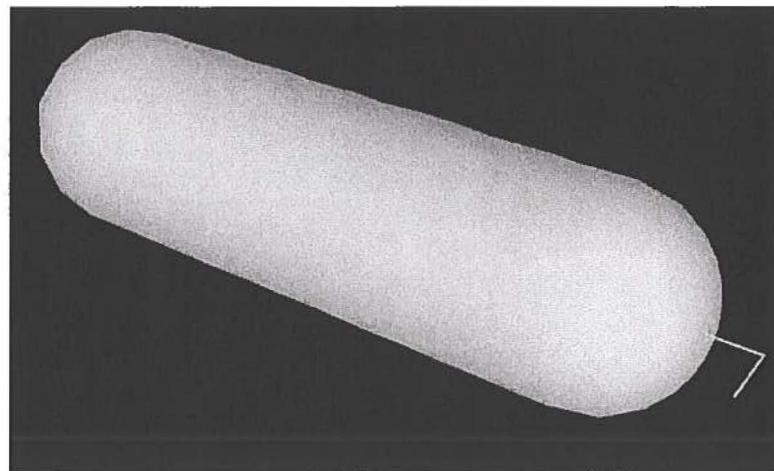


Figure 3.2 Réservoir haute pression utilisé lors des simulations.

Le programme décrit en 3.1.2 fut utilisé pour déduire le débit, la pression et la température à l'ouverture de la fuite. Les trois courbes des figures 3.3, 3.4 et 3.5 furent utilisées lors de la simulation de dispersion en régime supersonique effectuée dans Fluent.

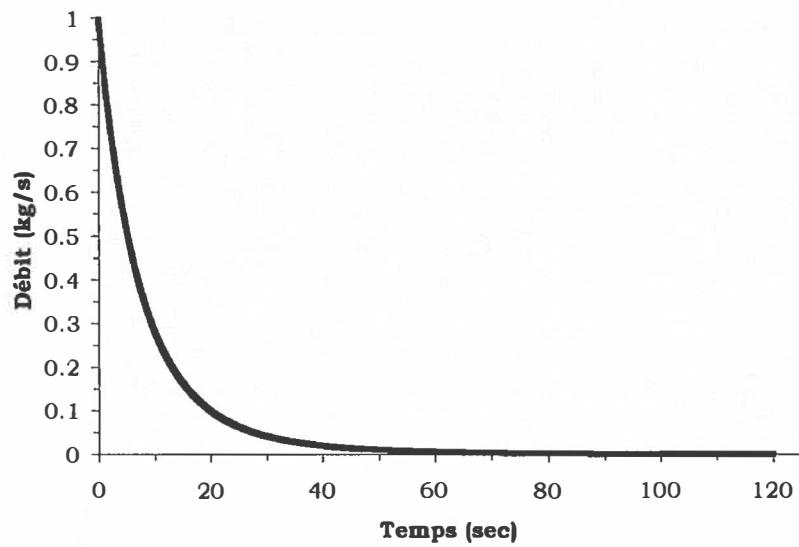


Figure 3.3 Débit à l'ouverture en fonction du temps pour une fuite de 700 bar à travers un orifice de 6 mm de diamètre.

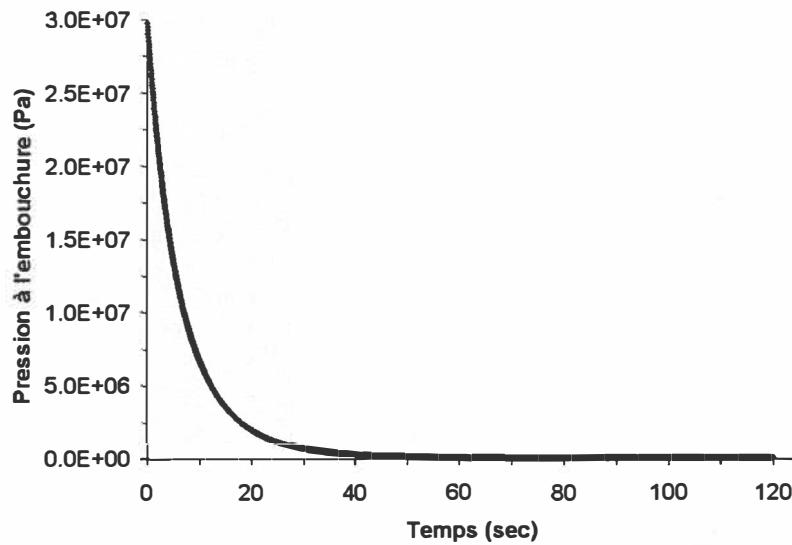


Figure 3.4 Pression à l'ouverture en fonction du temps pour une fuite de 700 bar à travers un orifice de 6 mm de diamètre.

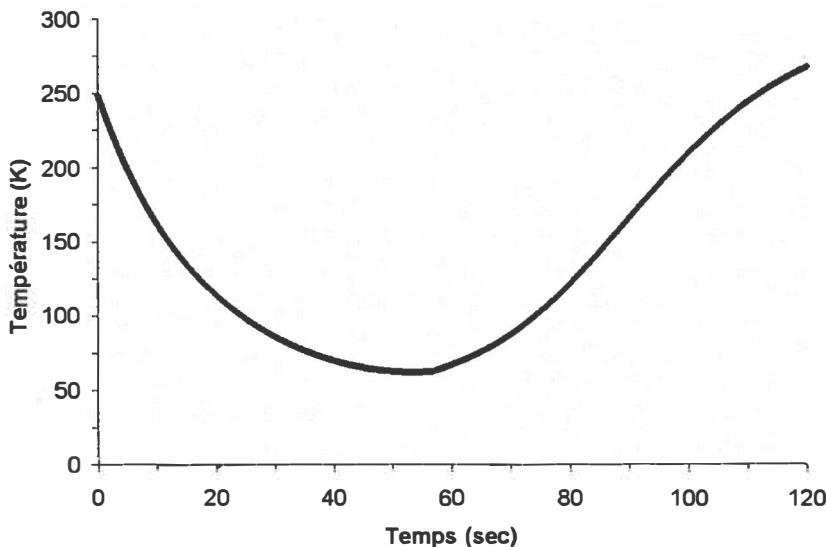


Figure 3.5 Température à l'ouverture en fonction du temps pour une fuite de 700 bar à travers un orifice de 6 mm de diamètre. On remarque l'effet des échanges thermiques entre le réservoir et le milieu extérieur. Un coefficient thermique de 15 W/(m²K) fut utilisé.

3.2 Dispersion du gaz

La dispersion est modélisée à l'aide des équations de Navier-Stokes en supposant un gaz parfait. Les contributions de la turbulence sont modélisées à l'aide de l'approche RNG K- ϵ . La section 4.1.1 ainsi que l'annexe 2.1 donnent plus de détails sur les valeurs des constantes utilisées pour chaque modèle.

3.2.1 Modèle de Birch

Birch et al. [15][16] ont proposé un modèle pour prédire l'étendue d'un nuage de gaz naturel créé lors d'une fuite en régime stationnaire avec débit, pression et température constante. Puisque le modèle n'est pas exclusif au gaz naturel, il peut être utilisé pour n'importe quel gaz. Il fonctionne aussi bien pour un gaz parfait ou un gaz réel. Le modèle fut validé avec des jets supersoniques verticaux dans l'air avec des pressions à l'ouverture de 10 à 70 bar.

Considérant une ouverture effective placée au-delà de la zone supersonique, respectant les lois de conservation de la masse et du moment cinétique et supposant que la pression à la fin de la zone supersonique est égale à la pression ambiante, l'équation 3.14 permet de trouver l'étendue maximale du nuage sur l'axe central du jet :

$$\bar{\eta}_{fm}(x) = \frac{Kd_{eff}}{x + x_0} \left(\frac{\rho_a}{\rho_{gaz}} \right) \quad \text{Eq. 3.14}$$

où η_{fm} = fraction molaire moyenne, K = constante d'entrainement, d_{eff} = diamètre effectif, x = position sur l'axe du jet, x_0 = origine virtuelle du jet, ρ_a = densité du fluide ambiant, ρ_{gaz} = densité du gaz dispersé évaluée à la pression et température ambiantes. L'équation 3.15 permet de trouver la dimension du diamètre effectif de l'ouverture virtuelle :

$$d_{eff} = \left(\frac{\rho_e u_e}{\rho_{gaz} u_{eff}} \right)^{1/2} d_e \quad \text{Eq. 3.15}$$

où ρ_e = densité du jet à l'ouverture, u_e = vitesse du jet à l'ouverture, u_{eff} = vitesse effective, d_e = diamètre de l'ouverture. L'équation 3.16 permet de trouver la vitesse effective à l'ouverture virtuelle :

$$u_{eff} = u_e + \left(\frac{p_e - p_a}{\rho_e u_e} \right) \quad \text{Eq. 3.16}$$

où p_e = pression du jet à l'ouverture, p_a = pression ambiante.

De ces trois équations, on trouve l'étendue x de la fraction molaire moyenne sur l'axe du jet :

$$x = \frac{Kd_{eff}}{\bar{\eta}_{fm}} \left(\frac{\rho_a}{\rho_{gaz}} \right) \quad \text{Eq. 3.17}$$

La valeur de $K = 5.40$ proposée par *Birch et al.* [15][16] est utilisée. La valeur de l'origine virtuelle x_0 étant typiquement de l'ordre de quelques diamètres de l'ouverture (moins de 5) fut négligée en accord avec les travaux de *Birch et al.* [15][16].

Bien que le modèle ait été développé pour des jets supersoniques stationnaires verticaux, il est pertinent d'extrapoler quelques prédictions pour une fuite sonique en régime stationnaire et une fuite supersonique à débit variable. Pour la fuite supersonique, une pression fixe et une température fixe devaient être déterminées. Les valeurs de la pression et de la température à 5 secondes après le début de la fuite furent utilisées en accord avec les travaux présentés par *Houf, W. et al* [17].

Examinons premièrement les prédictions faites par le modèle pour l'hydrogène, utilisant la loi des gaz parfaits, pour un jet sonique s'échappant à travers une ouverture de 6 mm de diamètre. La pression et la température à l'ouverture sont 1.013 bar et 244.2 K. La densité du gaz à l'ouverture est donc 0.1 kg/m^3 . La vitesse du gaz à l'ouverture est 1187.5 m/s. La densité du gaz aux conditions ambiantes (1.013 bar, 293.15 K) est 0.0839 kg/m^3 . La densité de l'air aux conditions ambiantes est 1.206 kg/m^3 . On trouve une vitesse effective de 1187.5 m/s et un diamètre effectif de 0.0066 m. L'étendue du nuage calculé pour un contour de concentration de 4 % (vol) est donc 12.8 m.

Examinons maintenant les prédictions faites pour l'hydrogène, utilisant la loi des gaz parfaits, pour un jet supersonique provenant d'un réservoir de 700 bar s'échappant à travers une ouverture de 6 mm de diamètre. La pression et la température à l'ouverture du réservoir à 5 secondes après le début de la fuite sont 138 bar et 198.7 K, selon les courbes présentées aux figures 3.4 et 3.5. La densité du gaz à l'ouverture est donc 16.84 kg/m^3 . La vitesse du gaz à l'ouverture est 1071 m/s. La densité du gaz aux conditions ambiantes (1.013 bar, 293.15 K) est 0.0839 kg/m^3 . La densité de l'air aux conditions ambiantes est 1.206 kg/m^3 . On trouve une vitesse effective de 1830.54 m/s et un diamètre effectif de 0.065 m. L'étendue du nuage calculé pour un contour de concentration de 4 % (vol) est donc 126 m.

Comparant ces résultats avec ceux obtenus dans la section 5, on peut conclure que le modèle ne s'applique pas directement aux jets étudiés dans ce mémoire. Première différence importante : les jets ne sont pas verticaux. La proximité du sol et l'influence de la gravité peuvent avoir un impact important sur la forme et l'étendue du nuage. L'étendue d'un jet vertical ne sera pas nécessairement la même que celle d'un jet horizontal. Deuxième différence importante : dans le cas de la fuite supersonique, les conditions à l'ouverture varient avec le temps. *Birch* et al. [15][16] font l'hypothèse que les conditions physiques à l'ouverture sont invariantes dans le temps. Cette différence peut être partiellement contournée en extrapolant les valeurs moyennes des conditions physiques à l'ouverture de la fuite supersonique, permettant ainsi de trouver une étendue équivalente. Par contre, cette approximation n'est pas très adéquate. Troisième différence : la pression à l'ouverture pour le cas supersonique est plus élevée que 70 bar, sortant ainsi des limites de pression validées par *Birch* et al. [15][16]. Toutes ces différences doivent donc être prises en compte lorsqu'on compare les résultats de ce mémoire aux prédictions faites par ce modèle.

3.3 Explosion du gaz dispersé

Les flammes d'hydrogène peuvent se propager selon deux modes : déflagration et détonation. Le terme explosion couvre généralement les détonations et les déflagrations rapides accompagnées d'une surpression significative. Une déflagration et une détonation sont caractérisées par des mécanismes de propagation différents. Le front de flamme de la déflagration se propage par diffusion de chaleur et des produits de combustion. Le front de flamme de la détonation se propage plutôt par le biais d'une onde de choc puissante qui compresse les gaz au-delà de leur point d'autoallumage alimentant ainsi l'onde de choc initiale. Les ondes de choc ainsi que les effets thermiques sont les principales sources de dommages résultants d'une explosion. Ce mémoire se concentre principalement sur l'amplitude des ondes de choc résultantes de déflagrations.

3.3.1 Mécanismes physiques et types d'explosions

Quatre facteurs doivent être réunis pour que l'explosion d'un nuage de gaz puisse se produire.

Premièrement, une fuite de gaz inflammable dans l'atmosphère doit avoir lieu. Cette fuite peut avoir comme source un réservoir pressurisé ou encore l'évaporation d'un liquide. De plus, elle doit se produire à une pression et une température propice au déclenchement d'une explosion. Une pression trop basse ne permettra pas une concentration assez élevée de gaz pour que l'allumage soit possible. Une température trop basse augmentera l'énergie minimale requise pour que l'allumage soit possible.

Deuxièmement, cette fuite doit se disperser et s'accumuler pour former un nuage de taille suffisante avant l'allumage. Si l'allumage se fait trop tôt, le gaz va tout simplement bruler aussitôt la fuite initiée. Ceci pourrait se produire si le gaz s'échappe dans un environnement où la température surpassé la valeur d'autoallumage. Pour l'hydrogène, cette température tourne autour de 673 K dans l'air à la pression atmosphérique. Si l'allumage se fait trop tard la concentration du gaz pourrait être trop élevée,

dépendamment du taux de confinement, pour que celui-ci s'enflamme. Le gaz pourrait aussi tout simplement se disperser.

Troisièmement, une quantité suffisante de gaz se doit d'être à une concentration se situant dans la plage d'inflammabilité du gaz. Pour l'hydrogène, cette limite d'inflammabilité se situe entre 4 % (vol) et 75 % (vol) d'hydrogène dans l'air. Habituellement un nuage de gaz peut être divisé en trois parties : une section près de la fuite à très haute concentration, une section aux limites du nuage à très basse concentration, toutes deux non inflammables et une région centrale à concentration inflammable. La concentration du gaz dans chaque section du nuage dépend de plusieurs facteurs incluant le type et la quantité de gaz échappée, la pression au départ, la grosseur de l'ouverture de la fuite, le degré de confinement, le vent, l'humidité, etc.

Quatrièmement, le nuage de gaz doit être soumis à une source d'énergie lui permettant de s'allumer. L'allumage mène à une détonation, une déflagration ou une flamme lente. Tout dépend de la vitesse et de l'amplitude de l'onde de choc générée. L'explosion est caractérisée par une expansion très rapide des gaz dans une région donnée, accompagnée par une augmentation de la température et de la pression localement. L'intensité de l'onde de choc produite par une explosion est directement reliée à la vitesse de la flamme. Plus la flamme se propage rapidement dans le nuage de gaz, plus la surpression sera élevée ce qui aura pour effet d'augmenter les effets de l'onde de choc à l'extérieur du nuage. La vitesse de flamme de l'hydrogène à concentration stœchiométrique (~29 % (vol) d'hydrogène dans l'air) dans une situation laminaire est environ 3.25 m/s. En présence de turbulence, cette vitesse peut augmenter énormément contribuant ainsi à la formation d'ondes de choc très puissantes.

Une fois ces quatre facteurs réunis, un front de flamme se propagera à l'intérieur du nuage de gaz à partir du point d'allumage. La figure 3.6 montre la dynamique physique présente dans le nuage de gaz lors de la propagation du front de flamme.

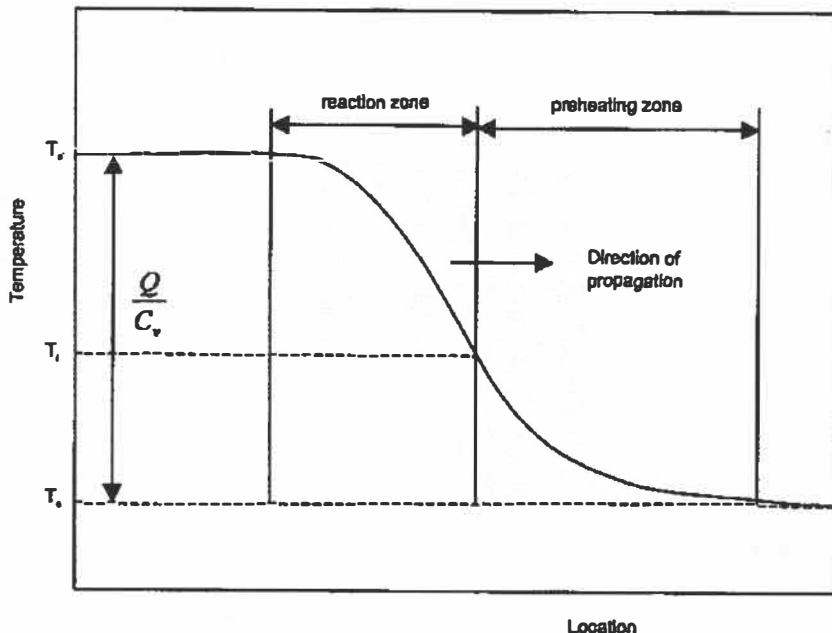


Figure 3.6 Propagation du front de flamme dans le nuage. Une zone de réchauffement des gaz est présente en avant de la zone de réaction où la flamme consume le combustible.

AutoReaGas Theory Manual [5]

La vitesse de ce front de flamme est directement affectée par la présence de turbulence dans le gaz. L'intensité de la turbulence est directement lié au taux de confinement du nuage, au nombre d'obstacles présents dans la zone de combustion ainsi qu'à la vitesse du gaz s'échappant par l'ouverture de la fuite. Une explosion dans un bâtiment ou encore dans un conduit quelconque est considérée comme confinée. Si l'explosion est totalement confinée (sans perte de chaleur ou gaz), typiquement la surpression peut atteindre jusqu'à 8 fois la pression ambiante initiale. Cette augmentation de pression est principalement déterminée par le rapport entre la température des gaz brûlés et non brûlés. Une explosion dans un milieu non confiné est habituellement caractérisée par de plus bas niveaux de turbulence. La vitesse de flamme est donc plus faible et les surpressions moins élevées.

En général, une flamme se propagera initialement de façon laminaire c'est-à-dire sans turbulence. Les produits de la combustion initiale, étant en expansion, produisent un flux laminaire en avant de la flamme. La vitesse d'une telle flamme sera de 3.25 m/s pour l'hydrogène. Sans présence de turbulence, cette vitesse n'augmentera pas

significativement pour permettre une déflagration importante et encore moins une détonation.

Pour qu'il y ait déflagration rapide, on doit nécessairement avoir la présence de turbulence dans le nuage de gaz. Cette turbulence augmentera significativement le taux de combustion et par conséquent la vitesse de la flamme. La turbulence peut être causée par la fuite elle-même par l'entremise du jet provenant d'un réservoir à haute pression par exemple, ou encore par l'entremise des gaz non brûlés en expansion dans un espace rempli d'obstacles, ou bien par des flux de gaz venant de l'extérieur (ventilateur, vent, etc.). Aussitôt que la flamme sort d'une zone de turbulence, le taux de combustion et, par le fait même, la surpression diminuent.

Dans les cas extrêmes, un niveau de turbulence très élevé peut convertir une déflagration en détonation. On se retrouve alors avec une flamme et une onde de choc qui voyagent à une vitesse plusieurs fois supérieure à la vitesse du son (2 à 5 fois supérieures). Ceci entraîne des surpressions plusieurs fois supérieures à la pression atmosphérique. Ce mode de combustion est contrôlé non pas par la diffusion moléculaire, mais plutôt par la propagation de l'onde de choc. En effet, l'énergie thermique libérée par la compression résultante de l'onde de choc en mouvement est assez élevée pour que la température d'autoallumage du gaz soit atteinte. Une fois la détonation enclenchée, si les conditions sont optimales, la turbulence n'est plus nécessaire au maintien de la vitesse de propagation. L'explosion s'auto alimente. La combustion initiée par la zone de compression génère de nouvelles ondes qui à leurs tours consument les réactifs. Par contre, il est important de noter que pour que la détonation se propage sans perte notable d'énergie dans un environnement dépourvu d'obstacle ou de turbulence, la partie inflammable du nuage de gaz doit être homogène et être à concentration stœchiométrique. Sans cette homogénéité, la détonation ne pourra pas être soutenue. Puisque la formation de nuages de gaz homogènes est un événement rare, en général, une détonation a peu de chance de se produire dans des espaces ouverts. Dans des conditions non optimales, la turbulence maximise la réactivité du gaz et contribue ainsi à soutenir la détonation. Elles sont donc beaucoup plus probables dans des espaces clos lorsque

plusieurs obstacles générateurs de turbulence sont présents. Le modèle de Chapman-Jouguet est souvent utilisé pour décrire mathématiquement le mode de propagation des détonations.

La probabilité qu'une explosion soit, au départ, une déflagration ou une détonation est aussi influencée par l'énergie initiale transférée au système lors de l'allumage. L'énergie initiale pour produire une déflagration tourne autour de 10^4 Joules pour un hydrocarbure typique, tandis que pour obtenir une détonation dès l'allumage, une onde de choc capable de maintenir une température au dessus de la température d'autoallumage du gaz est nécessaire. Une telle onde de choc nécessite une énergie minimale de 10^6 Joules, ce qui correspond à une puissante décharge explosive. Il est donc peu probable que par accident une telle charge allume un nuage de gaz. Les détonations arrivent donc plus souvent par transition déflagration à détonation au moyen de la turbulence.

3.3.2 Ondes de choc

La propriété la plus critique d'une explosion est l'onde de choc qui en résulte. Les explosions de nuages de gaz sont caractérisées par une combustion rapide produisant des produits de combustion à haute température. Ceux-ci, en expansion rapide, influencent grandement leur entourage. La chaleur de combustion d'un mélange air-combustible (énergie chimique) est partiellement convertie en expansion (énergie mécanique). Cette énergie mécanique est transmise à l'atmosphère entourant l'explosion sous la forme d'un souffle, d'une onde de choc. Ce processus de conversion d'énergie est très similaire à celui qui se produit dans un moteur à combustion. De ce fait, on peut le caractériser par son efficacité thermodynamique. Sous des conditions atmosphériques normales, le maximum d'efficacité thermodynamique d'un processus de conversion d'énergie chimique en énergie mécanique pour une explosion d'un nuage de gaz est d'environ 40 %. Donc moins de la moitié de l'énergie produite sous forme de chaleur lors d'une explosion peut être transformée en onde de choc.

Une onde de choc s'accompagne par un changement de pression, de densité et de vitesse de l'écoulement. Dans une onde de choc, ces paramètres commencent par augmenter rapidement pour ensuite diminuer plus lentement au-dessous des conditions initiales pour finalement revenir lentement aux valeurs atmosphériques de départ.

La forme de l'onde de choc est hautement dépendante de la nature du processus d'explosion. Si le processus de combustion est relativement lent, l'expansion sera lente et la surpression produite sera de basse amplitude (Figure 3.7, déflagration). Par contre si la combustion est rapide l'onde de choc sera caractérisée par une augmentation soudaine de la pression (Figure 3.8, détonation).

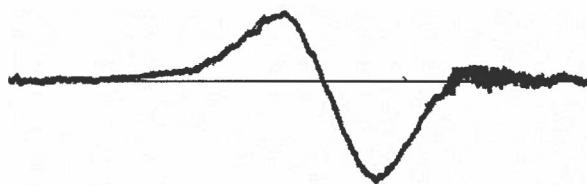


Figure 3.7 Profil d'une surpression résultante d'une déflagration

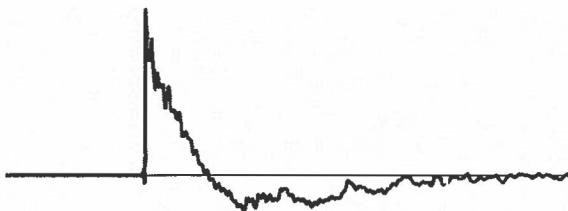


Figure 3.8 Profil d'une surpression résultante d'une détonation

La forme de l'onde de choc change lors de sa propagation. Son amplitude diminue plus elle s'éloigne de son origine.

Le tableau 3.1 donne une liste des dommages produits par une onde de choc en fonction de son intensité.

Dommages et conséquences	Surpression maximale (kPa)
Bris occasionnel de larges fenêtres déjà sous contraintes	0.2
Bris de petites fenêtres déjà sous contraintes	0.7
Pression typique du bris du verre	1.0
Distance sécuritaire; 10 % des fenêtres fracassées	2.0
Dommage structurel mineur et limité	2.8
Petites et larges fenêtres fracassées; le cadre de fenêtre occasionnellement endommagé	3.5-6.9
Dommage mineur à la structure des maisons	4.8
Démolition partielle des maisons les rendant inhabitables	6.9
Amiante ondulé fracassé; joints de panneaux d'acier et d'aluminium ondulés brisés; panneaux de bois percés	6.9-13.8
Armature en acier de bâtiment plaqué tordu	9.0
Effondrement partiel des murs et plafond de maisons	13.8
Murs de béton ou de brique, non renforcés, fracassés	13.8-20.7
Limite inférieure des dommages structurels sérieux	15.9
Destruction de 50 % des briques d'une maison	17.3
Machinerie lourde (3000 livres) légèrement endommagée; Armature en acier tordue et arrachée des fondations d'un bâtiment	20.7
Bâtiment en panneaux d'acier, sans cadre, démolie; Rupture de réservoir de stockage de pétrole	20.7-27.6
Rupture du revêtement de petits bâtiments industriels	27.6
Poteaux de bois (téléphone, électrique) cassés	34.5
Destruction quasi complète de maisons	34.5-48.3
Wagon de train chargé renversé	48.3
Panneaux de brique, 8-12 pouces d'épaisseur, non renforcés, bris par cisaillement ou flexion	48.3-55.2
Wagon de train chargé recouvert démolie	62.1
Destruction totale des bâtiments probables; Machinerie lourde (7000 livres) fortement endommagée	69.0
Limite de formation de cratère	2000

Tableau 3.1 Dommages produits par une onde de choc en fonction de son intensité. *Lees (V.J. Clancey, 1772b) [13]*

3.3.3 Explosion de jets d'hydrogène

L'explosion d'un jet d'hydrogène diffère de celui d'un nuage statique. La vitesse du jet a un effet d'amplification sur l'onde de choc produite par l'explosion. En effet à l'aide de la turbulence générée par la fuite, l'amplitude de l'onde de choc augmente fortement. De plus, la vitesse du jet privilégie la propagation de l'onde de choc dans la

direction du jet. On se retrouve alors avec une onde conique plutôt qu'une onde sphérique.

Selon de récentes expériences effectuées par *Takeno, K.* et al. [3], pour un jet en régime supersonique, la turbulence créée par la fuite a une plus grande influence sur la force de l'onde de choc que la concentration du nuage de gaz. En fait *Takeno, K.* et al. [3] ont observé qu'un allumage effectué peu après le début de la fuite générait une explosion de plus forte amplitude qu'un allumage se faisant plus tard. Une quantité suffisante d'hydrogène à une concentration suffisante pour permettre l'allumage devait au préalable s'être diffusée. De plus, la vitesse du gaz au point d'allumage devrait être au-dessous des limites où la flamme serait soufflée par le jet. Une fois ces conditions satisfaites, plus le temps d'allumage était repoussé, moins l'explosion était de forte amplitude. La turbulence créée par le jet est maximale lorsque la vitesse et le débit de la fuite sont aussi au maximum. Ce résultat vient corroborer l'hypothèse que la turbulence a un impact plus important sur la force d'une explosion de jet d'hydrogène que la concentration du nuage produit par le jet.

3.3.4 Modélisation des explosions

La modélisation des explosions fait référence à deux mécanismes physiques, soient la combustion du gaz produisant de la chaleur et l'expansion des produits de la combustion générant les ondes de choc. Ce mémoire se concentre principalement sur les effets des ondes de choc. La modélisation des ondes de choc se fait principalement par des méthodes empiriques. Deux groupes de modèles existent pour décrire les ondes de choc produites par une explosion. Le premier groupe compare un nuage de gaz à une quantité d'explosifs équivalente TNT par exemple, pour ensuite pouvoir utiliser les données expérimentales déjà connues sur cet explosif. Le deuxième groupe prend en considération le comportement spécifique des explosions de nuages de gaz. Les deux groupes de modèles sont basés sur des données obtenues expérimentalement. Les données recueillies sont utilisées pour corrérer des fonctions empiriques. La principale

différence entre les deux groupes est exprimée dans la relation modélisant l'onde de choc en fonction de la distance.

On peut démontrer qu'une solution directe du système d'équations différentielles couplées par simulation numérique qui tiendrait compte des fluctuations turbulentes à toutes les échelles nécessiterait un maillage impliquant $Re/10^4$ points, où Re est le nombre de Reynolds. Puisque Re est supérieur à 10^7 , le maillage devrait comporter 10^{16} noeuds. Il est donc clair qu'une simulation directe par solution des équations non moyennées est irréaliste. Le développement d'une méthode de simulation de mécanique des fluides par ordinateur devra donc se baser sur l'évaluation de la valeur moyenne des observables du processus de combustion. Le processus de moyennage des équations génère des termes de corrélation entre fluctuations turbulentes qu'il faut évaluer afin de fermer le système d'équations. Le modèle RNG K- ϵ permet de trouver une expression simple pour ces termes. Cependant, deux nouvelles équations du mouvement (une pour K et une pour ϵ) doivent être résolues parallèlement aux équations de Navier-Stokes. Le taux de réaction chimique décrivant le processus de combustion est non linéaire (puisque'il est généralement représenté par une forme d'Arrhénius) et ne peut être évalué en substituant simplement les observables physiques qui interviennent dans son expression par leurs valeurs moyennes. Le calcul du taux de réaction chimique turbulent doit donc se faire avec un modèle effectif basé sur l'évaluation de la vitesse de flamme turbulente. Cette approche, utilisée dans le présent travail, sera décrite dans la prochaine section.

4. Méthodologie

Les travaux de simulations effectuées dans ce mémoire furent divisés en deux parties : la dispersion du nuage d'hydrogène suivie par l'allumage et le calcul des surpressions. Plusieurs cas furent considérés : fuite horizontale, verticale, en régime subsonique, sonique et supersonique. La méthodologie fut initialement validée à l'aide des résultats de *Seifert, H.* et al. [1] sur des jets verticaux subsoniques.

4.1 Outils informatiques utilisés

Deux programmes furent utilisés pour simuler les dispersions et les explosions. Fluent fut premièrement utilisé pour simuler la dispersion des fuites. Après quoi les résultats de dispersion furent importés par l'entremise d'un code en Fortran (annexe 1.1) vers ARG de Century Dynamics/TNO. La vitesse ainsi que le profil de concentration obtenus lors des simulations de dispersions servirent de conditions initiales à ARG pour les simulations de déflagrations. Un code en C fut également développé pour augmenter la vitesse du traitement des données lors du processus d'importation (annexe 1.2).

Les simulations de dispersions furent effectuées sur une grappe Linux de 12 nœuds et 1 serveur. Le serveur et chaque nœud étaient équipés de deux processeurs Intel Xeon cadencés à 3.6 GHz avec 4 Go de mémoire vive. Les simulations d'explosions furent effectuées sur un Pentium 4 cadencé à 3.2 GHz avec 1 Go de mémoire vive.

4.1.1 Fluent

Fluent est un programme servant à simuler la dynamique des fluides pour un éventail varié de situations physiques. Son code de simulation généraliste est basé sur la méthode des volumes finis. Le programme contient une quantité importante de fonctions et modèles physiques permettant de simuler avec précision l'écoulement de fluides et autres phénomènes reliés à l'écoulement. Sa capacité d'importer des modèles et des

fonctions développées directement par l'utilisateur en code C le rend assez flexible pour s'adapter aux problèmes qui ne pourraient être résolus avec les modèles standards.

L'utilisation de Fluent se fait en deux étapes principales. La première consiste en la conception d'un maillage décrivant la géométrie du problème étudié. Gambit fut utilisé lors de ce travail pour concevoir et mailler l'espace dans lequel les calculs d'écoulement furent effectués. Une fois le maillage terminé, il est importé dans Fluent où différents paramètres liés à la simulation doivent être spécifiés. Par exemple dans le cas d'une fuite provenant d'un réservoir, le débit, la température, la pression à l'ouverture, les modèles de turbulences utilisés, les caractéristiques des gaz utilisés, les conditions aux frontières, etc. doivent être spécifiés. Une fois que tous les paramètres sont définis, il suffit d'initialiser le domaine de calcul puis d'effectuer la simulation. La convergence est validée à l'aide de la variation de la quantité totale d'hydrogène dans le domaine ainsi qu'à l'aide de l'évolution des valeurs résiduelles des variables physiques utilisées par les modèles pour chaque itération. Les paragraphes suivants présentent les modèles et options utilisés lors des simulations de dispersions présentées dans ce mémoire. L'annexe 2.1 présente une série de captures d'écrans liées aux différents paramètres listés.

Solveur

Fluent propose deux types solveurs : couplé et ségrégué. Le solveur couplé fut au départ développé pour résoudre des problèmes de fluide compressible se déplaçant à grande vitesse à travers un maillage fin. Les équations de continuité, quantité de mouvement et d'énergie sont ainsi résolues simultanément comparativement au solveur ségrégué qui les résout en chaîne. Le solveur ségrégué quant à lui fut développé pour des fluides incompressibles. Pour cette raison, le solveur couplé fut utilisé pour les simulations à haut débit et forte pression.

Le solveur couplé permet une linéarisation des équations de travail selon une approche implicite ou explicite. Pour une variable donnée, la formulation implicite utilise une relation incluant les valeurs connues et inconnues de cette variable pour toutes les cellules adjacentes. Puisque les valeurs inconnues apparaissent dans plus d'une équation,

toutes les équations du système sont résolues simultanément. La formulation explicite ne tient compte que des valeurs connues des variables, permettant la résolution de chaque équation individuellement. Comme plus de variables sont prises en considération en formulation implicite, la quantité de mémoire requise lors du calcul est plus élevée. Par contre, l'utilisation d'un solveur implicite permet d'obtenir la convergence plus rapidement. Le matériel informatique utilisé lors des simulations étant suffisamment puissant, le solveur couplé implicite fut utilisé pour obtenir une meilleure convergence. Toutes les simulations ont été effectuées au premier ordre pour faciliter la convergence.

Modèle visqueux, turbulence

Plusieurs modèles de turbulence peuvent être sélectionnés. Le modèle préconisé lors des simulations est RNG k- ϵ . Les paramètres standards furent utilisés. Ce choix a été validé à l'aide de données expérimentales sur des jets horizontaux reportées par Michael Swain et al [12]. Le tableau 4.1 montre que les résultats simulés étaient typiquement en accord avec les données expérimentales (10 %, 39 % au pire) pour un jet horizontal de 20 cm. La figure 4.1 montre le contour de concentration du nuage simulé lors de cette validation.

Tableau 4.1 Comparaison entre les données simulées et expérimentales pour un jet horizontal de 20 cm à 45 secondes. (*Hourri, A. et al. [18]*)

Position des jauge (m)	Concentration expérimentale de H ₂ (%)	Concentration simulé de H ₂ (%)	Déviation (%)*
1	5.0-5.9	5.04	-8.13
2	5.6-7.0	6.96	10.48
3	9.4-10.8	13.99	38.50
4	8.1-9.4	8.25	-5.70
5	5.6-6.6	5.29	-13
6	3.5-4.6	5.37	32.60

*La déviation est calculée en fonction de la valeur moyenne des valeurs expérimentales.

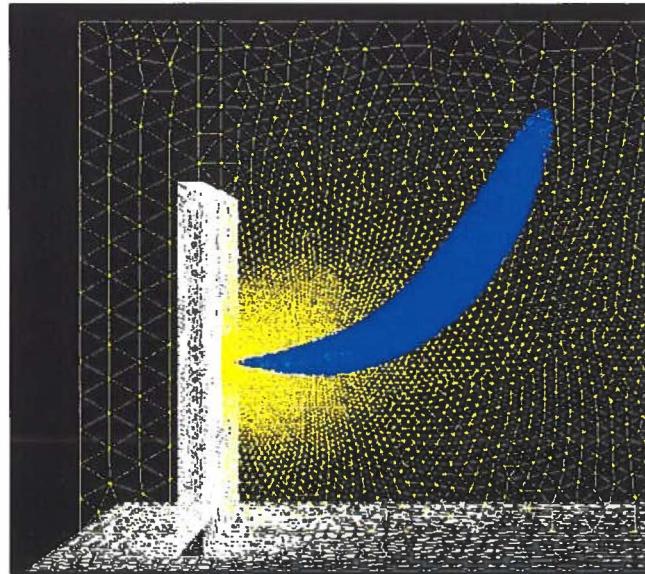


Figure 4.1 Résultats de simulations 30 secondes après le début de la fuite. Le maillage dans le plan de symétrie est aussi affiché. (*Hourri, A. et al. [18]*)

Transport des espèces/ Modèles des matériaux

Deux espèces de gaz sont considérées lors du transport des gaz : l'hydrogène et l'air. Bien que l'air soit un mélange de plusieurs gaz, il est ici considéré comme une espèce unique, facilitant ainsi le traitement du problème. L'équation d'état des gaz parfaits pour les mélanges binaires fut utilisée lors du traitement du mélange hydrogène-air. L'hydrogène est diffusé dans l'air selon un coefficient de $6.1 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$.

Conditions aux frontières

Les limites du domaine, soit les côtés et le dessus, sont représentées par des sorties de pression ne générant aucune turbulence à la température et la pression standard. Le plancher ainsi que le réservoir sont représentés par un mur ne générant ou n'absorbant aucun flux de chaleur.

L'ouverture de la fuite est représentée par une condition frontière qui tient compte du débit massique à l'entrée du domaine. Le débit, la température et la pression sont calculés selon les courbes présentées en 3.1.3. L'annexe 1.3 présente le code écrit en C des fonctions définies par l'utilisateur correspondant à chacune des courbes. L'intensité de la

turbulence pour un flux totalement développé à travers un tuyau peut être estimée à partir de la formule suivante, où Re est le nombre de Reynolds :

$$I = 0.16(Re)^{-1/8} \quad \text{Eq. 4.1}$$

L'échelle de la longueur de turbulence est estimée en fonction du diamètre du tuyau. Dans ce cas, le diamètre de l'ouverture a été considéré.

$$L = 0.07D \quad \text{Eq. 4.2}$$

4.1.2 AutoReaGas (ARG)

ARG est utilisé pour simuler la combustion de gaz inflammables ainsi que les ondes de chocs en résultant. Le programme résout numériquement les équations de Navier-Stokes et d'Euler à l'aide de la méthode des volumes finis. L'espace et le temps sont discrétisés. Le temps est divisé en pas où chaque pas équivaut à un cycle de calcul. L'espace est divisé selon un maillage structuré de forme rectangulaire.

Deux techniques de calcul numérique sont utilisées par ARG pour arriver à modéliser une explosion. Chaque technique possède son propre module de calcul. Le premier module permet de calculer de manière optimale la combustion du gaz lors de l'explosion tandis que le deuxième module calcule l'onde de choc résultante. Le premier module appelé module de « Combustion » résout les équations de Navier-Stokes tandis que le deuxième appelé module « BLAST », résout l'équation d'Euler.

Module de Combustion

À la base, une explosion peut-être considérée comme une interaction entre le processus de combustion d'un gaz prémixé et d'un champ d'écoulement d'un fluide. L'explosion est contrôlée par le niveau de turbulence induit au champ d'écoulement par l'action de différentes conditions frontières. Le module de combustion modélise ces aspects comme suit :

- Les gaz sont modélisés comme des gaz parfaits en expansion suite à l'ajout d'énergie. La dynamique des gaz est modélisée mathématiquement à l'aide des équations de conservation de la quantité de mouvement, de la masse et de l'énergie (équations de Navier-Stokes).

Masse :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j) = 0 \quad \text{Eq. 4.3}$$

Quantité de mouvement :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j u_i) = - \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} \quad \text{Eq. 4.4}$$

Énergie :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho E) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j E) = \frac{\partial}{\partial x_j} (\Gamma_E \frac{\partial E}{\partial x_j}) - \frac{\partial}{\partial x_j} (p u_j) + \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \quad \text{Eq. 4.5}$$

- La combustion contribue à l'ajout d'énergie dans le système. La combustion est modélisée par un processus de conversion des gaz inflammables en produits de combustion. Le processus s'effectue en une étape :

1 kg carburant + s kg oxygène \rightarrow (1 + s kg) produits

où s est la quantité stœchiométrique d'oxygène requis pour bruler 1 kg de carburant. Le processus de combustion est formulé mathématiquement à l'aide d'une équation limitant la combustion à une zone où la réaction s'effectue. Le taux de combustion R_c en mode turbulent est alors défini comme :

$$R_c = -C_t \rho \frac{S_t}{\delta} \text{Min}\left(m_{\text{fuel}}, \frac{M_{O_2}}{s}, \frac{M_{\text{Product}}}{1+s}\right) \quad \text{Eq. 4.6}$$

où R_c = taux de combustion

C_t = constante de modélisation, paramètre de calibration

ρ = densité

S_t = vitesse de combustion en mode turbulent

δ = épaisseur du front de combustion

Min = fonction de la fraction de masse du carburant, de l'oxygène et des produits de la combustion.

$$\delta = \frac{D_{fuel}}{S_t} \quad \text{Eq. 4.7}$$

où D_{fuel} est le coefficient de diffusion en mode turbulent

- La combustion en mode laminaire est modélisée par une équation contrôlant la propagation de la flamme initiale, près du point d'allumage :

$$S_b = S_l(1 + F_s R_f) \quad \text{Eq. 4.8}$$

où : S_b = vitesse de combustion

S_l = vitesse de combustion laminaire

F_s = facteur de proportionnalité, paramètre de calibration

R_f = rayon de la flamme sphérique

- La combustion en mode turbulent est modélisée à l'aide d'une relation liant le taux de combustion et la turbulence.

$$S_t = 1.8(\bar{u}')^{0.412} L_t^{0.196} S_l^{0.784} \nu_{is}^{-0.196} \quad \text{Eq. 4.9}$$

où S_t = vitesse de combustion en mode turbulent

\bar{u}' = intensité de la turbulence

L_t = longueur caractéristique de turbulence (échelle intégrale)

S_l = vitesse de combustion laminaire

ν_{is} = viscosité du mélange inflammable

- La turbulence est modélisée à l'aide du modèle k- ϵ .
- Les objets plus larges que le maillage sont représentés comme des frontières solides. Les objets plus petits que le maillage sont modélisés en tenant compte de l'effet qu'ils ont sur la turbulence.

Module BLAST (Onde de Choc)

L'onde de choc résultante de l'explosion affectera principalement des objets de grandes dimensions situées à plus ou moins grande distance du centre de la déflagration. En supposant un écoulement non visqueux et en considérant uniquement les objets de taille dépassant celle d'une cellule, il est possible de représenter la forme et l'amplitude de l'onde de choc de manière exacte. Souvent la propagation des ondes de choc est caractérisée par la présence de discontinuités dans la dynamique des gaz. La modélisation exacte de l'interaction entre le souffle d'une explosion et les objets autour de celle-ci requiert une description précise de tels phénomènes. Le module BLAST modélise ces aspects comme suit :

- La dynamique des gaz est modélisée comme un écoulement non visqueux et compressible de gaz parfait. La dynamique est modélisée mathématiquement à l'aide des équations de conservation de la quantité de mouvement, de la masse et de l'énergie pour un écoulement non visqueux (équations d'Euler).

Masse :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j) = 0 \quad \text{Eq. 4.10}$$

Quantité de mouvement :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j u_i) + \frac{\partial p}{\partial x_i} = 0 \quad \text{Eq. 4.11}$$

Énergie :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho E) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j E) + \frac{\partial}{\partial x_j} (p u_j) = 0 \quad \text{Eq. 4.12}$$

- Afin de représenter exactement les ondes de choc et les discontinuités dans le flux, le module BLAST utilise une méthode appelée le transport d'écoulement corrigé (FCT pour Flux-Corrected Transport). FCT exerce un contrôle sur la diffusion numérique prévenant ainsi l'élimination de gradients qui doivent être persistants. FCT est utilisé uniquement lorsque de tels gradients apparaissent.

Utilisation d'AutoReaGas

Les simulations présentées dans ce mémoire utilisent principalement le module de combustion. La combustion du gaz se fait généralement sans obstacle et les surpressions de plus grande amplitude se trouvent à proximité du point d'allumage limitant ainsi l'utilité du module BLAST. Tout de même, dans certains cas où la combustion se terminait rapidement, le module BLAST fut utilisé pour examiner l'allure des ondes de choc à plus grandes distances.

Chaque problème étudié nécessite la calibration de paramètres propre à ARG. Après avoir effectué une étude sur l'impact de ces paramètres, il fut décidé d'utiliser les valeurs par défaut de la vitesse de combustion laminaire de l'hydrogène (3.5 m/s), du paramètre C_t (70) et du paramètre F_s (0.15). ARG considère que la valeur de 3.5 m/s correspond à la vitesse de flamme laminaire maximale présente dans un nuage d'hydrogène à concentration stœchiométrique. La concentration stœchiométrique utilisée par ARG est de 30 % (vol) pour l'hydrogène. La vitesse de flamme laminaire étant fixe, elle ne s'adapte pas à des nuages de plus faible ou plus forte concentration. Les résultats présentés dans la section 4.3 montrent le lien entre cette vitesse et la concentration moyenne présente dans certains nuages.

Les simulations furent effectuées à l'aide d'une version d'ARG spécialement modifiée pour ce projet. Celle-ci tient compte de la distribution des vitesses initiales dans le nuage. Les profils de concentration et de vitesse obtenus par Fluent furent donc moyennés sur le maillage structuré d'ARG. ARG fut principalement utilisé et calibré pour des simulations d'explosions de nuages homogènes de méthane sur un maillage cubique homogène avec des cellules de 1 m de côté. L'utilisation faite du programme dans ce mémoire diffère donc de manière importante de celle normalement pratiquée.

L'allumage des jets fut effectué autant que possible dans les zones où la concentration du gaz avoisinait la concentration stœchiométrique. Dans le cas où les simulations de dispersion s'effectuaient en régime statique, le délai d'allumage n'avait pas d'importance.

Par contre dans le cas d'une fuite réelle où le débit variait avec le temps, les résultats des explosions étaient dépendants du temps d'allumage.

4.1.3 Calibration des outils informatiques

Pour réussir à bien reproduire les expériences et ainsi arriver à les valider, il est important de bien calibrer les outils informatiques. La calibration dépend directement de deux facteurs : les paramètres de calibration et la méthode de simulation. Dans le cas de Fluent, la méthode de simulation ainsi que les variables sont directement reliées aux modèles utilisés pour simuler la diffusion de l'hydrogène dans l'air. La problématique principale est donc la convergence des paramètres reliés à ces modèles. Pour Fluent, les problèmes de dispersion de jets subsoniques et soniques sont des cas assez simples à simuler et la convergence des paramètres reliés aux modèles utilisés dépend en grande partie de la qualité du maillage. Dans ces deux cas, Fluent n'a aucune difficulté à donner des résultats valides. Par contre dans le cas où la fuite est en régime supersonique, par exemple comme une fuite provenant d'un réservoir sous 700 bar de pression, Fluent a beaucoup plus de difficulté à modéliser correctement la dispersion. Pour permettre à Fluent de modéliser les ondes de choc suivant la fuite, un maillage très précis et un pas de temps très petit doivent être utilisés. Plus de détails sur la méthodologie utilisée pour ce type de jet sont donnés dans la section 5.3.1.

Dans le cas d'ARG, l'une des problématiques principales se trouve au niveau de la réutilisation de mêmes paramètres de calibration pour différentes simulations. Une fois qu'une calibration satisfaisante est atteinte pour une série bien précise d'explosions, il est possible d'étendre l'étude à des explosions semblables sur lesquelles aucune donnée expérimentale n'existe. Par contre, si le nouveau cas étudié diffère de manière importante du cas initial, la calibration risque d'être inefficace. Par exemple, une calibration effectuée pour l'explosion d'un nuage de gaz statique à ciel ouvert ne conviendrait probablement pas à l'explosion d'un jet de gaz en présence d'obstacle. Comme tous les cas présentés dans ce mémoire font référence à des jets, la calibration des paramètres fut effectuée sur des jets.

Les explosions simulées dans ce mémoire sont toutes des déflagrations. La problématique de calibration d'ARG pour des déflagrations débute dans le module de combustion. Ce module permet de simuler la combustion initiale des gaz. On obtient alors de l'information sur les surpressions, température, pourcentage de gaz brûlés, vitesse des gaz, etc. Une fois ce processus de combustion terminé, il suffit de revenir en arrière et choisir le pas de temps optimal permettant de calculer les effets des ondes de choc à courte et longue distance à l'aide du module BLAST. Le choix du pas de temps optimal se fait en fonction de la température et des surpressions observées dans le nuage à un temps donné. Aucun paramètre de calibration n'est nécessaire lors de l'utilisation du module BLAST. Donc pour arriver à bien calibrer le module de combustion, il suffit d'essayer différentes combinaisons de paramètres jusqu'à l'obtention de résultats qui concordent avec les résultats expérimentaux. Après avoir trouvé les valeurs optimales des paramètres de calibrations, il est possible de simuler différents cas sans avoir au préalable fait les expériences.

Deux paramètres de calibration sont importants lors de la combustion à savoir F_s et C_t . F_s contrôle la vitesse de propagation du front de flamme laminaire tandis que C_t contrôle la combustion en mode turbulent. Pour reproduire avec exactitude une explosion, on se sert de F_s pour ajuster la position des maximums et minimums de surpressions par rapport au temps et on se sert de C_t pour ajuster l'amplitude de ces maximums et minimums.

Toutefois, il y a quelques problèmes avec ces deux paramètres. Par exemple, certaines explosions sans obstacle ne sont jamais en mode turbulent. Dans ce cas, l'ajustement de l'amplitude des maximums et des minimums se fait uniquement à l'aide du paramètre F_s qui est mal adapté à cette tâche. En effet, en augmentant F_s , on augmente la vitesse de propagation et indirectement la turbulence qui à son tour augmente l'amplitude. Il devient alors difficile de trouver une seule valeur de F_s qui permet à la fois d'obtenir la bonne position et la bonne amplitude des maximums et minimums. Dans le cas de jets soniques et supersoniques, l'explosion sera en mode turbulent à cause des niveaux élevés de turbulence générés par la fuite. Ce problème est donc limité aux jets subsoniques.

Une des solutions à ce problème est l'ajustement direct de paramètres physiques propres au gaz étudié. Par exemple, on peut modifier la valeur de la vitesse de combustion de l'hydrogène, qui par défaut est de 3.5 m/s dans ARG, pour augmenter ou diminuer la vitesse ainsi que l'amplitude des ondes de choc. Comme il a été expliqué brièvement dans les sections 3.3.1 et 4.1.2, lors de la combustion d'un gaz la vitesse du front de flamme en mode laminaire varie en fonction de la concentration du gaz. Plus la concentration se rapproche de la valeur stœchiométrique, autour de 29 % (vol) pour l'hydrogène dans l'air par unité de volume, plus la vitesse sera près de la valeur théorique de 3.25 m/s. Par contre, dans le cas où un nuage contient des zones à concentration variable, comme c'est le cas pour un nuage produit par un jet, il devient difficile de trouver une valeur moyenne qui convient à l'ensemble du nuage.

La section 4.3 présente un ensemble de résultats montrant l'impact de ces paramètres sur les surpressions mesurées pour des jets verticaux subsoniques.

4.2 Cas considérés

Cette section présente en détail les spécifications liées aux deux géométries qui furent considérées lors des simulations. Une première géométrie correspondant aux expériences effectuées par *Seifert, H.* et al. [1] fut utilisée pour les jets verticaux. Une deuxième correspondant à un réservoir pressurisé fut utilisée pour les jets horizontaux.

Jets verticaux

Les simulations sur les jets verticaux furent premièrement étudiées pour valider la méthodologie. La section 4.3 présente en détail tous les résultats de ces simulations ainsi que la méthode utilisée pour les obtenir. Trois jets verticaux subsoniques à des vitesses de : 140 m/s, 190 m/s et 250 m/s ont été étudiés. La figure 4.2 montre la géométrie du problème. L'ouverture était de 10 mm de diamètre et était situé à 1 m du sol. Comme les jets sont subsoniques, la pression et la température à l'ouverture correspondent à la pression et la température ambiantes.

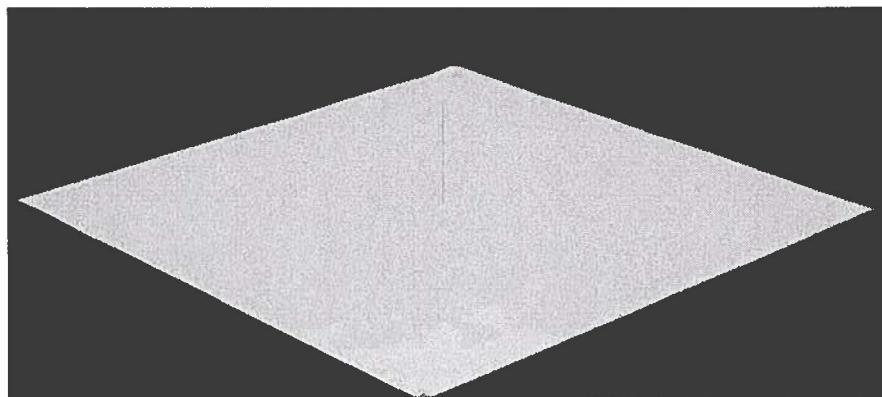


Figure 4.2 Tuyère utilisée lors des simulations de jets verticaux.

Jets horizontaux

Le réservoir utilisé lors des simulations de jets horizontaux est présenté sur la figure 4.3. Trois types de jets furent étudiés en détail : jets subsoniques semblables aux fuites de *Seifert, H.* et al. [1], jet sonique à une vitesse de 1209 m/s et jet supersonique pour une fuite réelle. La géométrie est caractérisée par un réservoir de 150 litres (0.15 m^3) pressurisé à un maximum de 700 bar. Les dimensions externes du réservoir sont de 413

mm de diamètre et 1534 mm de longueur. Les dimensions internes du réservoir sont de 372 mm de diamètre et 1381 mm de longueur. Le réservoir a des extrémités semi-sphériques. L'ouverture de 6mm de diamètre est située à 500 mm du sol à 100 mm de l'axe de symétrie et à une distance de 100 mm de l'extrémité du cylindre, dirigé perpendiculairement à l'axe de symétrie. La température et la pression ambiantes sont de 293.15 K et 101.3 kPa.

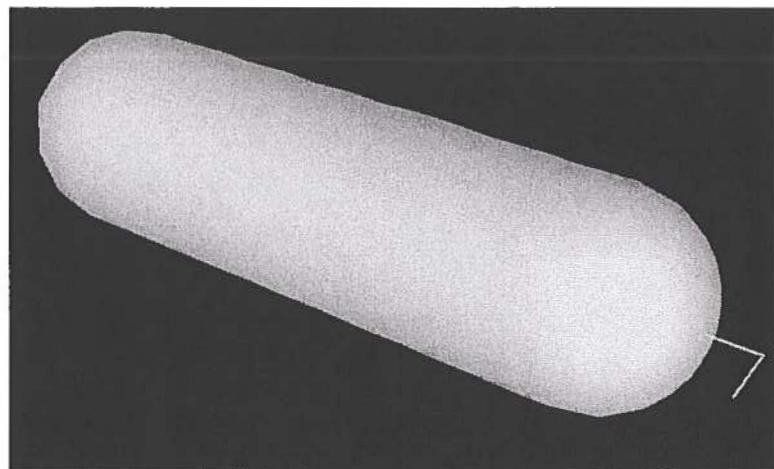


Figure 4.3 Réservoir à haute pression utilisé lors des simulations de jets horizontaux.

Dans le cas des fuites subsoniques, différents cas de dispersions et d'explosions ont été analysés : sans aucun obstacle, avec mur, présence d'un plafond et allumage à différentes distances. Dans le cas des fuites soniques, deux ont été analysées; une avec et une sans plafond. Finalement, une fuite supersonique sans obstacles a été analysée.

4.3 Validation de la méthodologie sur les jets verticaux

L’élaboration et la validation de la méthodologie nécessitent l’utilisation de données expérimentales permettant la comparaison avec les résultats obtenus en simulation. Les expériences de *Seifert, H.* et al. [1] sur les jets d’hydrogène verticaux subsoniques sont bien adaptées à cette tâche. La simplicité des simulations de dispersion subsonique permet d’insister sur la calibration du programme d’explosions. Pour tenter de reproduire les résultats obtenus par *Seifert, H.* et al. [1] trois jets subsoniques à différentes vitesses ont donc été étudiés : 140 m/s, 190 m/s et 250 m/s. Les caractéristiques du domaine présenté à la section 4.2 furent utilisées. Les simulations de dispersions furent effectuées. En premier lieu différents profils de concentrations résultants furent importés dans le programme de combustion. Une série de simulations d’explosion furent par la suite effectuées. L’impact sur les résultats de la variation de différents paramètres de calibration ainsi que de différentes dimensions de maillage fut étudié plus en détail.

4.3.1 Dispersion

La dispersion du jet a été simulée avec Fluent. Les dimensions du domaine de simulation étaient de 5 m de longueur, 5 m de largeur et 11 m de hauteur. Un maillage non structuré de 205 263 cellules avec un plan de symétrie à $y = 2.5$ m fut utilisé. Le modèle de turbulence RNG k- ϵ fut utilisé en accord avec la validation présentée dans la section 4.1.1. Les simulations furent effectuées en mode stationnaire. Il est important de noter que dans le cas réel d’une fuite de réservoir, le débit de la fuite diminue avec le temps. Dans ce cas, les changements de débit, température et pression avec le temps doivent être considérés et la simulation devra être dépendante du temps. Ceci a pour conséquence d’augmenter fortement le temps réel nécessaire pour compléter une simulation. La convergence est aussi beaucoup plus difficile à atteindre, surtout pour des fuites supersoniques. En effet, les effets d’onde de choc et autres discontinuités créées par la vitesse, le débit élevé et la forte pression à l’ouverture nécessitent un maillage extrêmement fin ce qui nécessite l’utilisation d’un pas de temps très petit (de l’ordre de

10^{-8} - 10^{-10} sec). Quoi qu'il en soit, lors de la validation, les jets subsoniques ont été utilisés facilitant ainsi l'amorce des simulations de dispersions. L'étendue du nuage d'hydrogène simulé est donnée dans le Tableau 4.2 et les contours de concentration à 4 % (vol) sont présentés sur la figure 4.4.

Tableau 4.2 Étendue du nuage inflammable simulé pour un jet vertical en fonction de la vitesse de la fuite.

Vitesse de la fuite (m/s)	Étendue du nuage d'hydrogène le long de l'axe x (m) perpendiculaire au jet aux concentrations de			Étendue du nuage d'hydrogène le long de l'axe y (m) perpendiculaire au jet aux concentrations de			Étendue du nuage d'hydrogène le long de l'axe z (m) parallèle au jet aux concentrations de		
	2 %	4 %	15 %	2 %	4 %	15 %	2 %	4 %	15 %
140	0.52	0.36	0.12	0.50	0.33	0.11	5.88	4.15	1.04
190	0.58	0.39	0.12	0.58	0.36	0.11	6.27	4.63	1.11
250	0.60	0.41	0.12	0.60	0.36	0.12	6.82	4.89	1.16

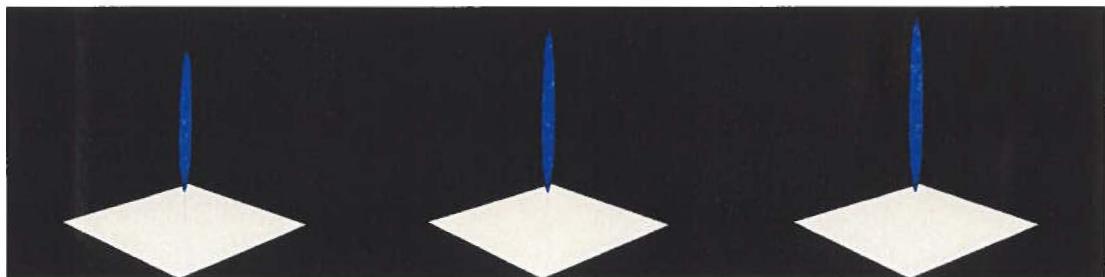


Figure 4.4. Contour de concentration de 4 % (vol), gauche à droite : 140, 190 et 250 m/s

Aucune donnée sur les contours de concentration n'a été fournie par *Seifert, H.* et al. [1]. Pour cette raison, aucune comparaison entre des valeurs expérimentales et les valeurs simulées n'a pu être effectuée sur ces contours de concentration. Tout de même, les modèles utilisés furent au préalable validés par les expériences de *Michael Swain* et al. [12] et les simulations de *Hourri, A* et al [18]. Les résultats obtenus peuvent donc être considérés comme fiables.

4.3.2 Explosion

Une fois la simulation de dispersion terminée, la vitesse ainsi que la concentration du gaz ont été importées de Fluent à AutoReaGas. Le maillage de Fluent étant plus détaillé dans certaines zones que celui d'ARG, un algorithme faisant la moyenne des valeurs de concentration et vitesse fut développé et utilisé lors de l'importation (annexe 1.1 et 1.2). L'allumage s'est fait en définissant une zone de gaz brûlé au centre du nuage inflammable à 0.2 m au dessus du trou. Les valeurs par défaut des paramètres de calibration d'ARG ont été utilisées, soient $F_s = 0.15$ et $C_t = 70$. Dans le cas d'une fuite subsonique, une analyse détaillée a montré que l'influence de ces paramètres de calibration sur les résultats était minime. Pour trois vitesses de fuite, les suppressions simulées résultantes de l'allumage sont données dans le Tableau 4.3. Trois distances à partir du point d'allumage sont considérées : 2 m, 5 m et 10 m. Deux valeurs de vitesse de combustion, correspondant à un des paramètres variables d'ARG, sont présentées.

La première vitesse de combustion considérée, soit 3.5 m/s, correspond à la valeur de la vitesse de flamme laminaire dans un mélange d'hydrogène à une concentration d'environ 42 % (vol) d'hydrogène dans l'air. Par défaut, ARG utilise cette valeur de vitesse de combustion pour l'hydrogène. L'utilisation de cette valeur nous mène à trouver des suppressions plus élevées que ce qui a été reporté par *Seifert, H.* et al. [1] comme le montrent les tableaux 4.3 et 4.4. Pour obtenir des résultats semblables à ceux trouvés expérimentalement, la vitesse de combustion a dû être diminuée. Ces valeurs ajustées de la vitesse de combustion représentent la vitesse de combustion moyenne réelle dans le nuage. Comme il a été expliqué dans la section 4.1.2 et 4.1.3, cette vitesse est directement liée à la concentration présente dans le nuage de gaz. Plus la concentration se rapproche de la valeur stœchiométrique, plus la vitesse de flamme sera près de la valeur théorique (3.25 m/s). Comme la concentration moyenne des zones d'un nuage produit par un jet subsonique n'atteint pas la valeur stœchiométrique, on doit s'attendre à ce que la vitesse de combustion présente dans le nuage soit en moyenne beaucoup plus basse que la valeur théorique. Les résultats des simulations tendent à confirmer cette hypothèse. En effet, comme le montrent les résultats des tableaux 4.3 et 4.4, plus la vitesse de la fuite

augmentait, plus la vitesse de combustion devait être élevée pour réussir à reproduire les résultats expérimentaux. Une vitesse de fuite plus élevée produit un nuage à concentration moyenne plus élevé donc contenant des zones à concentration plus près de la valeur stœchiométrique. Cette information fut utilisée lors des simulations soniques et supersoniques puisque les nuages produits par de telles fuites contiennent des zones à concentration stœchiométrique beaucoup plus volumineuse. L'utilisation de la valeur par défaut fut donc plus appropriée dans ces cas.

Tableau 4.3 Surpressions simulées en fonction de la distance et de la vitesse de combustion pour un jet d'hydrogène vertical.

Vitesse de la fuite (m/s)	Vitesse de combustion (m/s) – ARG	Surpression à 2 m (Pa)	Surpression à 5 m (Pa)	Surpression à 10 m (Pa)
140	3.50	236	140	50.2
	1.00	57.3	25.8	12.9
190	3.50	418	202	66.9
	1.15	64.3	31.6	15.6
250	3.50	429	214	70.0
	1.35	87.6	40.2	19.1

Tableau 4.4 Surpressions expérimentales obtenues par *Seifert, H.* et al. [1] en fonction de la distance pour un jet d'hydrogène vertical.

Vitesse de la fuite (m/s)	Surpression à 2 m (pascal)	Surpression à 5 m (pascal)	Surpression à 10 m (pascal)
140	57 ± 22	19 ± 8	12 ± 4
190	61 ± 22	25 ± 7	16 ± 4
250	75 ± 25	35 ± 10	22 ± 6

La figure 4.5 montre une tranche du contour de surpression présente dans l'explosion de la fuite de 250 m/s. On remarque la prédominance de l'onde de choc se dirigeant vers le haut suivant la direction de la fuite. Les surpressions produites par de telles fuites ne causeraient pratiquement aucun dommage dû à leur faible intensité.

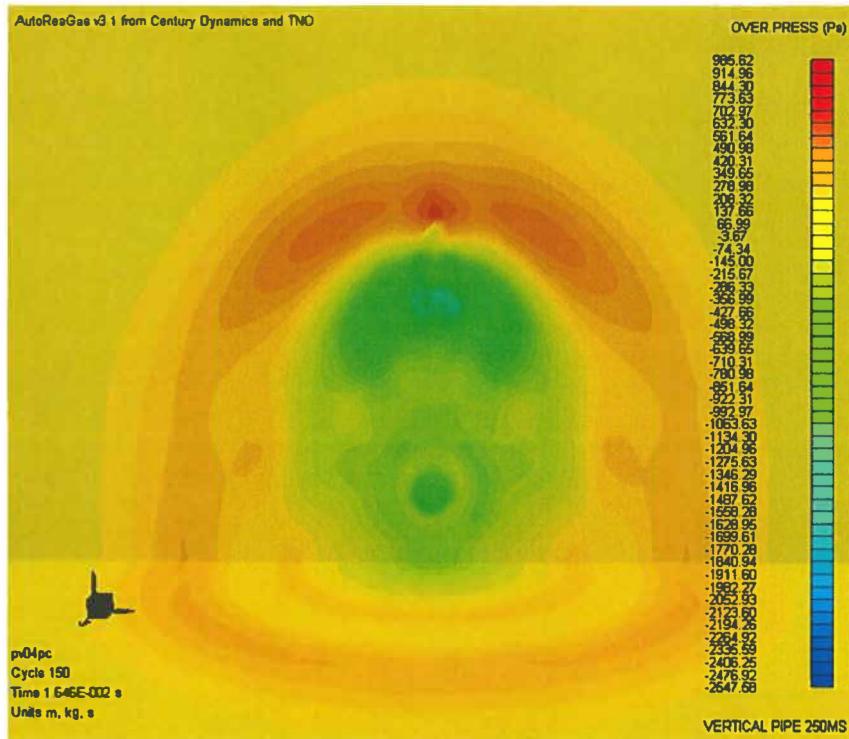


Figure 4.5 Surpressions 0.016 sec après l'allumage d'un nuage inflammable d'hydrogène provenant d'une fuite de 250 m/s à travers un trou de 10 mm de diamètre à l'extrémité d'un tuyau vertical en fonction de la distance.

En ce qui concerne les simulations qui utilisent les valeurs réduites de la vitesse combustion, le temps de montée de l'onde de choc (définition sur la figure 4.6) était essentiellement constant et égal à 0.013 seconde pour une fuite de 250 m/s. Ceci correspond à environ 4 fois la valeur expérimentale trouvée par *Seifert, H. et al.* [1]. Un même rapport fut observé entre les simulations de jets à 140 m/s et 190 m/s et les résultats expérimentaux. Lorsque la valeur par défaut de la vitesse de combustion est utilisée, les valeurs simulées sont environ 2 fois plus élevées que les valeurs expérimentales. Les tableaux 4.5 et 4.6 montrent en détail ces résultats.

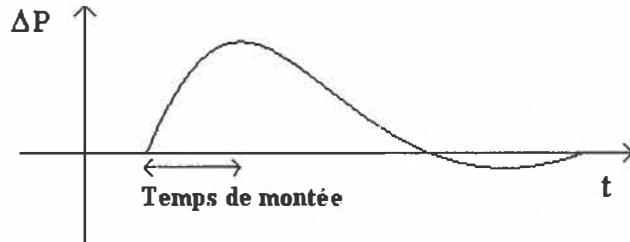


Figure 4.6 Définition du temps de montée.

Tableau 4.5 Temps de montée simulés en fonction de la distance et de la vitesse de combustion pour un jet d'hydrogène vertical.

Vitesse de la fuite (m/s)	Vitesse de combustion (m/s) – ARG	Temps de montée à 2 m (ms)	Temps de montée à 5 m (ms)	Temps de montée à 10 m (ms)
140	3.50	6.00	8.00	5.00
	1.00	15.0	15.0	17.0
190	3.50	6.20	4.75	4.50
	1.15	14.5	15.0	17.0
250	3.50	6.00	5.00	4.50
	1.35	12.5	13.0	14.0

Tableau 4.6 Temps de montée expérimentaux obtenues par Seifert, H. et al. [1] en fonction de la distance pour un jet d'hydrogène vertical.

Vitesse de la fuite (m/s)	Temps de montée à 2 m (ms) ± 0.5	Temps de montée à 5 m (ms) ± 0.5	Temps de montée à 10 m (ms) ± 0.5
140	3.1	3.9	3.1
190	3.0	3.0	3.0
250	2.9	2.1	2.9

Une zone centrale cubique de 10 cm de côté formait le maillage structuré principal d'ARG. L'allumage se faisait dans cette zone. On peut voir le maillage utilisé dans ARG sur la Figure 4.7.

Une des conséquences du processus d'importation entre le maillage non structuré de Fluent et le maillage structuré d'ARG est l'inflation de la masse du nuage d'hydrogène dans ARG. Les moyennes effectuées sur les concentrations et vitesse avaient pour effet d'augmenter la masse du gaz d'environ 25 % lorsqu'un maillage central cubique de 10 cm de côté était utilisé. Le Tableau 4.7 présente les résultats pour chacune des fuites.

Tableau 4.7 Volume d'hydrogène en fonction de la vitesse de fuite et du programme de simulation.

Vitesse de la fuite (m/s)	Volume de H ₂ dans Fluent (m ³)	Volume de H ₂ dans ARG (m ³)
140	0.75	1.09
190	0.99	1.29
250	1.31	1.47

Pour s'assurer que les résultats obtenus étaient indépendants du maillage utilisé, différentes dimensions de cellules ont été testées. Deux dépendances sur le maillage ont été découvertes. Les deux sont directement reliées à la zone centrale, formée de cellules cubiques, qui contient le nuage de gaz initialement.

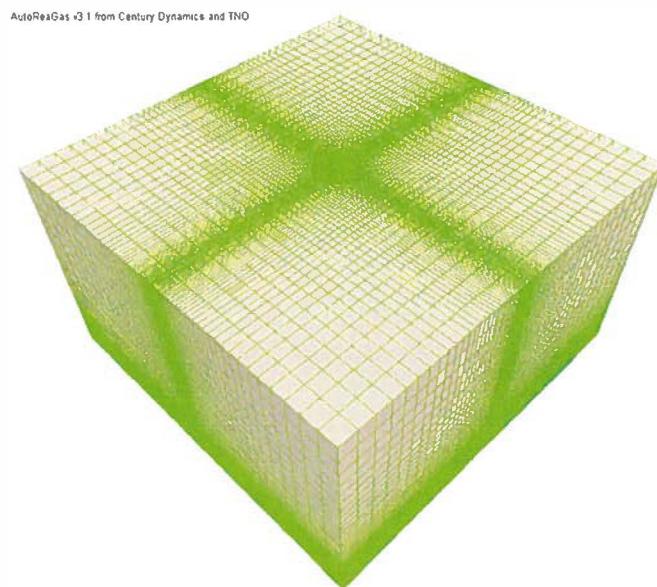


Figure 4.7 Maillage structuré utilisé lors des simulations avec AutoReaGas.

Il a été trouvé, que pour minimiser la dépendance sur le maillage, une zone cubique centrale assez grande pour contenir tout le gaz à la fin de son expansion, lors de l'explosion, était essentielle. L'ajout de 5 cellules cubiques tout autour du nuage initial était suffisant pour obtenir un maillage indépendant des résultats. Augmenter le nombre de cellules à plus de 5 n'avait que très peu d'effet sur les résultats. La figure 4.8 montre le maillage, les jauge et le nuage importés dans ARG. On remarque sur cette figure, la zone structurée cubique qui encapsule le nuage bien au-delà de ses limites.

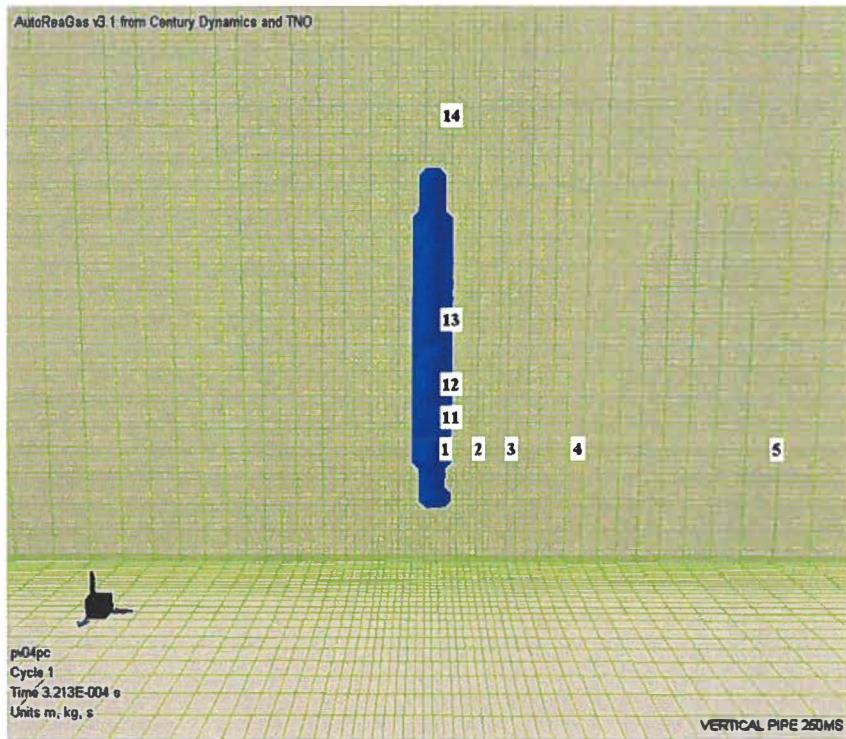


Figure 4.8 Maillage structuré, nuage importé et jauge utilisés dans AutoReaGas pour une fuite verticale de 250 m/s.

Il a été aussi trouvé que les surpressions prédictes étaient dépendantes de la dimension des cellules cubiques centrales. On voit au tableau 4.8 que plus les cellules étaient petites, plus la surpression prédictaient était grande. Tous les résultats présentés dans ce mémoire ont été simulés avec un maillage central de 0.1 cm de côté. Ce maillage est celui qui correspondait le mieux au contour de concentration de 2 % (vol) d'hydrogène dans l'air obtenu avec les simulations par Fluent.

Tableau 4.8 Surpressions en fonction de la dimension des cellules cubiques centrales pour un jet de 250 m/s utilisant une vitesse de combustion pour l'hydrogène de 1.35 m/s.

Dimension des cellules cubiques (m)	Surpression à 2 m (pascal)	Surpression à 5 m (pascal)	Surpression à 10 m (pascal)	Volume de H ₂ dans ARG (m ³)
0.10	87.6	40.2	19.1	1.47
0.15	72.4	36.6	16.5	1.94
0.20	55.9	29.6	14.9	2.64

5. Résultats et discussion

L'essentiel de ce mémoire porte sur les simulations de jets d'hydrogène horizontaux à proximité du sol. Tel que mentionné précédemment, l'objectif principal de ce travail est la simulation de la dispersion et de l'explosion d'une fuite à travers une ouverture de 6 mm de diamètre provenant d'un réservoir d'hydrogène pressurisé à 700 bar. Trois séries de simulations ont été effectuées. Chacune des séries correspond à un des trois modes de propagation d'un jet de gaz au travers d'une ouverture. Des simulations subsoniques semblables à celles effectuées lors de la validation sur des jets verticaux furent premièrement simulées. Des simulations de jets soniques à débit constant furent par la suite simulées. Et finalement, une simulation de jet supersonique qui considère une fuite de réservoir à débit, température et pression variable, fut simulée. Cette dernière simulation a permis d'atteindre l'objectif principal de ce travail. Cette section présente les résultats et les conclusions liés à ces séries de simulations. La figure 5.1 montre la géométrie générale du problème. Les caractéristiques du cylindre présenté à la section 4.2 furent utilisées.

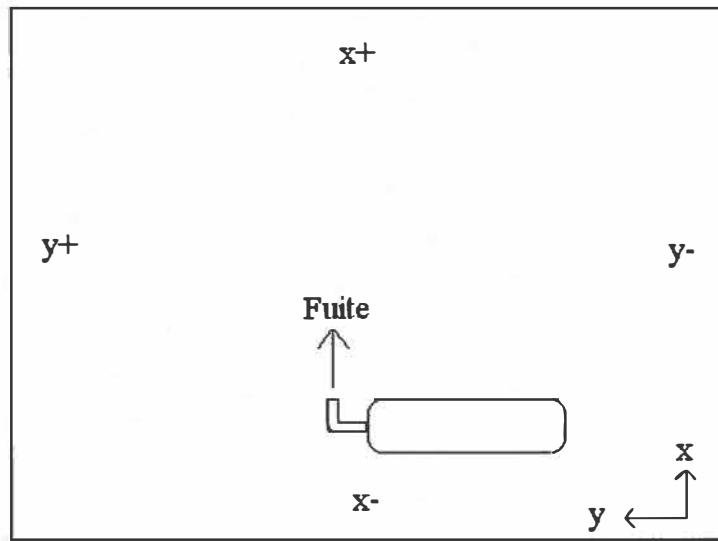


Figure 5.1 Géométrie schématisée du problème étudié, vue de haut, origine au centre de l'ouverture.

5.1 Subsonique

Bien qu'à la connaissance de l'auteur aucune donnée expérimentale sur l'allumage ne soit disponible pour des jets subsoniques horizontaux, il reste intéressant de comparer les résultats de ces simulations avec les données fournies par *Seifert, H.* et al. [1] pour des jets verticaux. La dispersion et l'explosion de trois jets horizontaux de 140 m/s, 190 m/s et 250 m/s correspondant aux jets étudiés lors de la validation, ont donc été simulées.

5.1.1 Dispersion

Pour la dispersion, un domaine de 15 m de longueur, 8 m de largeur et 8 m de hauteur formé d'un maillage non structuré de 279 026 éléments fut utilisé tel qu'illustré sur la figure 5.2. La pression et la température à la sortie étaient de 101.3 kPa et 293.15 K respectivement. Les simulations ont toutes été effectuées en régime stationnaire. L'étendue du nuage telle qu'obtenue pour les trois débits est présentée au tableau 5.1. Une simulation de jet avec une vitesse de 250 m/s fut aussi effectuée en présence d'un mur à 1 m de l'ouverture. Le mur était de 0.5 m de haut, 1 m de large et 0.5 m de profondeur. Le tableau 5.2 présente l'étendue du nuage pour cette simulation. On remarque que la présence du mur a très peu d'influence sur le nuage. Ceci est dû à la faible vitesse du jet qui ne touche que légèrement au mur. La figure 5.3 montre les contours de concentration à 2 % (vol), 4 % (vol) et 15 % (vol) d'hydrogène pour un jet de 250 m/s avec et sans le mur.

Même si la vitesse des jets horizontaux est la même que celle des jets verticaux étudiés précédemment dans la section 4.3.1, l'étendue des nuages sur l'axe principal des jets horizontaux est beaucoup moins importante que celle des jets verticaux. Par exemple, pour le jet horizontal de 250 m/s, le contour de concentration de 2 % (vol) est 65 % moins long que pour le jet vertical. Cette réduction de l'étendue peut en partie s'expliquer par le diamètre de l'ouverture qui est plus petit dans le cas horizontal. De plus, les forces de bouée ont un impact sur l'étendue du nuage. On remarque que la forme du nuage

horizontal est différente de celle du nuage vertical. Ceci s'explique principalement par l'effet de la gravité qui agit perpendiculairement à la direction de propagation du gaz pour le jet horizontal comparativement au jet vertical qui est influencé parallèlement à sa direction de propagation.

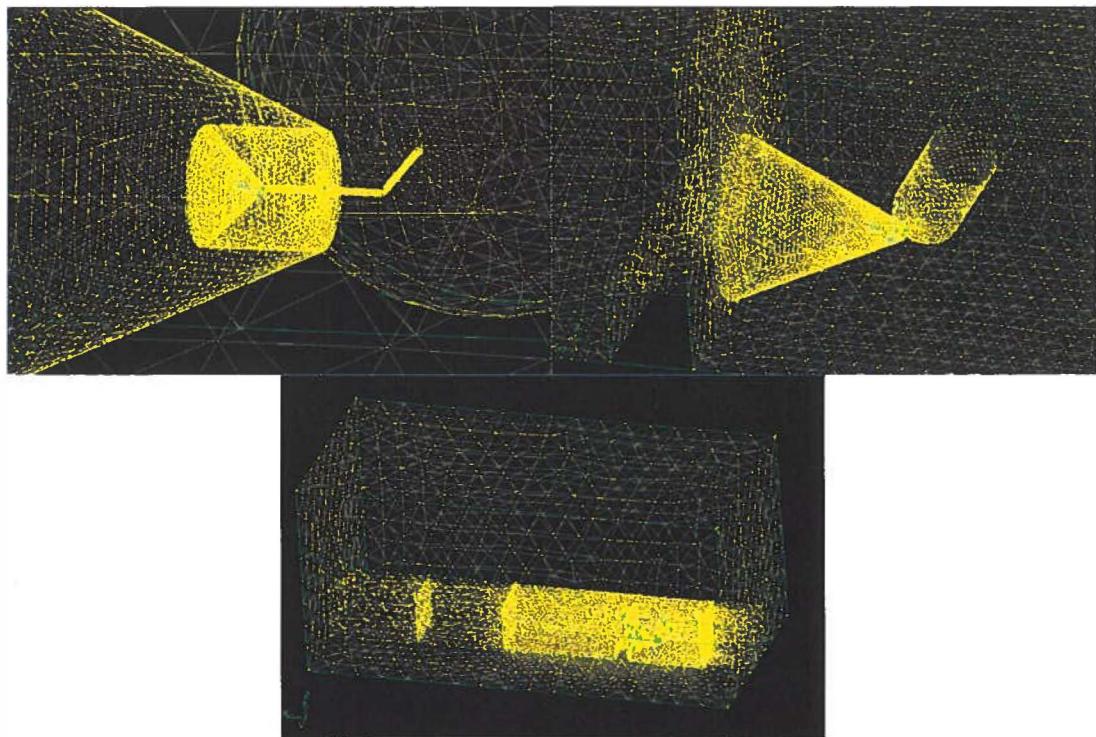


Figure 5.2 Maillage utilisé dans Fluent (avec mur). La première et la deuxième image montrent un maillage plus raffiné près de l'ouverture. La troisième image illustre le maillage du domaine entier.

Tableau 5.1 Étendue du nuage inflammable simulé pour un jet horizontal subsonique en fonction de la vitesse de la fuite.

Vitesse de la fuite (m/s)	Étendue du nuage d'hydrogène le long de l'axe x (m) parallèle au jet aux concentrations de			Étendue du nuage d'hydrogène le long de l'axe y (m) perpendiculaire au jet aux concentrations de			Étendue du nuage d'hydrogène le long de l'axe z (m) perpendiculaire au jet aux concentrations de		
	2 %	4 %	15 %	2 %	4 %	15 %	2 %	4 %	15 %
140	1.74	1.35	0.24	0.62	0.37	0.10	1.91	0.82	0.07
190	2.03	1.55	0.27	0.49	0.29	0.09	2.05	0.78	0.06
250	2.35	1.77	0.27	0.79	0.39	0.09	2.11	0.80	0.07

Tableau 5.2 Étendue du nuage inflammable simulé pour un jet horizontal subsonique en fonction de la vitesse de la fuite (mur à 1 m en avant de l'ouverture).

Vitesse de la fuite (m/s)	Étendue du nuage d'hydrogène le long de l'axe x (m) parallèle au jet aux concentrations de			Étendue du nuage d'hydrogène le long de l'axe y (m) perpendiculaire au jet aux concentrations de			Étendue du nuage d'hydrogène le long de l'axe z (m) perpendiculaire au jet aux concentrations de		
	2 %	4 %	15 %	2 %	4 %	15 %	2 %	4 %	15 %
250	2.31	1.69	0.40	0.77	0.29	0.07	1.74	0.68	0.08

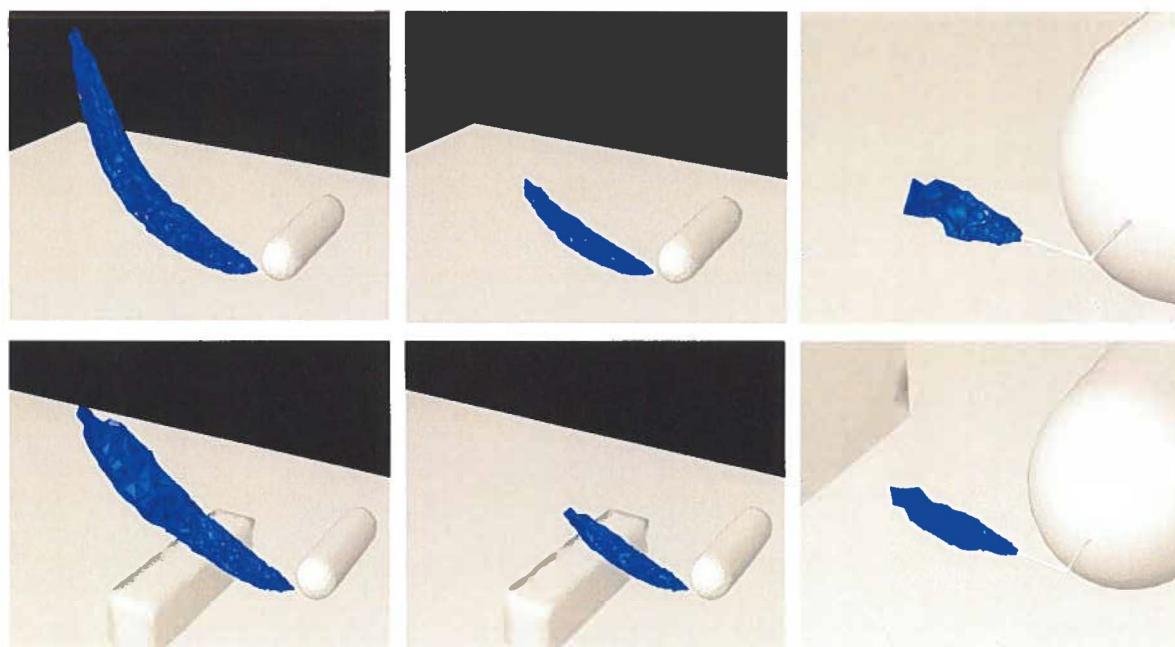


Figure 5.3 Contours de la concentration d'hydrogène formée par une fuite de 250 m/s passant à travers une ouverture de 6mm de diamètre d'un cylindre en l'absence (dessus) et présence (dessous) d'un mur à 1 m de l'ouverture. De gauche à droite, les contours de concentration sont : 2 % (vol), 4 % (vol) et 15 % (vol).

5.1.2 Explosion

Pour les explosions, un domaine de 102 m de longueur, 101 m de largeur et 51 m de hauteur formé d'un maillage structuré de 627 816 éléments fut utilisé. Les valeurs par défaut des paramètres de calibration F_s et C_t ont été utilisées. La zone centrale était formée de cubes de 0.1 m de côté. Quatre séries d'explosion ont été étudiées : deux séries avec différentes positions du point d'allumage, une autre avec l'ajout d'un mur en avant de la fuite et une dernière avec l'ajout d'un plafond.

La première série d'explosions considère un allumage effectué à 0.5 m au-devant de l'ouverture de la fuite. Le tableau 5.3 montre l'amplitude incidente des surpressions simulées à différentes distances du point d'allumage, perpendiculaires à la direction du jet. Les vitesses de combustion obtenues lors de la validation présentée dans la section 4.3.2 ont été réutilisées permettant ainsi de faire la comparaison entre les deux simulations. On remarque que les surpressions produites par les jets horizontaux sont beaucoup plus faibles que celles produites par les jets verticaux. Ceci peut en partie s'expliquer par la forme des deux nuages qui est différente. Bien que les deux jets aient la même vitesse, la répartition de la concentration se fait différemment selon que la propagation du nuage se fait à la verticale ou à l'horizontale. La vitesse de combustion moyenne déduite pour un nuage vertical n'est donc plus nécessairement valide pour un nuage horizontal. C'est en partie pour cette raison que la valeur par défaut de la vitesse de combustion (3.5 m/s) fut utilisée pour l'ensemble des simulations horizontales. La complexité accrue de la forme du nuage horizontal a eu aussi un impact sur l'importation des données de Fluent à ARG. En effet, le tableau 5.8 montre qu'une assez grande différence existe entre la quantité d'hydrogène présente dans le maillage de Fluent comparativement à celle présente dans le maillage d'ARG après le processus d'importation.

Tableau 5.3 Amplitude maximale de la surpression incidente en fonction de la distance pour un jet d'hydrogène horizontal subsonique obtenue avec ARG (Allumage 0.5 m en avant de l'ouverture, sans mur, jauge du côté y+).

Vitesse de la fuite (m/s)	Vitesse de combustion (m/s) – ARG	Surpression à 2 m (pascal)	Surpression à 5 m (pascal)	Surpression à 10 m (pascal)
140	3.50	72.0*	26.5*	9.00*
	1.00	13.5	4.80	1.90
190	3.50	118*	44.6*	14.4*
	1.15	25.4	9.71	3.90
250	3.50	138*	52.0*	16.3*
	1.35	35.1	13.8	6.10

*Les maximums secondaires étaient de plus forte amplitude

Les simulations où une vitesse de combustion de 3.5 m/s fut utilisée sont caractérisées par un deuxième pic de surpression de plus forte amplitude que le pic initial. La figure 5.4 montre l'allure des deux maximums pour un jet de 250 m/s. Ce dédoublement d'ondes de choc s'explique par la combustion des gaz résiduels près de l'ouverture. En effet, initialement le gaz près de l'ouverture est à concentration trop élevée pour s'allumer. Le souffle produit par l'explosion initiale gonfle et disperse le nuage réduisant ainsi sa concentration au dessous des limites supérieures d'inflammabilité. Le tableau 5.4 montre en détail les surpressions maximales des pics secondaires simulées pour les trois vitesses de fuites.

Tableau 5.4 Amplitude maximale de la surpression la plus puissante en fonction de la distance pour un jet d'hydrogène horizontal subsonique obtenue avec ARG (Allumage 0.5 m en avant de l'ouverture, sans mur, jauge du côté y+).

Vitesse de la fuite (m/s)	Vitesse de combustion (m/s) – ARG	Surpression à 2 m (pascal)	Surpression à 5 m (pascal)	Surpression à 10 m (pascal)
140	3.50	188.0	74.0	22.0
190	3.50	211.4	74.0	22.4
250	3.50	155.2	68.2	

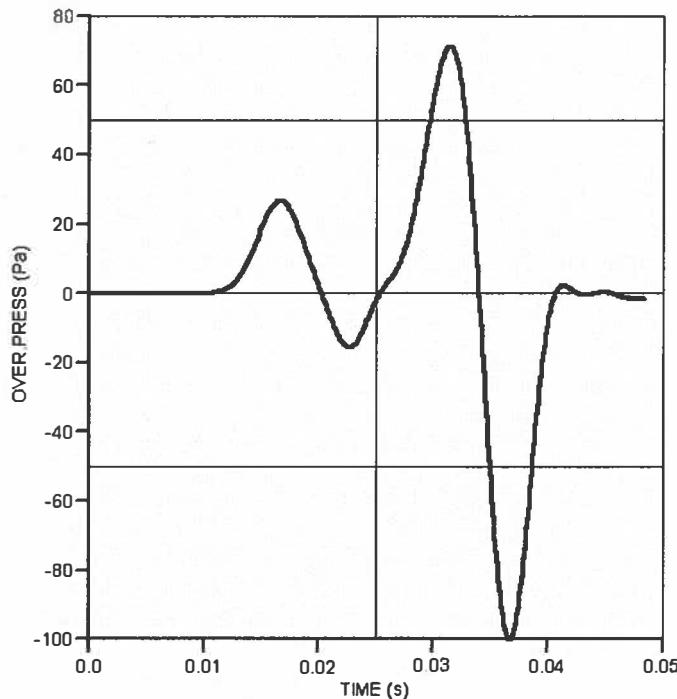


Figure 5.4 Courbe de surpression à 5 m du point d'allumage d'un jet horizontal de 250 m/s. On voit clairement le second maximum de plus forte amplitude que le maximum incident (Allumage à 0.5m de l'ouverture, sans mur, jauge du côté y+).

La deuxième série d'explosions considère un allumage effectué à 0.25 m au-devant de l'ouverture de la fuite. Ceci est 0.25 m plus près de l'ouverture que pour la première série d'explosions et seulement 0.05 m plus loin de l'ouverture que pour les simulations de jets verticaux. Seule la fuite de 250 m/s fut simulée. Une vitesse de combustion de 3.5 m/s fut utilisée. Le tableau 5.5 présente les surpressions maximales mesurées à quatre distances dans la même direction que la fuite, perpendiculairement à la fuite et en arrière de la fuite. On remarque que les surpressions maximales pour la première et la deuxième série d'explosion restent les mêmes le long des jauge perpendiculaires à la fuite (tableau 5.4 et 5.5) soit environ 155 pascals à 2 m et 68 pascals à 5 m et ceci malgré le fait que l'allumage s'effectue plus près de l'ouverture dans la deuxième série.

Tableau 5.5 Amplitude maximale de la surpression en fonction de la distance pour un jet d'hydrogène horizontal subsonique obtenu avec ARG (fuite de 250 m/s, vitesse de combustion laminaire 3.5 m/s, allumage 0.25 m en avant de l'ouverture).

Direction des jauge	Surpression à 2 m (pascal)	Surpression à 5 m (pascal)	Surpression à 10 m (pascal)	Surpression à 15 m (pascal)
Avant (x+)	226	60.6	18.9	5.68
Coté (y+)	156*	68.0*	16.6	5.06
Derrière (x-)	153*	59.6*	14.6	4.65

*Deuxième maximum; premier maximum était de plus faible amplitude

La figure 5.5 montre une représentation en trois dimensions de l'onde de surpression en fonction de la distance se déplaçant dans le plan perpendiculaire à la direction du jet 0.036 sec après l'allumage pour a) et sur le plan parallèle peu de temps après pour b). La zone rouge-jaune représente l'onde de surpression tandis que la zone bleue représente la sous-pression, comme le montre l'échelle à droite de a). On remarque sur l'image b) que l'intensité de la surpression au-devant du jet est plus élevée que celle de la surpression en arrière. Ceci est caractéristique des explosions de jets de gaz.

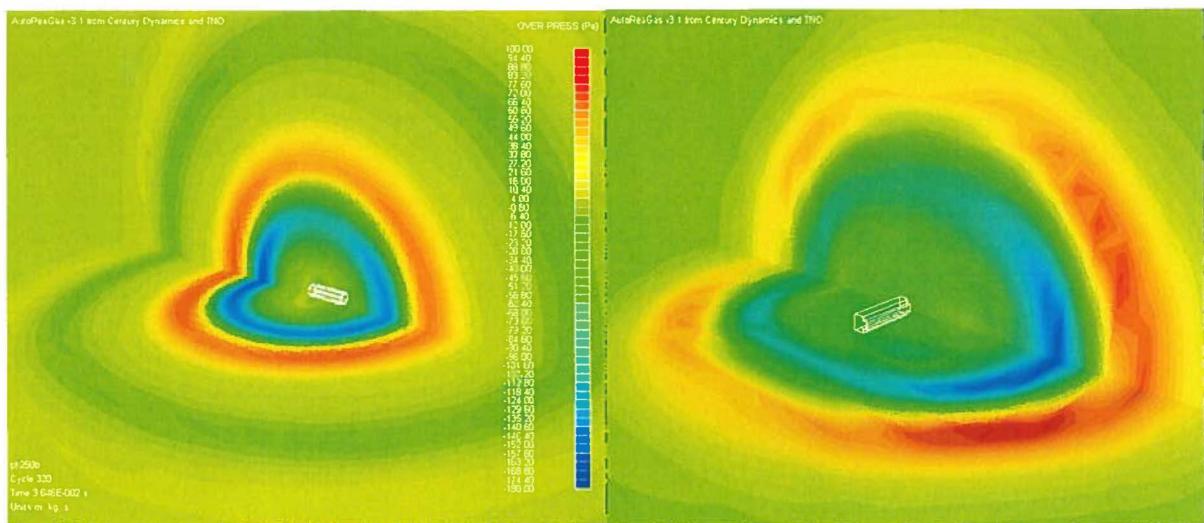


Figure 5.5 Surpressions générées par l'allumage d'un jet d'hydrogène de 250 m/s. a) Image à gauche : plan perpendiculaire au jet (parallèle aux jauge). b) Image à droite : plan parallèle au jet (perpendiculaire aux jauge).

La troisième série d'explosions considère une fuite de 250 m/s avec un mur placé à 1 m au-devant de l'ouverture. Le tableau 5.6 montre les surpressions maximales mesurées à quatre distances dans la même direction que la fuite, perpendiculairement à la fuite et en arrière de la fuite. Comparativement aux résultats obtenus précédemment (tableau 5.5), on remarque que l'ajout du mur a diminué la surpression mesurée à 2 m du point d'allumage d'environ 15 %. Par contre, la surpression mesurée à 5 m du point d'allumage, en présence du mur, était 17 % plus élevée. Donc pour un jet subsonique la surpression est atténuée directement en arrière du mur, mais la turbulence créée par le mur, semble augmenter légèrement l'amplitude l'onde de choc à plus longue distance. Le même phénomène est observé à 10 m et 15 m pour les surpressions mesurées perpendiculairement et derrière le jet. Il est important de noter que les surpressions qui sont étudiées ici sont de très faible intensité. Les phénomènes observés pour des jets subsoniques ne se reproduiront pas nécessairement lors des simulations d'explosions de plus grande envergure.

Tableau 5.6 Amplitude maximale de la surpression en fonction de la distance pour un jet d'hydrogène horizontal subsonique obtenue avec ARG (fuite de 250 m/s, vitesse de combustion laminaire 3.5 m/s, allumage 0.25 m en avant de l'ouverture, avec mur à 1 m de l'ouverture).

Direction des jauge	Surpression à 2 m (pascal)	Surpression à 5 m (pascal)	Surpression à 10 m (pascal)	Surpression à 15 m (pascal)
Avant (x+)	191	72.6	24.0	9.84
Côté (y+)	193	66.0	19.7	9.14
Derrière (x-)	121	49.2	20.0*	9.47

*Deuxième maximum; premier maximum était de plus faible amplitude

La figure 5.6 montre une représentation en trois dimensions de l'évolution de l'onde de surpression en fonction de la distance se déplaçant dans le plan parallèle à la direction du jet. Les zones rouge-jaune représentent les ondes de surpression tandis que les zones bleues représentent les ondes de sous pression. La surpression réfléchie est très bien illustrée par la zone en demi-lune rouge directement au-devant du mur.

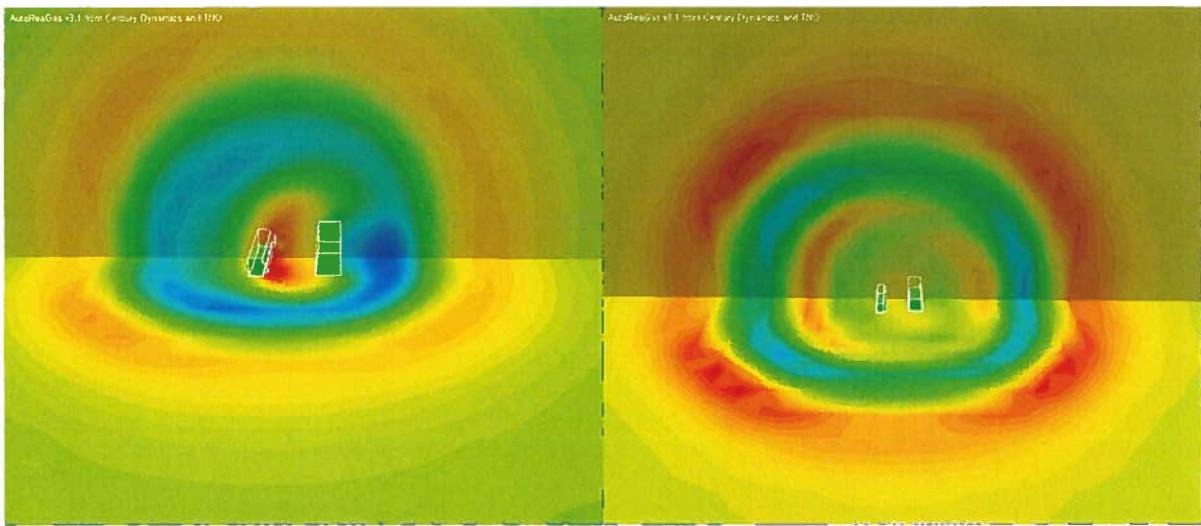


Figure 5.6 Surpressions générées par l'allumage d'un jet d'hydrogène de 250 m/s avec un mur à 1 m en avant de l'ouverture. Plan parallèle au jet et sol illustré. On remarque sur les deux images l'évolution de l'onde de choc réfléchie par le mur.

La quatrième série d'explosions considère une fuite de 250 m/s avec un plafond situé à 4 m au dessus du sol. Le plafond couvrait tout le domaine, limitant la propagation des ondes de choc au dessous du plafond. Ceci correspond à un domaine semi confiné. Le tableau 5.7 présente les surpressions maximales mesurées à quatre distances dans la même direction que la fuite, perpendiculairement à la fuite et en arrière de la fuite. Comme le montrent les données du tableau 5.7, la présence du plafond a eu pour effet d'amplifier légèrement les ondes de choc. Ceci peut s'expliquer par la turbulence accrue produite par les réflexions successives des ondes de choc sur le plafond et le sol. Ce phénomène est mesuré par les jauge à plus longue distance. En effet, lorsqu'ils s'éloignent du point d'allumage le deuxième et le troisième maximum de plus faibles amplitudes décroisent moins rapidement que le premier maximum qui initialement est de plus fortes amplitudes. Plus les ondes de choc s'éloignent du point d'allumage, plus la position de l'amplitude maximale se déplace vers le deuxième et le troisième maximum.

Tableau 5.7 Amplitude maximale de la surpression en fonction de la distance pour un jet d'hydrogène horizontal subsonique obtenu avec ARG (fuite de 250 m/s, vitesse de combustion laminaire 3.5 m/s, allumage 0.25 m en avant de l'ouverture, avec plafond à 4 m).

Direction des jauge	Surpression à 2 m (pascal)	Surpression à 5 m (pascal)	Surpression à 10 m (pascal)	Surpression à 15 m (pascal)
Avant (x+)	246	68.5	30.9**	21.2**
Coté (y+)	192*	61.6	26.1**	18.7**
Derrière (x-)	184*	53.6**	31.7**	25.0**

*Deuxième maximum; premier maximum était de plus faible amplitude

**Troisième maximum; premier et deuxième maximum étaient de plus faibles amplitudes

La figure 5.7 montre une représentation en trois dimensions de l'évolution de l'onde de surpression en fonction de la distance se déplaçant dans le plan parallèle à la direction du jet. Les zones rouge-jaune représentent les ondes de surpression tandis que les zones en vert pâle représentent les ondes de sous pression. Le plafond est représenté par la bande verte au haut de l'image.

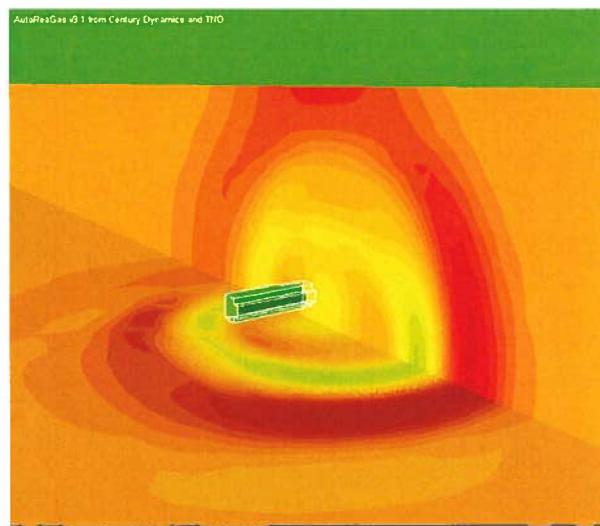


Figure 5.7 Surpression générée par l'allumage d'un jet d'hydrogène de 250 m/s en présence d'un plafond (en vert). Plan parallèle au jet et au sol illustrés.

Finalement, le tableau 5.8 montre le volume d'hydrogène présent dans les maillages de Fluent et d'ARG pour une même vitesse de fuite. La complexité de la forme du nuage horizontal a eu un impact sur le volume occupé par le nuage d'hydrogène lors de son importation. Le volume de gaz dans le domaine d'ARG est fortement exagéré, soit près de 50 % plus volumineux. Cette différence s'explique principalement par le maillage non structuré très raffiné utilisé par Fluent comparativement au maillage cubique plus grossier d'ARG.

Tableau 5.8 Volume d'hydrogène en fonction de la vitesse de fuite et du programme de simulation pour le maillage horizontal.

Vitesse de la fuite (m/s)	Volume de H ₂ dans Fluent (m ³)	Volume de H ₂ dans ARG (m ³)
140	0.150	0.276
190	0.215	0.355
250	0.290	0.449

5.2 Sonique

Une série de simulations fut aussi effectuée pour un jet sonique se propageant à 1209 m/s correspondant à un débit de 3.55 g/s. Tout comme les jets subsoniques, aucune donnée expérimentale n'a pu être trouvée pour fin de comparaison. Uniquement une simulation d'explosion sans plafond a été effectuée.

5.2.1 Dispersion

Pour la dispersion, un domaine de 15 m de longueur, 8 m de largeur et 8 m de hauteur formé d'un maillage non structuré de 562 939 éléments fut utilisé. La pression et la température à la sortie étaient de 101.3 kPa et 250 K respectivement. Les simulations ont été effectuées en régime stationnaire. Une simulation avec un plafond placé à 3 m au dessus du sol couvrant toute l'étendue du domaine ainsi qu'une autre sans plafond furent effectuées. L'étendue du nuage telle qu'obtenue pour les deux géométries est présentée sur le tableau 5.9. On remarque que la présence du plafond a peu d'impact sur le nuage pour des contours de concentration supérieure à 4 % (vol). Par contre, l'impact du plafond commence à se faire sentir de façon plus importante pour des concentrations inférieures à 2 % (vol). La figure 5.8 montre les contours de fractions molaires à 0.5 % (vol), 2 % (vol) et 4 % (vol).

Tableau 5.9 Étendue du nuage inflammable simulé pour un jet horizontal sonique en fonction de la vitesse de la fuite.

Vitesse de la fuite 1209 m/s	Étendue du nuage d'hydrogène le long de l'axe x (m) parallèle au jet aux concentrations de			Étendue du nuage d'hydrogène le long de l'axe y (m) perpendiculaire au jet aux concentrations de			Étendue du nuage d'hydrogène le long de l'axe z (m) perpendiculaire au jet aux concentrations de		
	2 %	4 %	15 %	2 %	4 %	15 %	2 %	4 %	15 %
Sans plafond	7.04	3.34	0.86	0.63	0.37	0.10	2.32	0.41	0.10
Plafond à 3m	7.85	3.58	0.88	0.70	0.38	0.10	1.77	0.44	0.10

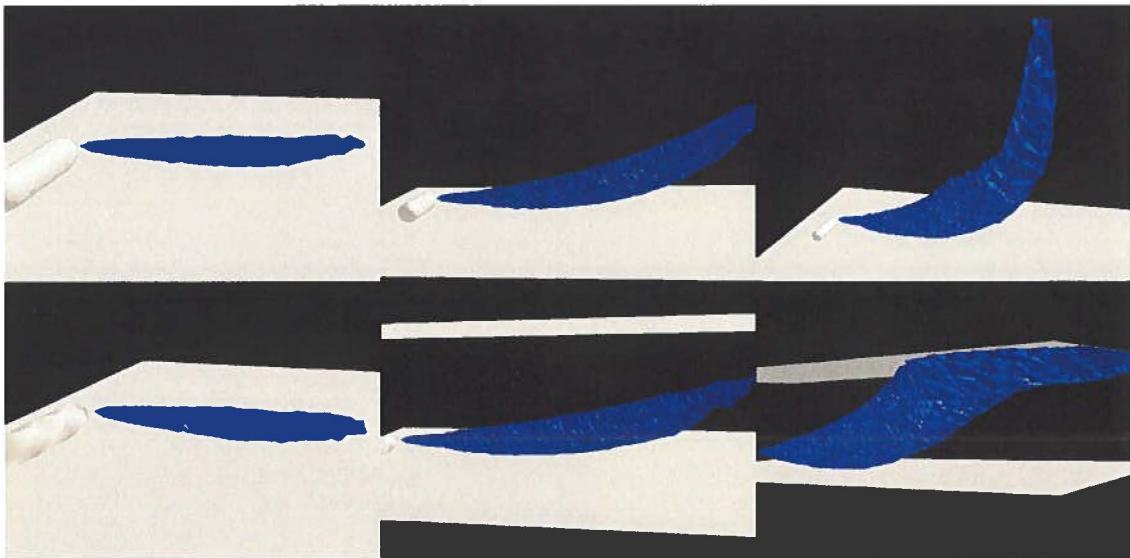


Figure 5.8 Contours de la concentration d'hydrogène formés par une fuite de 1209 m/s, sonique, passant à travers une ouverture de 6mm de diamètre d'un cylindre en l'absence (dessus) et présence (dessous) d'un plafond à 3 m du sol. De gauche à droite, la concentration des contours est 4 % (vol), 2 % (vol) et 0.5 % (vol).

5.2.2 Explosion

Pour l'explosion, un domaine de 88.9 m de longueur, 81.8 m de largeur et 43.1 m de hauteur formé d'un maillage structuré de 1 103 900 éléments fut utilisé. Les valeurs par défaut des paramètres de calibration F_s et C_t ont été utilisées. La vitesse de combustion laminaire était de 3.5 m/s. La zone centrale était formée de cubes de 0.1 m de côté. Le tableau 5.10 montre les amplitudes maximales des ondes de choc en fonction de quatre distances à partir du point d'allumage. On remarque que la surpression suivant la direction du jet est au moins trois fois plus élevée que celles mesurées dans les autres directions. La vitesse élevée du gaz ainsi que la géométrie du nuage contribuent à ce phénomène d'amplification de l'onde de choc dans l'axe du jet. Il est aussi intéressant de noter que la surpression maximale est près de cinq fois plus élevée que celle mesurée pour le jet subsonique de 250 m/s. En effet, les zones à plus forte concentration sont plus volumineuses dans le nuage sonique. De plus, l'intensité de la turbulence est plus élevée à cause de la vitesse du jet à l'ouverture et dans le nuage. La figure 5.9 montre l'allure de l'onde de surpression 2 m en avant du point d'allumage.

Tableau 5.10 Amplitude maximale de la surpression en fonction de la distance pour un jet d'hydrogène horizontal sonique obtenu avec AutoReaGas (fuite de 1209 m/s à 3.55 g/s, vitesse de combustion laminaire 3.5 m/s, allumage 0.25 m en avant de l'ouverture, sans plafond).

Direction des jauge	Surpression à 2 m (pascal)	Surpression à 5 m (pascal)	Surpression à 10 m (pascal)	Surpression à 15 m (pascal)
Avant (x+)	1170	210.8	89.02	36.31
Coté (y+)	355.5	135.9	31.01	13.89
Derrière (x-)	249.5	89.02	27.65	15.57
Au dessus (z+)	228.2	101.0	35.89	15.98

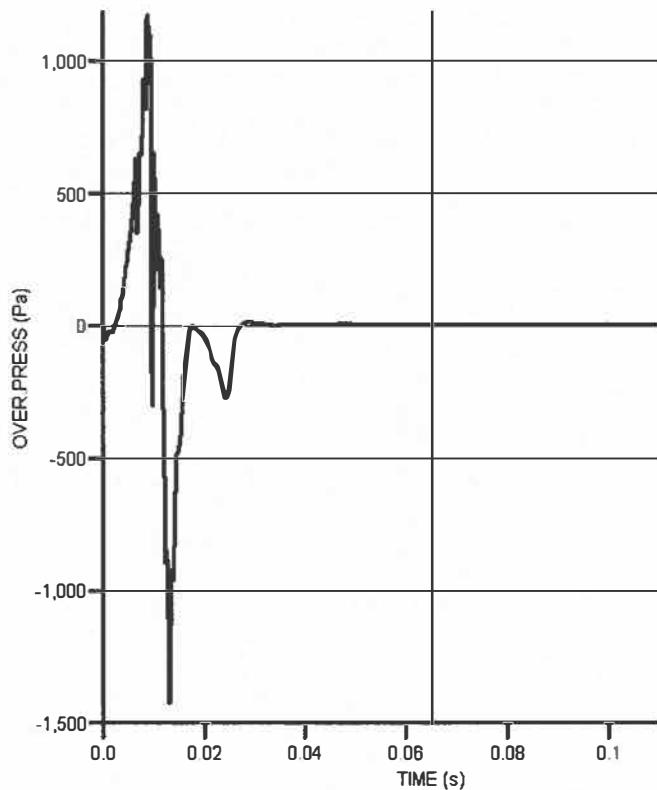


Figure 5.9 Courbe de surpression à 2 m en avant (x+) du point d'allumage d'un jet horizontal sonique de 1209 m/s (allumage à 0.25 m de l'ouverture, sans plafond).

La figure 5.10 montre une représentation en trois dimensions de l'onde de surpression en fonction de la distance se déplaçant dans le plan parallèle à la direction du jet 0.023 sec après l'allumage. Les zones rouges représentent les ondes de surpression tandis que les zones bleues et vertes représentent les sous pression. Comme dans le cas des fuites

subsoniques, on remarque que la surpression au-devant du jet (vers la droite) est de plus forte intensité que la surpression à l'arrière du jet. Cet effet est encore plus important dans le cas des explosions de jets soniques à cause de la vitesse et de la forme du nuage.

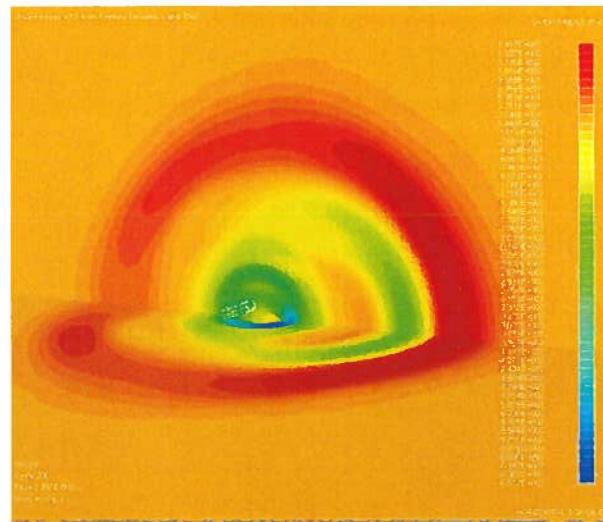


Figure 5.10 Surpression générée par l'allumage d'un jet d'hydrogène de 1209 m/s. La prédominance de l'onde de choc dans la direction du jet (vers la droite) est clairement visible.

5.3 Supersonique

La dernière simulation qui a été effectuée est celle de la fuite supersonique. Une fuite provenant d'un réservoir de 700 bar à travers une ouverture de 6 mm de diamètre a été considérée. Les courbes de débit, de pression et de températures présentées dans la section 3.1.3 ont été utilisées. Une seule explosion 0.082 sec après le début de la fuite a été effectuée.

5.3.1 Dispersion

La dispersion d'un jet supersonique à haut débit est plus complexe à simuler que celle des jets étudiés précédemment. En effet, lors des premiers instants de la fuite, la pression élevée à la sortie du réservoir contribue à la formation d'une zone supersonique au-devant de l'ouverture. La présence de gradients élevés de vitesse, pression, température et densité près de cette zone supersonique est délicate et laborieuse à simuler. Dans le passé, de telles simulations se sont souvent faites à l'aide de la méthode de l'orifice virtuel comme celle présentée par *Birch* et al. [15][16]. Avec cette méthode, il est possible d'éviter une simulation détaillée de la zone supersonique et ainsi éviter les gradients et les discontinuités, au risque de diminuer la précision et la véracité des résultats. Pour minimiser les sources d'erreurs, la simulation fut effectuée sans utiliser d'orifice virtuel.

Pour réussir à simuler la zone supersonique, un maillage très fin, particulièrement près de l'ouverture, a été réalisé. Un premier maillage détaillé de 1 031 390 éléments fut utilisé (figure 5.11). Il avait pour dimension 25 m de longueur, 8 m de largeur et 8 m de hauteur. Le jet a atteint plus de la moitié du domaine après un délai de 0.5 sec. Les résultats de la simulation ont été importés et extrapolés sur un domaine plus long. La convergence de la première solution sur le nouveau maillage a été vérifiée. Cette approche permet l'utilisation de maillages de plus petite taille au début d'une simulation lorsque le nuage est peu volumineux. Lorsque le nuage grossit, les résultats obtenus peuvent être interpolés sur un nouveau maillage de plus grande taille. Ceci permet en

autre de diminuer le temps de simulation ou encore de corriger des erreurs de maillages en cours de simulation. Plusieurs maillages intermédiaires ont été réalisés. Les données du maillage précédent étaient interpolées sur le nouveau maillage au domaine plus volumineux. Les figures 5.11 et 5.12 donnent les détails sur le maillage utilisé initialement et le dernier utilisé à partir de 5 secondes de simulation. Les principales différences entre les deux maillages sont les dimensions de la zone très raffinée près de l'ouverture, les dimensions des zones internes du domaine et la longueur du domaine.

Une autre conséquence de l'utilisation d'un maillage très raffinée près de l'ouverture est la diminution du pas de temps. En effet, un pas de temps initial de 1×10^{-10} sec a dû être utilisé pour réussir à simuler correctement les propriétés thermodynamiques des gaz à la sortie. Au fur et à mesure que le cône de Mach se stabilisait, le pas de temps fut augmenté. Le pas de temps final utilisé à partir de 5 secondes de simulation était de 0.01 sec.

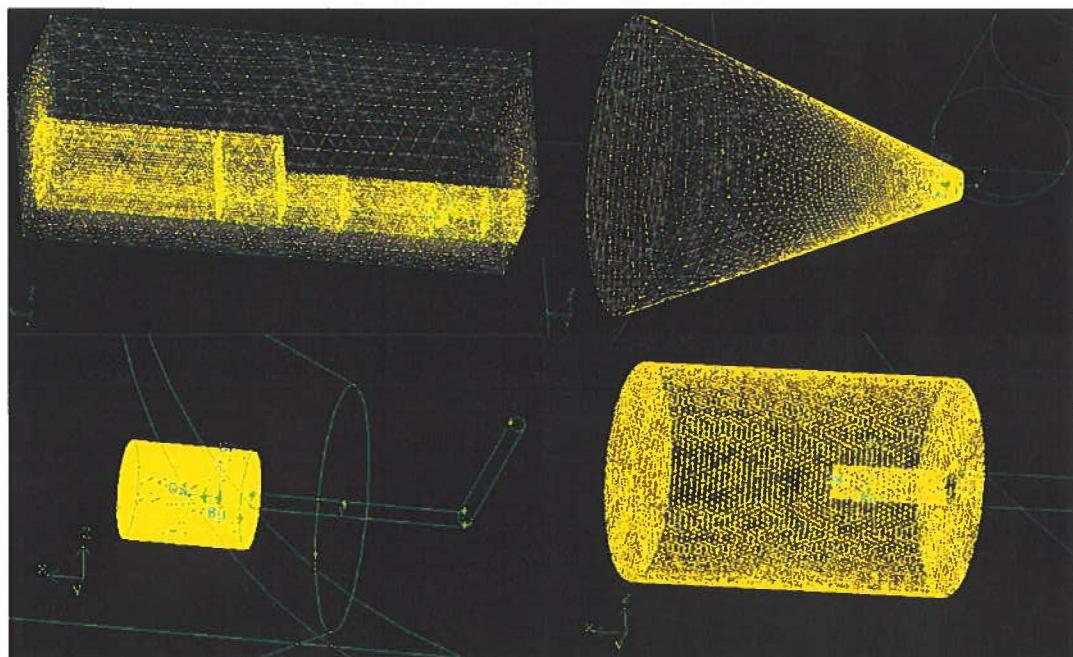


Figure 5.11 Maillage formé de 1 031 390 mailles, utilisé initialement pendant 0.3 sec de simulation. La première image illustre le maillage du domaine au complet. La deuxième, la troisième et la quatrième image montrent le maillage plus raffiné près de l'ouverture. La longueur totale du domaine est de 25 m.

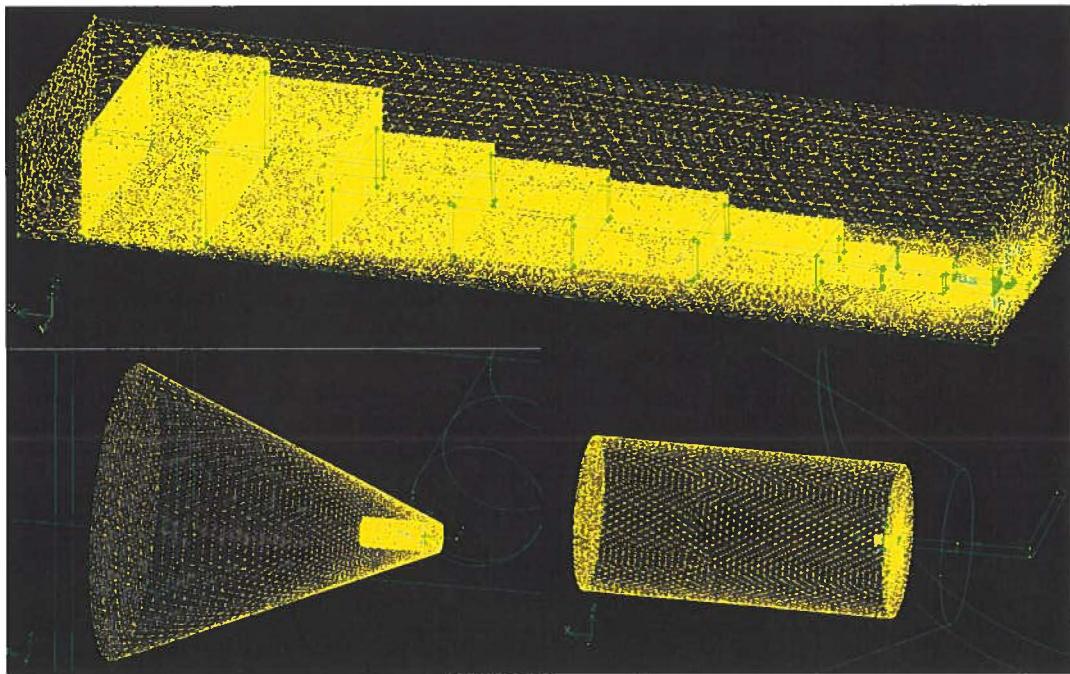


Figure 5.12 Maillage raffiné final formé de 1 801 905 mailles, utilisé après 5 secondes de simulation. La première image illustre le maillage du domaine au complet. La deuxième et la troisième image montrent le maillage plus raffiné près de l'ouverture. La longueur totale du domaine est de 82 m.

Donc pour les simulations de dispersion plusieurs domaines de différentes dimensions furent utilisés. Le domaine final était formé d'un maillage non structuré de 1 801 905 éléments et avait pour dimension 82 m de longueur, 22 m de largeur et 14 m de hauteur. Une fonction définie par l'utilisateur basée sur les courbes présentées dans la section 3.1.3 fut utilisée pour spécifier à Fluent le débit, la température ainsi que la pression à l'ouverture (annexe 1.3). L'étendue du nuage à différents temps de simulation est présentée sur le tableau 5.11. Les contours de concentration de 30 % (vol) et 70 % (vol) atteignent un maximum selon l'axe du jet 0.6 sec après le début de la fuite. À environ 8 secondes, le nuage à l'extrémité du jet se détache. Le jet à une concentration de 4 % (vol) atteint une distance d'environ 60 m avant de se détacher. La position maximale du nuage détaché était de 65.7 m à 12.5 secondes. Le modèle de Birch (section 3.2.1) prédisait une étendue de 126 m sur l'axe du jet pour un contour de concentration de 4 % (vol) pour une pression de stockage de 700 bar et un diamètre de 6 mm. On rappelle que le modèle fut validé pour une fuite stationnaire verticale à débit constant avec une pression maximale

de 70 bar. Par contre, le cas présenté ici est totalement différent. Les simulations sont effectuées horizontalement, à proximité du sol, avec une pression à l'ouverture de plus de 300 bar. Lorsqu'on considère que le modèle n'a pas été validé pour des pressions si élevées, que l'influence du sol et de la gravité n'est pas prise en compte par le modèle et que le débit de la fuite est dépendant du temps, on ne peut que conclure qu'il est inapproprié de faire une comparaison entre les prédictions du modèle et les résultats simulés.

La figure 5.13a montre un graphique de la position du contour de concentration à 4 % (vol) en fonction du temps. La figure 5.13b présente un graphique de la vitesse instantanée du contour de concentration à 4 % (vol) en fonction du temps, définie comme le changement de position entre deux temps successifs divisés par l'intervalle de temps entre les deux pas.

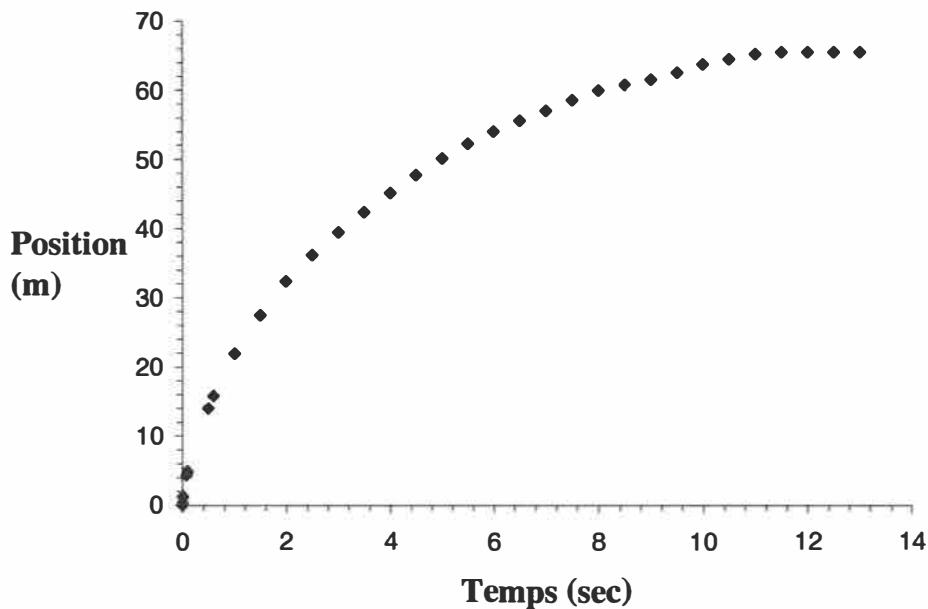


Figure 5.13a Distance du contour de la concentration d'hydrogène à 4% (vol) sur l'axe du jet (x) en fonction du temps écoulé depuis le début de la simulation.

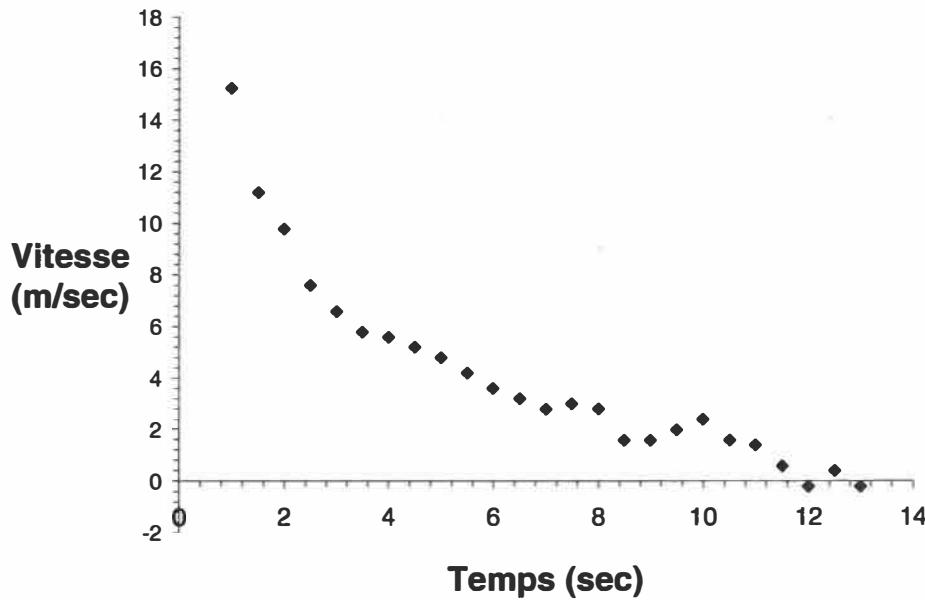


Figure 5.13b Vitesse instantanée du contour de la concentration d'hydrogène de 4 % (vol) sur l'axe du jet en fonction du temps écoulé depuis le début de la simulation. La vitesse est mesurée à un intervalle de 0.5 sec à partir de 1 sec de simulation. On remarque la décélération constante du nuage à partir de 3 secondes. Le point d'inflexion présent à 3 secondes correspond au développement du tourbillon présent à l'extrémité du jet, comme le montre la figure 5.17. De même, les points d'inflexion présents à environ 8 secondes correspondent au détachement de l'extrémité du nuage d'avec le jet principal. Les points d'inflexion présents autour de 10 et 12 secondes correspondent à la dispersion du tourbillon détaché.

Les figures 5.14 et 5.15 montrent la chute de la concentration d'hydrogène le long de l'axe central du jet. La dispersion du jet se fait selon une fonction $1/F_{\text{mol}}$ directement au centre du nuage suivant une zone de transition de 10 m et précédent la zone de turbulence à l'avant du nuage.

Tableau 5.11 Étendue du nuage inflammable simulé pour un jet horizontal supersonique en fonction de la concentration d'hydrogène et du temps écoulé depuis le début de la fuite. L'étendue maximale de chaque concentration est en caractère gras.

Temps écoulé depuis le début de la fuite (s)	Étendue du nuage d'hydrogène le long de l'axe x (m) parallèle au jet aux concentrations indiquées				Étendue du nuage d'hydrogène le long de l'axe y (m) perpendiculaire au jet aux concentrations indiquées				Étendue du nuage d'hydrogène le long de l'axe z (m) perpendiculaire au jet aux concentrations indiquées			
	2 %	4 %	30 %	70 %	2 %	4 %	30 %	70 %	2 %	4 %	30 %	70 %
5.0x10 ⁻⁶	0.016	0.016	0.014	0.012	0.020	0.020	0.018	0.016	0.020	0.020	0.018	0.016
2.5x10 ⁻⁵	0.048	0.048	0.042	0.040	0.057	0.054	0.050	0.043	0.055	0.055	0.050	0.043
1.0x10 ⁻⁴	0.110	0.110	0.090	0.085	0.130	0.130	0.095	0.090	0.135	0.125	0.115	0.090
0.001	0.390	0.350	0.300	0.250	0.375	0.350	0.305	0.280	0.350	0.350	0.300	0.225
0.010	1.30	1.28	1.20	0.70	0.80	0.80	0.60	0.12	0.80	0.80	0.60	0.10
0.082	4.37	4.37	4.10	0.75	2.00	1.65	1.10	0.12	1.35	1.25	0.95	0.11
0.1	4.93	4.90	4.75	0.75	2.38	2.00	1.00	0.12	1.40	1.32	0.85	0.11
0.5 ⁽¹⁾	14.0	14.0	6.75	1.10	4.40	4.00	0.55	0.10	2.13	2.06	0.63	0.10
0.6	15.8	15.8	7.00	1.10	4.60	4.50	0.55	0.10	2.25	2.19	0.63	0.10
1.0	21.9	21.9	6.50	1.00	5.50	5.25	0.55	0.11	2.75	2.50	0.63	0.10
1.5 ⁽²⁾	27.5	27.5	6.00	1.00	6.50	6.00	0.52	0.10	3.25	3.24	0.57	0.10
2.0 ⁽³⁾	32.5	32.4	5.75	1.00	7.60	7.40	0.50	0.09	4.00	3.63	0.55	0.09
2.5	36.4	36.2	5.50	1.00	8.25	8.20	0.46	0.08	4.25	4.15	0.53	0.08
3.0	39.7	39.5	5.25	0.98	9.30	8.80	0.45	0.08	4.75	4.50	0.53	0.08
3.5	42.6	42.4	5.40	0.85	9.80	9.40	0.42	0.08	5.10	4.85	0.50	0.08
4.0 ⁽⁴⁾	45.5	45.2	5.25	0.85	9.90	9.00	0.42	0.08	5.60	5.25	0.50	0.08
4.5	48.1	47.8	5.10	0.75	10.3	9.60	0.42	0.08	5.80	5.60	0.45	0.08
5.0	50.5	50.2	5.10	0.75	10.9	10.0	0.42	0.08	6.05	5.75	0.43	0.08
5.5 ⁽⁵⁾	52.7	52.3	4.87	0.64	11.2	10.3	0.39	0.08	6.44	6.05	0.41	0.08
6.0	54.6	54.1	4.70	0.64	12.0	10.7	0.39	0.08	6.73	6.45	0.40	0.08
6.5	56.3	55.7	4.37	0.61	12.3	11.1	0.35	0.08	7.38	6.78	0.40	0.08
7.0	58.0	57.1	4.11	0.58	12.8	11.6	0.34	0.07	7.84	7.30	0.39	0.07
7.5	59.5	58.6	3.95	0.58	13.1	11.9	0.33	0.07	8.15	7.41	0.37	0.07
8.0	61.1	60.0	3.82	0.48	13.2	12.2	0.33	0.07	8.37	7.61	0.36	0.07
8.5	62.4	60.8	3.58	0.44	13.6	12.2	0.33	0.06	8.49	7.63	0.34	0.07
9.0	63.8	61.6	3.42	0.44	13.6	11.2	0.33	0.06	8.62	7.59	0.33	0.07
9.5	65.0	62.6	3.28	0.44	13.7	10.4	0.32	0.06	8.73	7.59	0.33	0.07
10.0	66.2	63.8	3.25	0.36	13.7	9.66	0.30	0.06	9.11	7.72	0.33	0.06

(1) Première interpolation; (2) Deuxième interpolation; (3) Troisième interpolation; (4) Quatrième interpolation; (5) Cinquième interpolation;

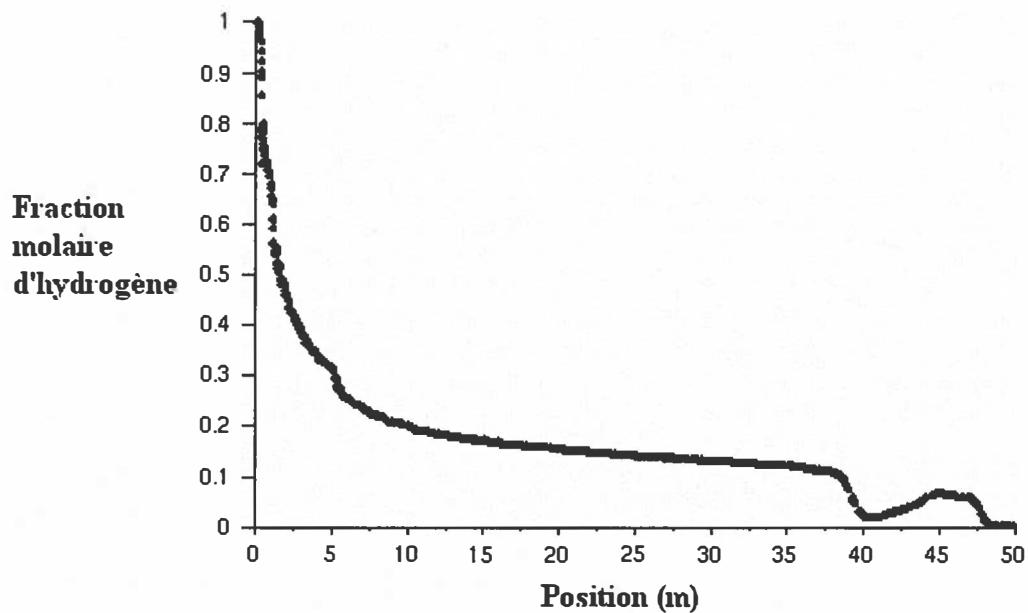


Figure 5.14 Concentration de H_2 4.5 secondes après le début de la fuite en fonction de la position sur l'axe central du jet. On remarque la chute de la concentration à 38 m qui correspond au mouvement du tourbillon présent à l'extrémité du jet.

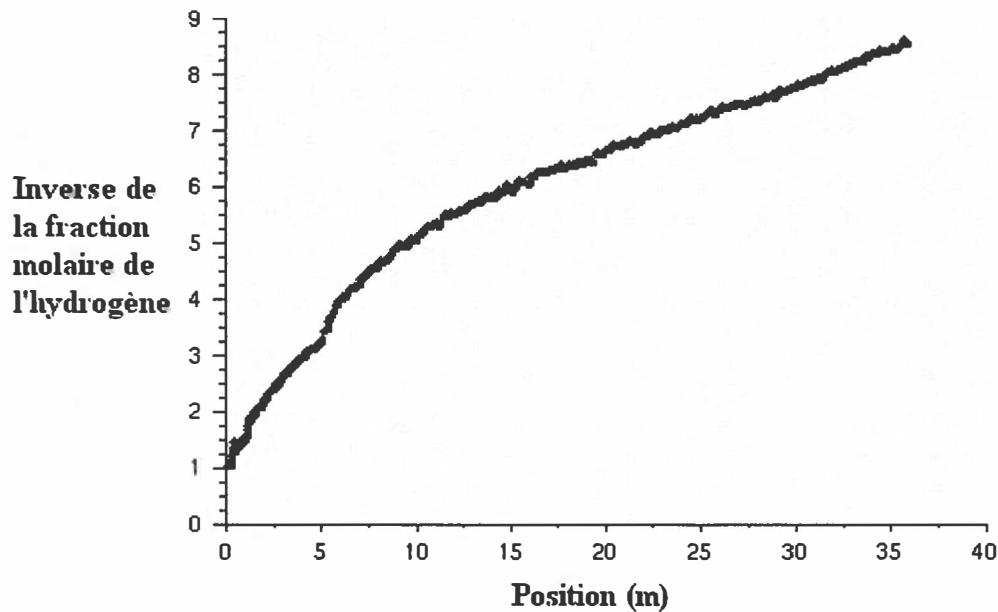


Figure 5.15 L'inverse de la concentration de H_2 4.5 secondes après le début de la fuite en fonction de la position sur l'axe central du jet tronqué à 36 m. On remarque un régime linéaire de 10 m à 36 m.

Les figures 5.16 et 5.17 montrent les contours de concentration d'hydrogène représentés selon deux perspectives différentes et à différents temps. On remarque la transition entre les maillages à l'allongement de la bande bleue correspondante au plan sur lequel les contours sont projetés. Au départ le nuage reste symétrique. Lorsque le nuage touche le sol, cette symétrie est brisée. La dispersion est caractérisée par une zone tourbillonnante à l'extrémité du nuage. Après un certain temps, cette zone se détache du jet principal et se dissipe.

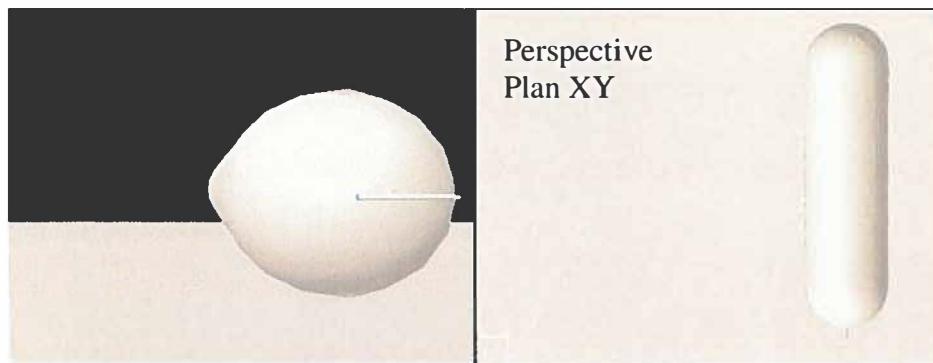
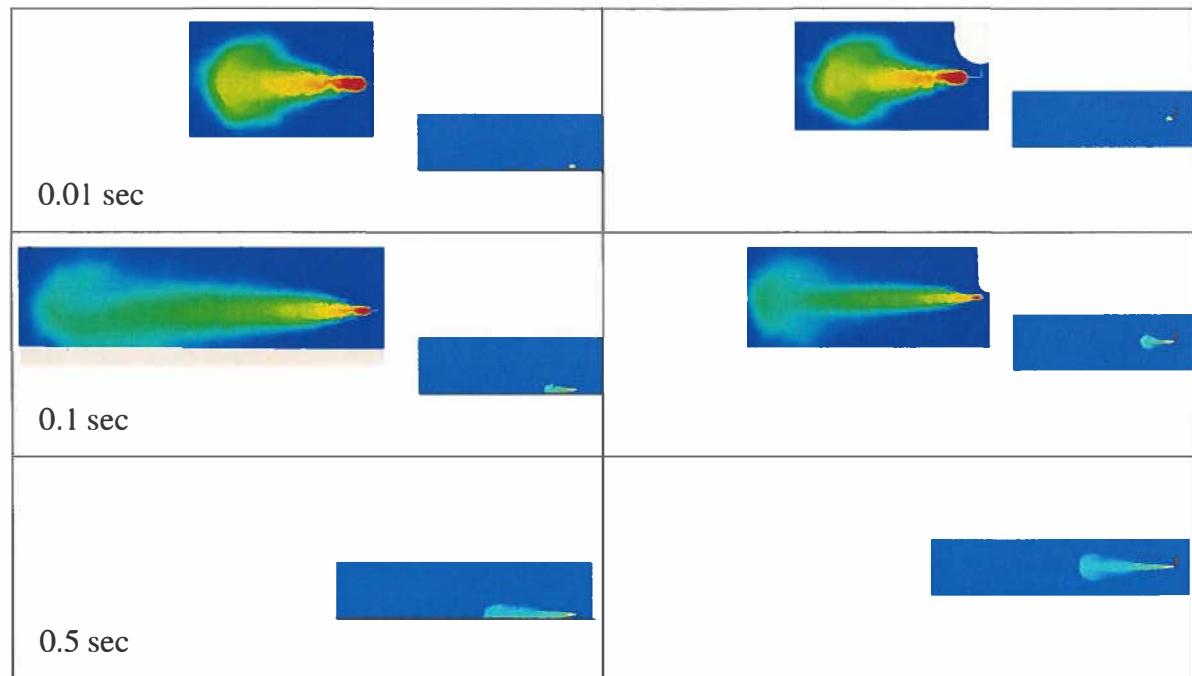
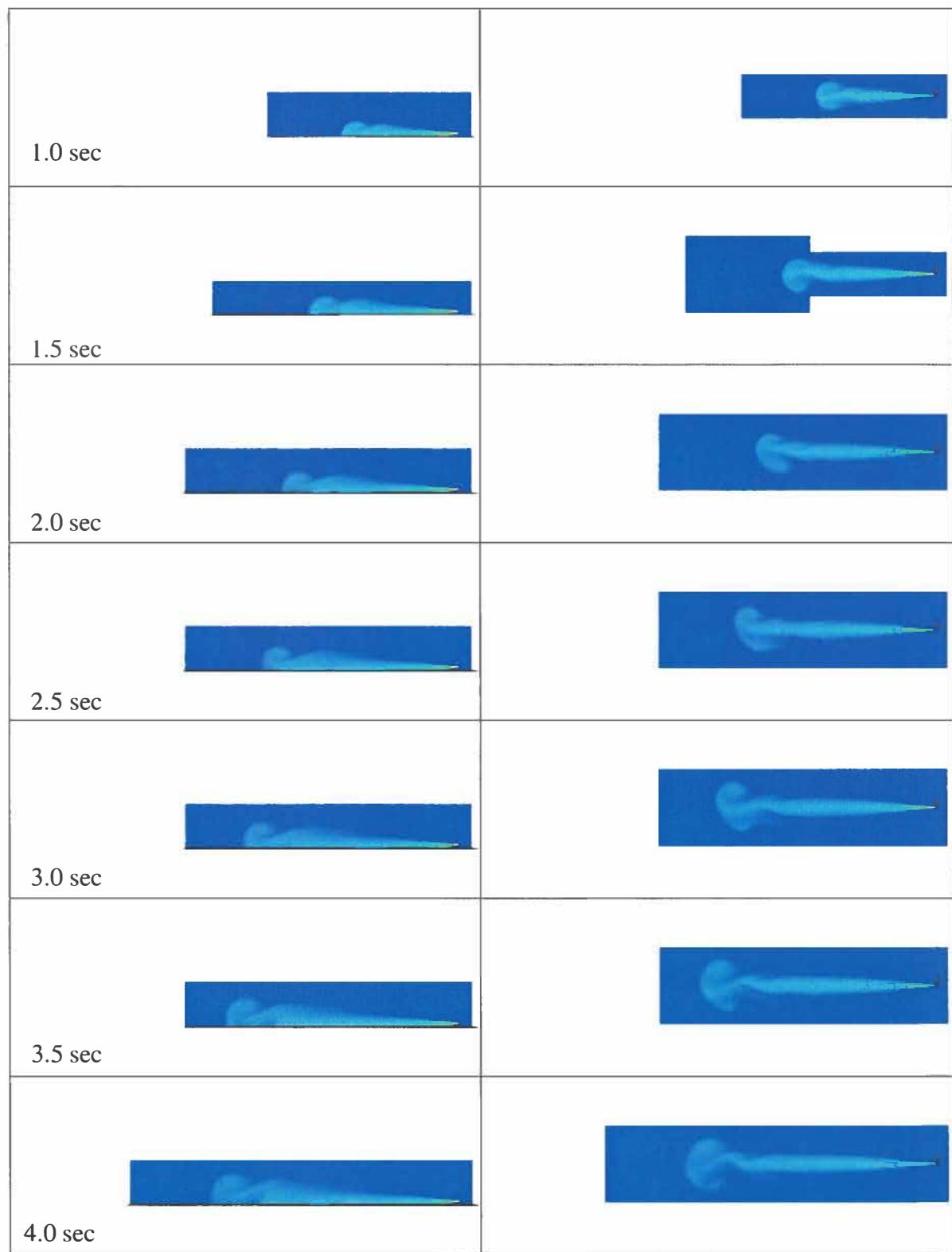
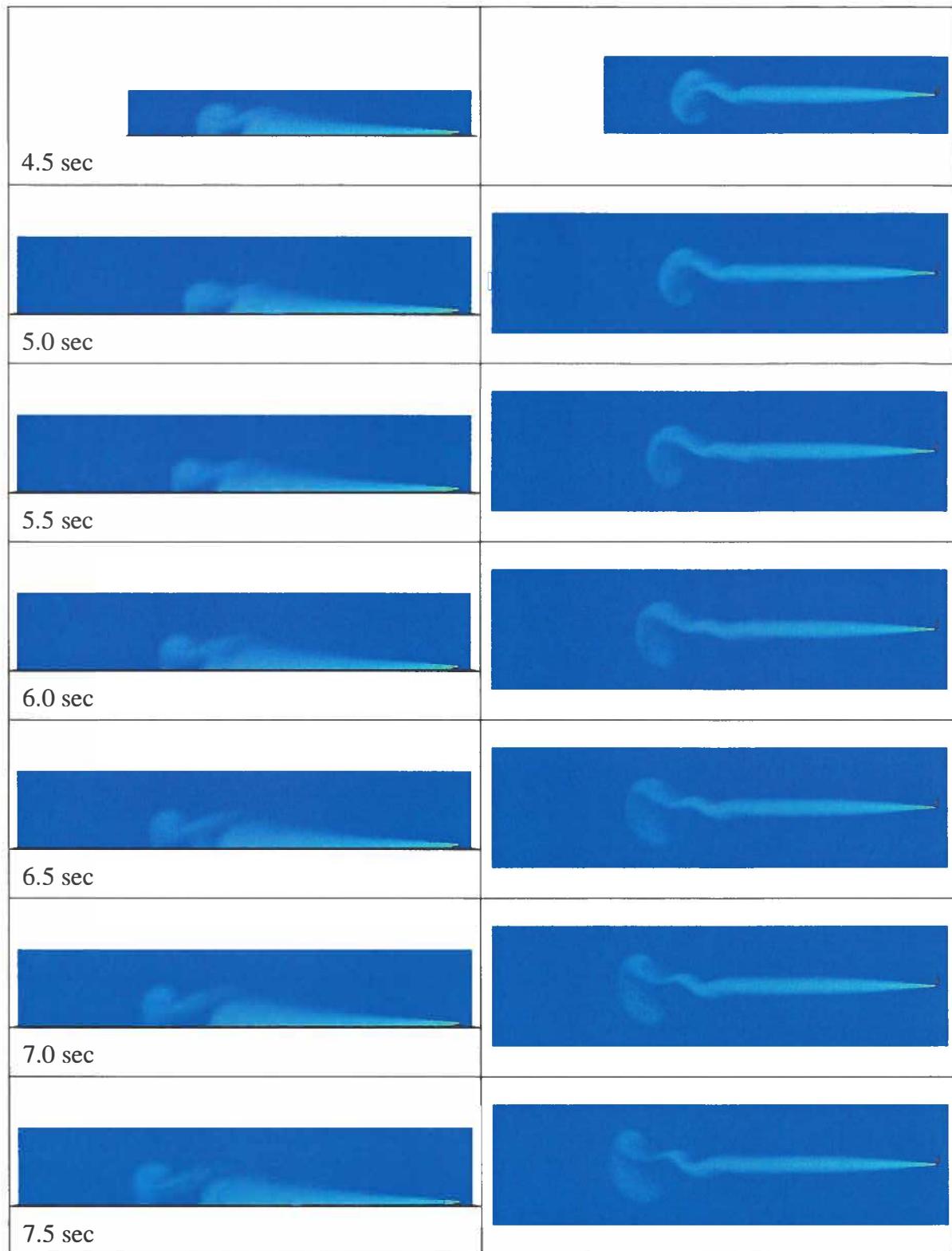


Figure 5.16 Perspective utilisée sur les figures suivantes. Les images sont toutes présentées selon le plan XZ, à l'exception de la série d'images à droite de la figure 5.17.







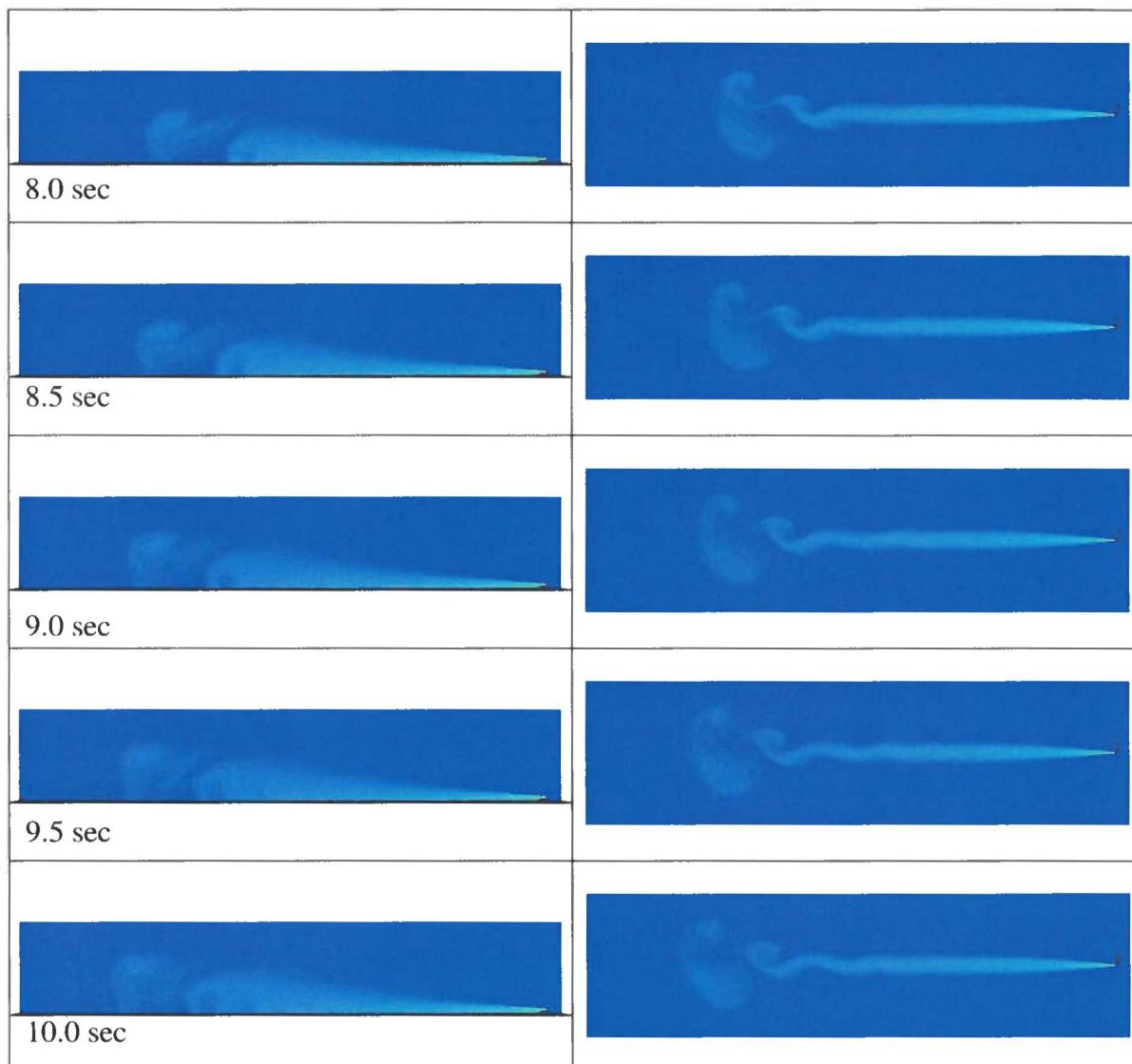
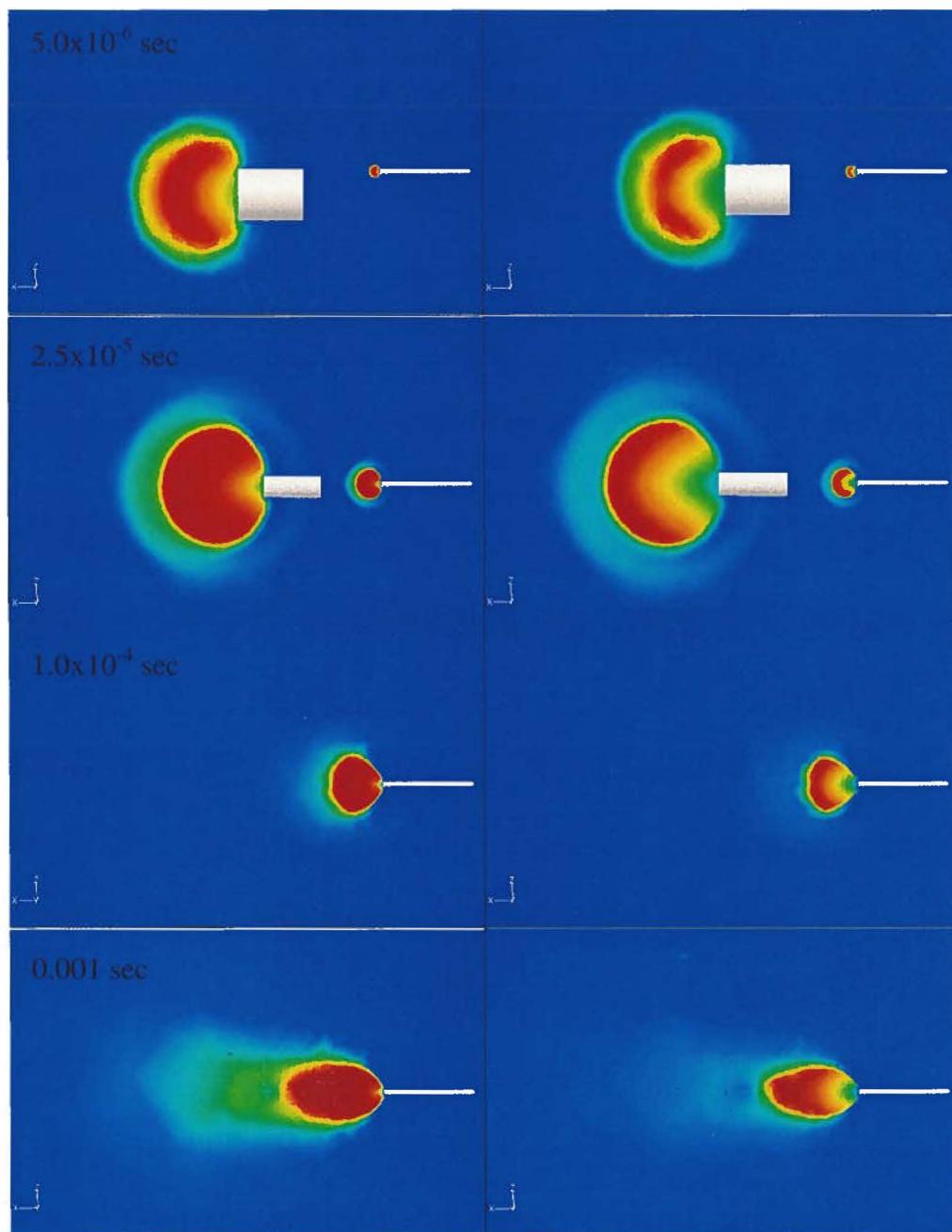


Figure 5.17 Contour de la concentration (0-100 % (vol)) issu d'une fuite supersonique provenant d'un réservoir de 700 bar à travers une ouverture de 6 mm de diamètre à différents temps après le début de la fuite. On remarque l'influence du sol sur la forme du nuage. De 0.01 sec à 0.1 sec, la symétrie du nuage est brisée lorsque le nuage rebondit sur le sol. On remarque aussi qu'à partir de 9.5 secondes l'extrémité du nuage se détache du jet principal.

La figure 5.18 présente les contours de vitesse et du nombre de Mach directement à la sortie à différents temps après le début de la fuite. La zone supersonique prend environ 0.001 seconde à se former. Elle diminuera de taille jusqu'à ce que la pression à la sortie atteigne 1.89 fois la pression atmosphérique, après quoi la vitesse du gaz deviendra

subsonique et la zone disparaîtra. Il est intéressant de noter que 0.001 sec correspond au pas de temps optimal utilisé pour les 5 premières secondes de simulation une fois la zone supersonique formée. On remarque aussi sur les deux dernières figures la différence dans la forme de la zone supersonique. Cette différence est causée par le changement de maillage effectué 0.2 sec plus tôt.



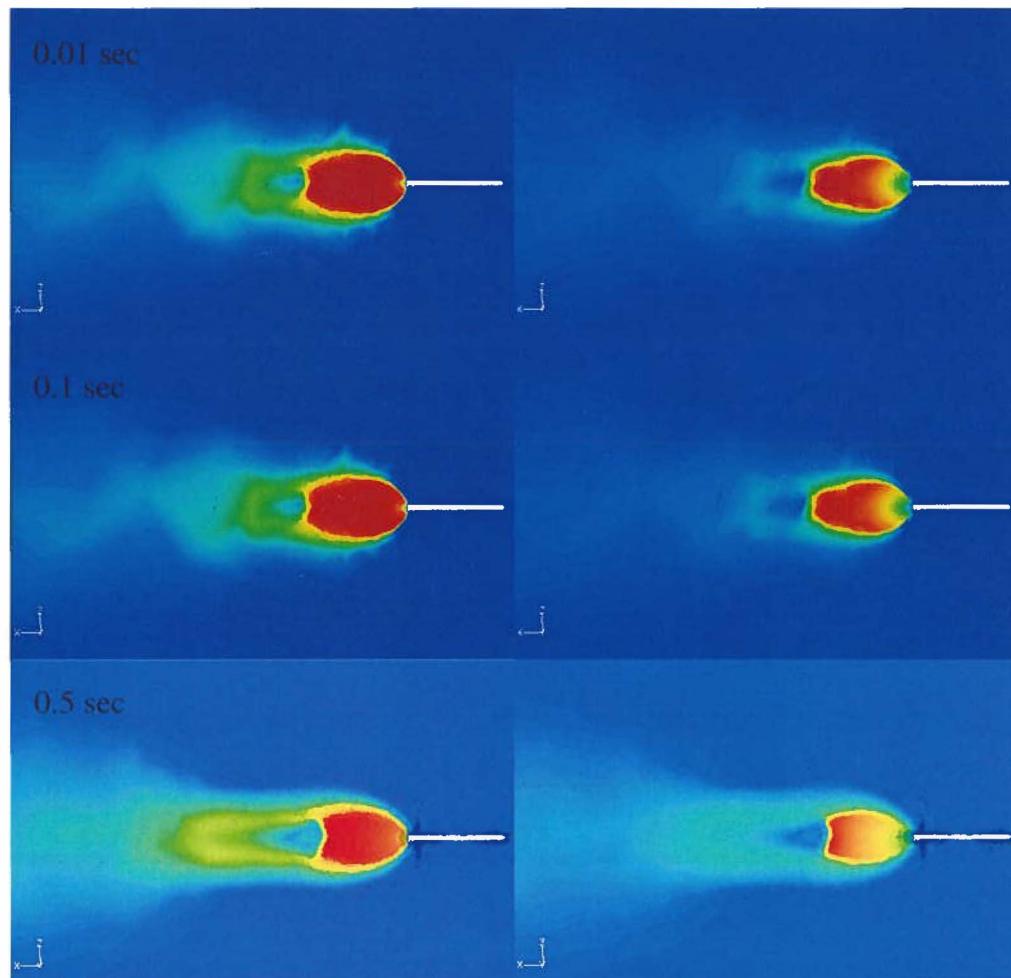


Figure 5.18 Contours de la vitesse absolue sur les figures de gauche et du cône de Mach sur les figures de droite à différents temps après le début de la fuite à la sortie de l'ouverture. On remarque le changement de maillage à 0.5 sec, raffinant de manière importante la zone supersonique. La vitesse maximale mesurée à 0.5 sec était de 2500 m/s correspondant à Mach 6.56 par rapport à la vitesse du son dans l'air.

La forte pression de sortie du gaz provoque l'apparition d'une onde de choc. Ceci est illustré sur la figure 5.19 par le changement de densité à proximité de l'ouverture. Cette onde se dissipe rapidement dans l'environnement ambiant.

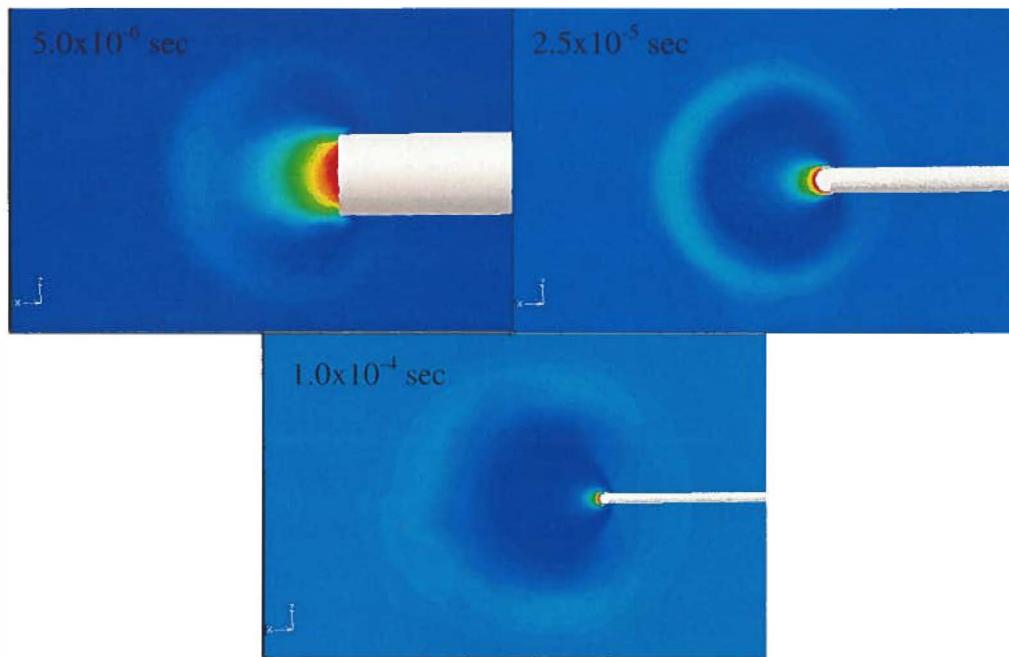


Figure 5.19 Contours de la densité à différents temps après le début de la fuite. Les trois images sont graduellement prises à des zooms plus faibles. L'onde de choc se propageant dans l'espace immédiatement après le début de la fuite est illustrée par le contour bleu pâle circulaire.

Une fuite supersonique est caractérisée par l'apparition d'ondes de choc près de la zone supersonique. Pour apercevoir ces zones, un maillage assez précis doit être utilisé. La figure 5.20 montre en détail les ondes présentes au centre du cône supersonique. On retrouve aussi ces ondes tout autour du cône en turquoise.

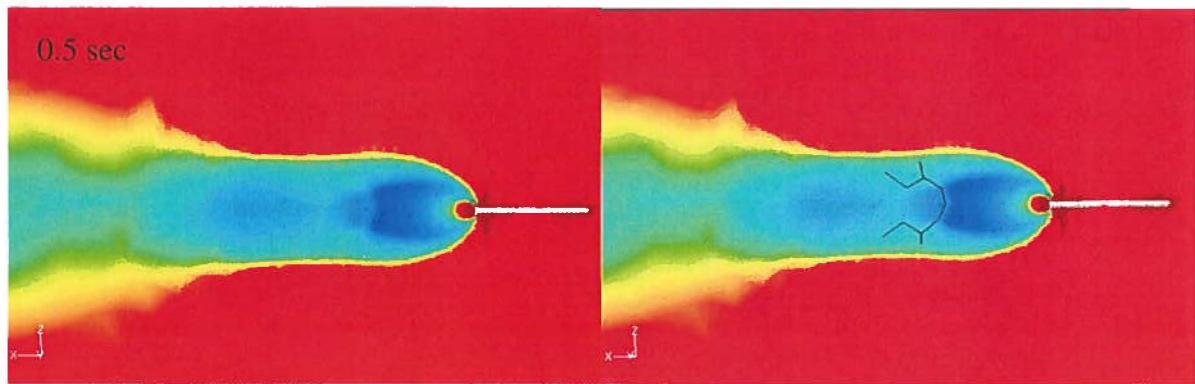


Figure 5.20 Contours de la densité lorsque la zone supersonique est complètement formée 0.5 sec après le début de la fuite. La deuxième image met en évidence les augmentations de densité associées aux ondes de choc présentes à l'intérieur de la zone supersonique.

La figure 5.21a présente les régions génératrices de turbulence près de l'ouverture. On remarque que ces régions sont concentrées autour des ondes de choc. La figure 5.21b met en évidence la rotation du fluide à l'aide des vecteurs de vitesses présents à l'extrémité du cône de Mach. Deux tourbillons sont clairement visibles.

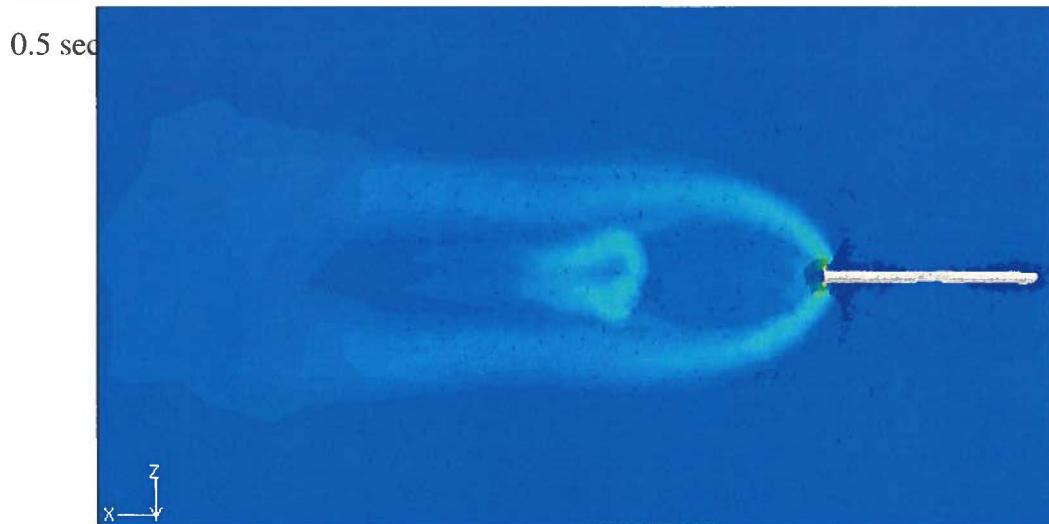


Figure 5.21a Contours de l'intensité du rotationnel dans le fluide 0.5 sec après le début de la fuite. Les zones de création de vortex sont illustrées en bleu pâle.

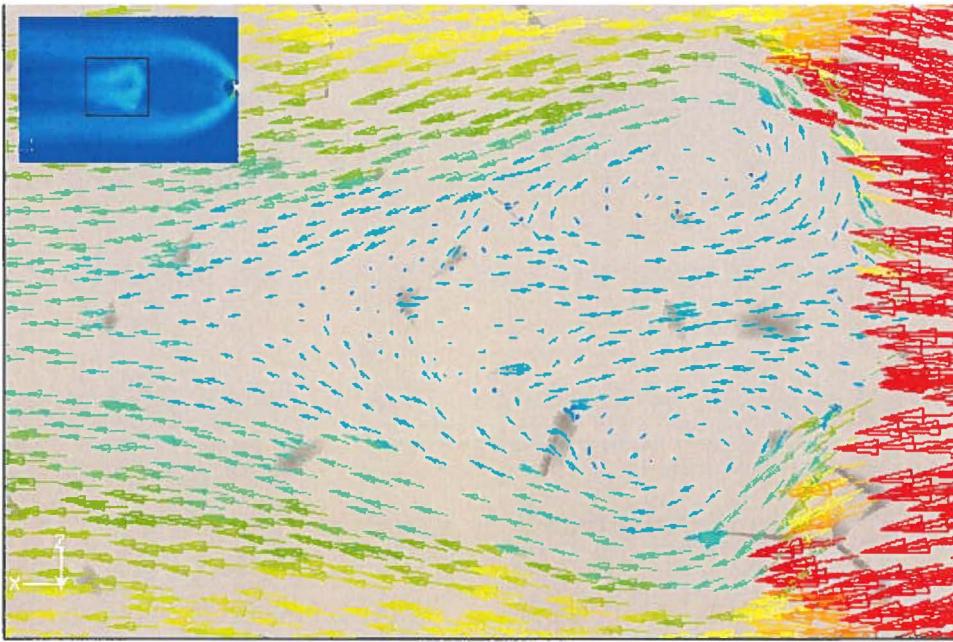


Figure 5.21b Vecteur d'intensité de la vitesse dans le fluide 0.5 sec après le début de la fuite. Zoom effectué sur la zone centrale.

Les quatre graphiques suivants montrent le comportement de la température, de la pression, de la vitesse et de la fraction massique de l'hydrogène près de l'ouverture. Les données sont prises sur l'axe central du jet directement à la sortie. Les résultats obtenus par *Xu, B.P.* et al. [4] listés sur la figure 2.4 de la section 2.2 sont en accord avec ceux présentés ici.

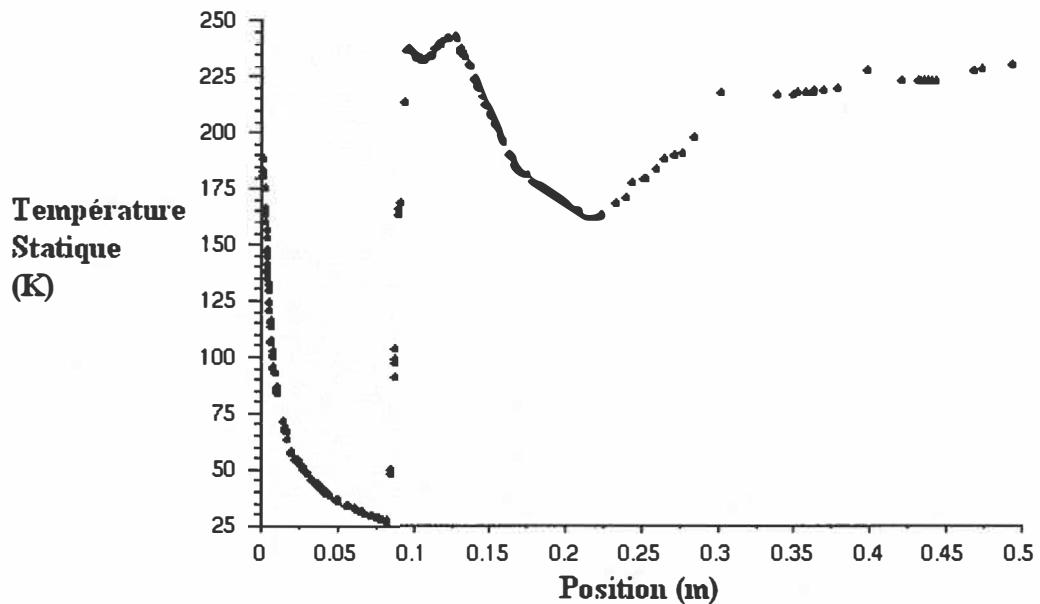


Figure 5.22 Température statique en fonction de la position directement à l'ouverture 0.5 sec après le début de la fuite.

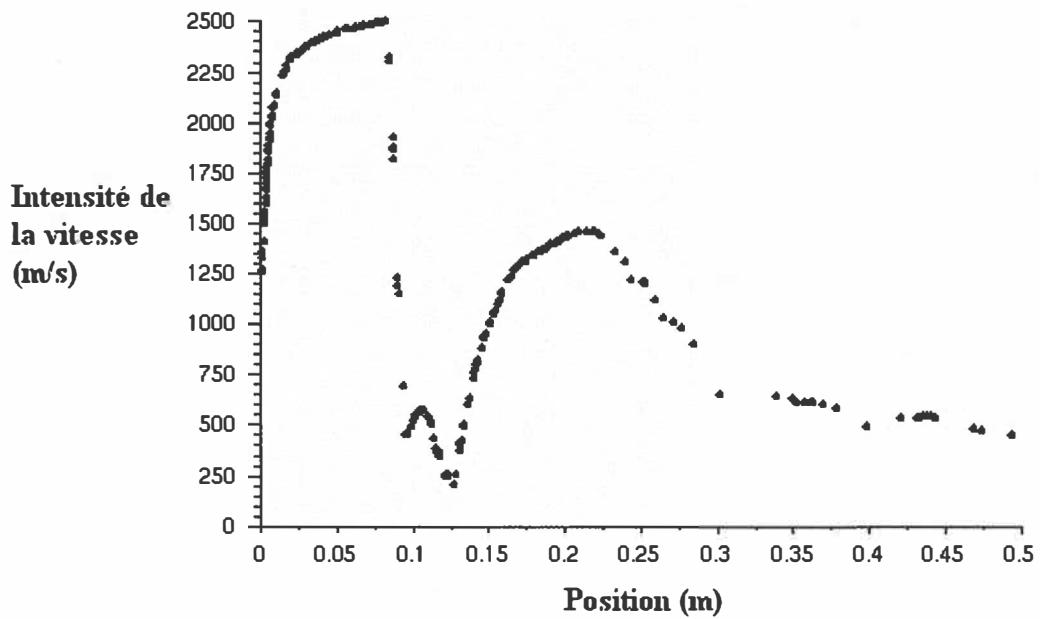


Figure 5.23 Vitesse du gaz en fonction de la position directement à l'ouverture 0.5 sec après le début de la fuite.

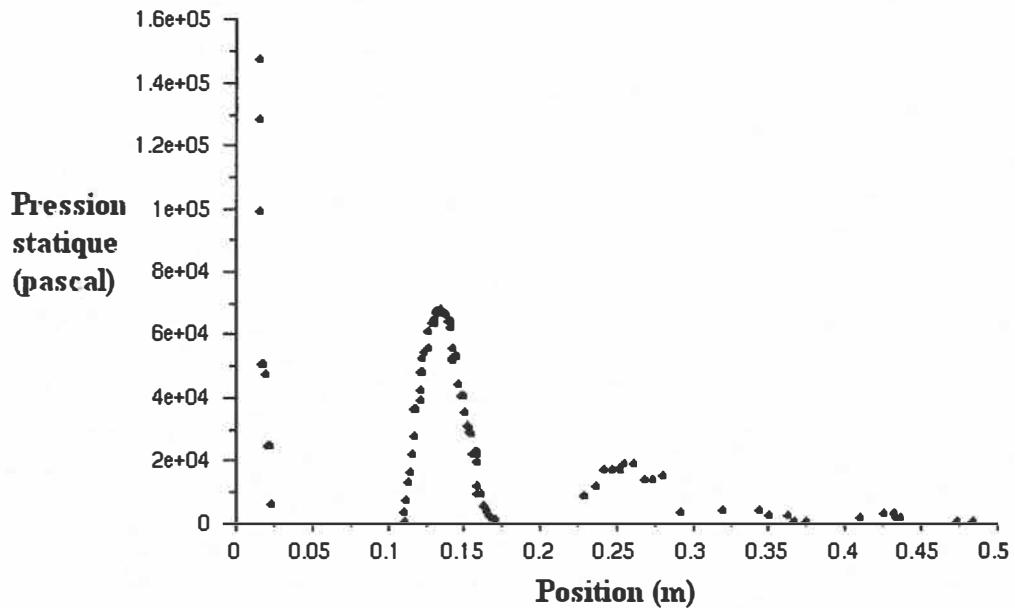


Figure 5.24 Pression statique en fonction de la position directement à l'ouverture 0.5 sec après le début de la fuite. Tronqué à 1.60 bar. Le maximum se trouve à environ 275 bar.

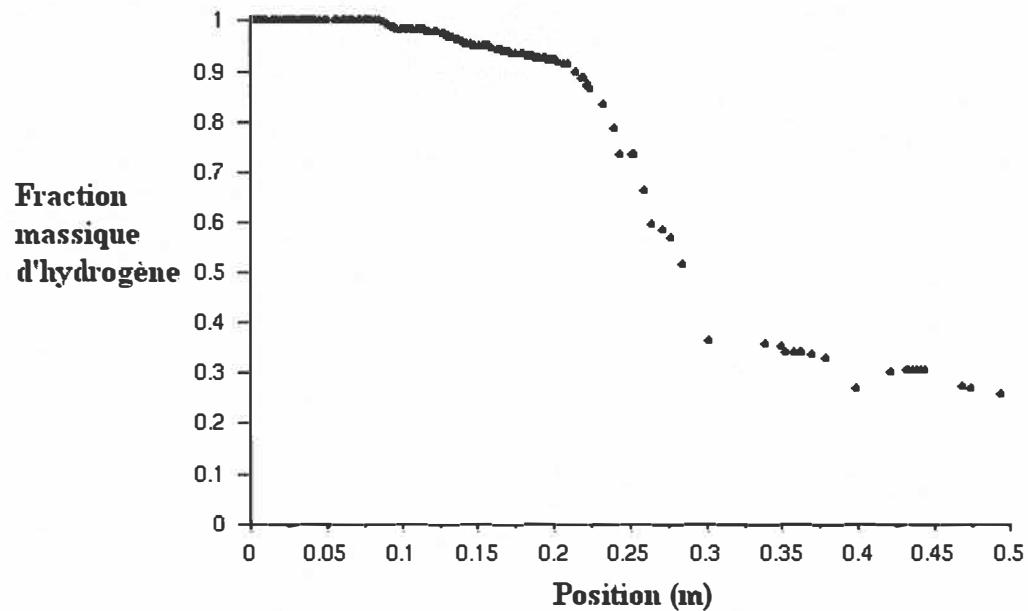


Figure 5.25 Fraction massique d'hydrogène en fonction de la position directement à l'ouverture 0.5 sec après le début de la fuite. La valeur moyenne tourne autour de 0.5.

5.3.2 Explosion

La simulation de l'explosion d'un jet supersonique a été effectuée 0.082 sec après le début de la fuite. Elle correspond au cas probable d'une fuite allumée peu après un bris. Deux simulations, une avec un point d'allumages situé à 0.5 m au-devant de l'ouverture et une autre avec un point d'allumage situé à 4 m au-devant de l'ouverture, ont été effectuées. L'amplitude des surpressions maximales mesurées dans le cas où l'allumage a été fait à 4 m était environ 45 % plus faible que dans le cas où l'allumage a été fait à 0.5 m. Le nuage s'étendait jusqu'à 4.5 m comme le montre le graphique sur la figure 5.26. La figure 5.27 présente le nuage créé par la fuite tel que simulé par Fluent.

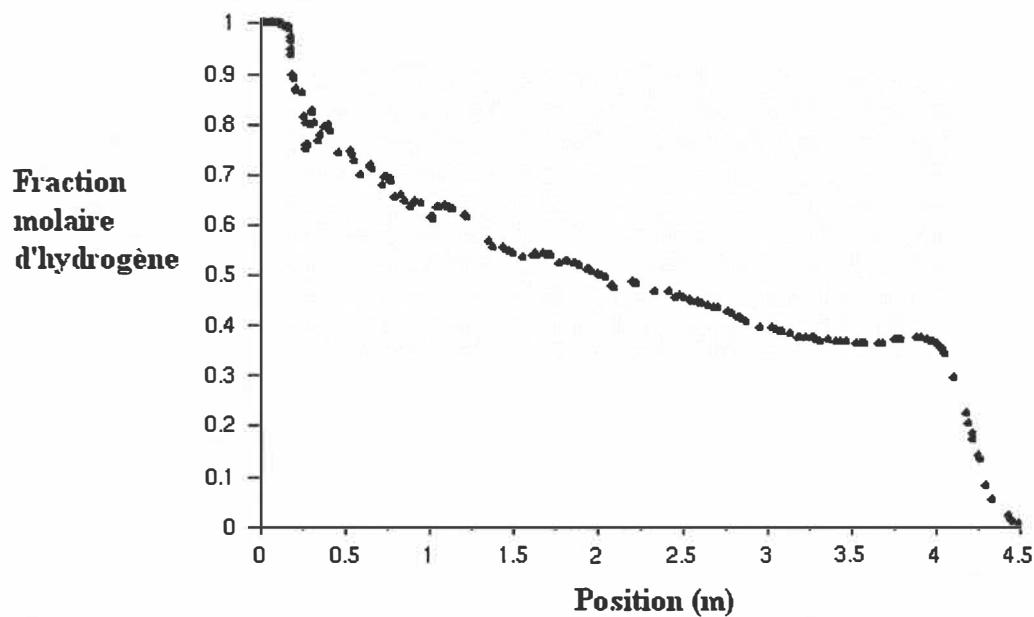


Figure 5.26 Concentration d'hydrogène 0.082 sec après le début de la fuite en fonction de la position sur l'axe centrale x dans la direction du jet. Le nuage s'étend jusqu'à 4.5 m.

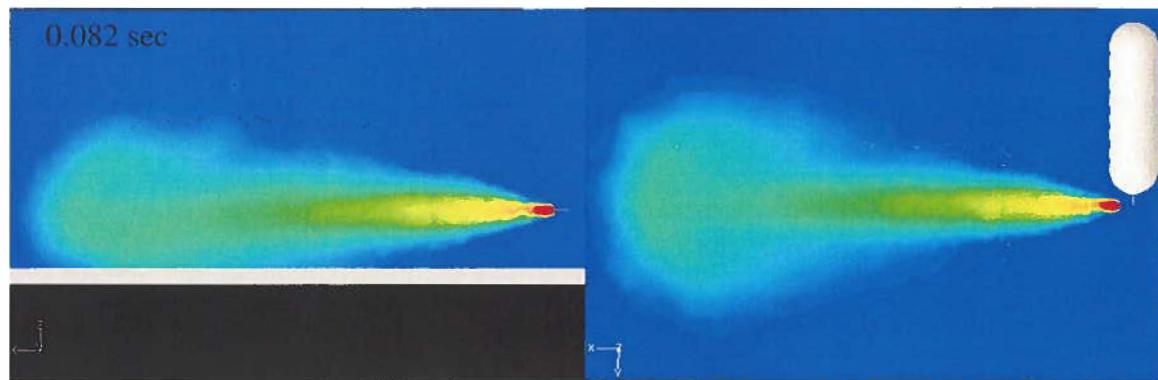


Figure 5.27 Concentration d'hydrogène selon deux plans de perspective, 0.082 sec après le début de la fuite.

Pour l'explosion, un domaine de 85.5 m de longueur, 82.8 m de largeur et 41.8 m de hauteur formé d'un maillage structuré de 874 616 éléments fut utilisé. Les valeurs par défaut des paramètres de calibration F_s et C_t ont été utilisées. La vitesse de combustion laminaire était de 3.5 m/s. La zone centrale était formée de cubes de 0.1 m de côté. La figure 5.28 montre le résultat de l'importation du nuage de Fluent dans ARG. Pour ce cas, uniquement la concentration du gaz fut importée dans ARG. En effet, lorsque la vitesse du jet était aussi importée, ARG ne permettait pas d'allumage. Les simulations ont donc été effectuées avec la version standard d'ARG qui ne tient pas compte du champ des vitesses initialement présent dans le nuage. Il est important de noter que selon les simulations effectuées sur les jets subsoniques et soniques, la vitesse initiale du gaz a une influence non négligeable sur l'amplitude des surpressions. Il est donc fort probable que les surpressions simulées pour le jet supersonique sont de plus faibles amplitudes que si la vitesse avait pu être prise en compte.

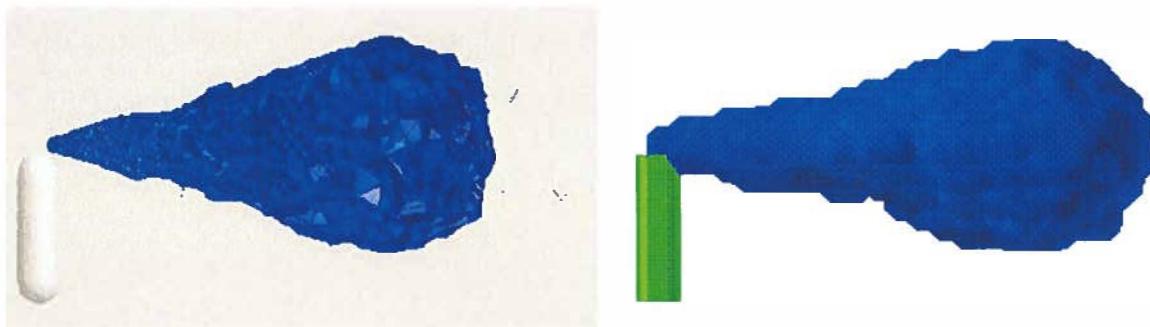


Figure 5.28 Nuage inflammable d'hydrogène (contour à 4 % (vol)) à 0.082 sec après le début de la fuite pour (a) le calcul original effectué dans Fluent (à gauche) et (b) après l'importation et la moyenne sur le maillage d'ARG (à droite). On remarque l'exagération de l'étendue du nuage près de l'ouverture dans ARG.

Le tableau 5.12 montre les amplitudes maximales des ondes de choc en fonction de la distance mesurée à partir du point d'allumage situé à 0.5 m au-devant de l'ouverture. Des résultats selon trois axes de jauge différents sont présentés. On remarque que la surpression maximale mesurée par les jauge présentes à l'intérieur du nuage va en augmentant. Aussitôt que l'onde sort du nuage, la surpression diminue. De plus, tout comme dans le cas sonique, la surpression suivant la direction du jet est jusqu'à quatre fois plus puissantes que celles mesurées dans les autres directions. La géométrie du nuage ainsi que la distribution de la concentration de l'hydrogène expliquent ce phénomène. Le point où la surpression est maximale (4 m) correspond à la zone où le nuage est à concentration stœchiométrique. Il est aussi intéressant de noter que la surpression maximale est près de 36 fois plus élevée que celle mesurée pour la simulation sonique à 1209 m/s. En effet, bien que le nuage soit moins volumineux, la concentration moyenne de celui-ci est plus élevée.

Tableau 5.12 Amplitude maximale de la surpression en fonction de la distance pour un jet d'hydrogène horizontal supersonique à 0.082 sec après le début de la fuite obtenue avec AutoReaGas (vitesse de combustion laminaire 3.5 m/s, allumage 0.5 m en avant de l'ouverture, sans importation des vecteurs de vitesses).

Distance du point d'allumage (m)	Surpression mesurée le long de l'axe x parallèle au jet (kPa)	Surpression mesurée le long de l'axe y perpendiculaire au jet (kPa)	Surpression mesurée le long de l'axe z perpendiculaire au jet (kPa)
0	13.7*		
1	19.4*	13.3	13.4
2	23.3*	12.6	11.6
3	36.1*	11.2	9.57
4	42.9*	9.19	8.27
5	32.3	8.04	6.81
6	22.5	6.85	5.77
7	17.8	5.74	5.27
8	13.6	4.69	4.32
9	11.0	4.16	3.84
10	8.81	3.65	3.40
15	3.96	2.04	1.90
20	2.08	1.39	1.30
30	0.67	0.60	0.56
40	0.36	0.28	0.27

*jauges à l'intérieur du nuage.

Selon le tableau 3.1, une surpression de 43 kPa, comme celle mesurée à 4 m du point d'allumage, serait assez puissante pour totalement détruire une maison. Toujours selon le tableau 3.1, des surpressions au dessous de 2 kPa sont trop faibles pour causer des dommages structurels. Donc pour un cas semblable où l'allumage se fait très tôt après le début de la fuite, la distance sécuritaire au-devant du jet se situerait aux alentours de 20 m de l'ouverture et de 15 m dans les directions perpendiculaires au jet. La figure 5.29 présente le contour de surpression mesurée 0.024 sec après l'allumage.

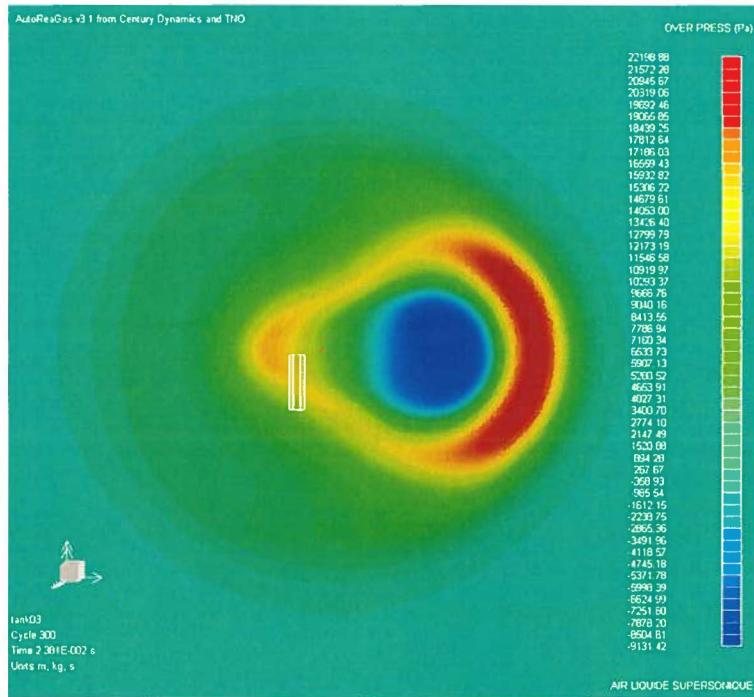


Figure 5.29 Surpression prédictive en fonction de la distance 0.024 sec après l'allumage, obtenue par ARG pour un jet supersonique, 0.082 sec après le début de la fuite. On remarque la puissance marquée de l'onde de choc dans la direction du jet. (Allumage à 0.5 m de l'ouverture, sans importation des vecteurs de vitesse)

La figure 5.30 présente les surpressions maximales mesurées sur l'axe parallèle au jet pour l'explosion initialisée à l'aide d'un point d'allumage situé à 4 m au-devant de l'ouverture. Bien que l'allumage se fasse au même point où la surpression maximale avait été mesurée lors de la simulation précédente, le maximum de surpression (23 kPa,) se trouve à 2.5 m de l'ouverture. Ceci révèle que dans le cas où la vitesse du jet est négligée, la concentration du nuage ainsi que le point d'allumage ont une influence importante sur la position ainsi que l'amplitude du maximum de surpression.

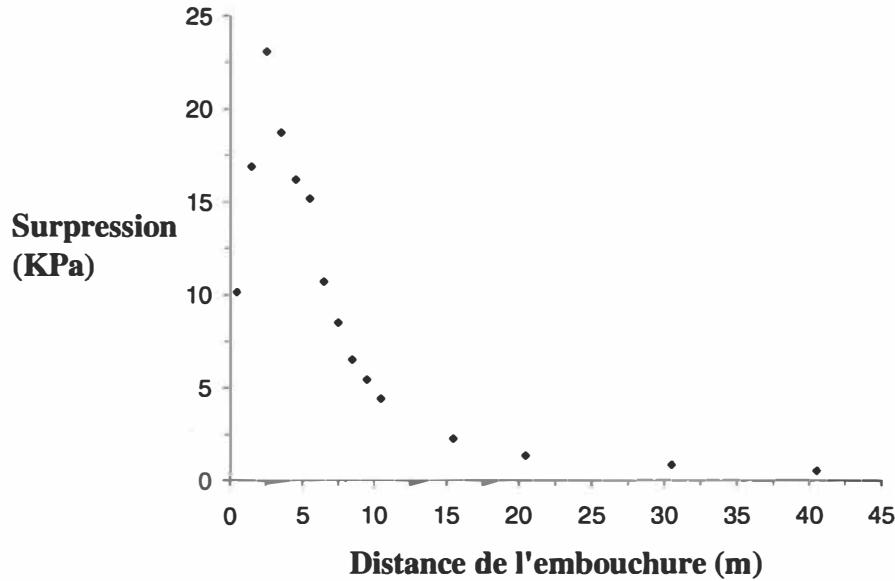


Figure 5.30 Surpressions maximales en fonction de la distance de l'ouverture obtenue par ARG pour un jet supersonique 0.082 sec après le début de la fuite le long de l'axe du jet. On remarque l'ascension des surpressions le long des jauge à l'intérieur du nuage d'hydrogène et la perte d'énergie aussitôt qu'elles sortent des régions à concentration stœchiométriques. (Allumage à 4 m de l'ouverture, sans importation des vecteurs de vitesse)

La figure 5.31 présente le contour de surpression mesuré 0.024 et 0.04 seconde après l'allumage. La figure 5.32 présente l'allure de l'onde de choc mesuré à 2.5 m de l'ouverture.

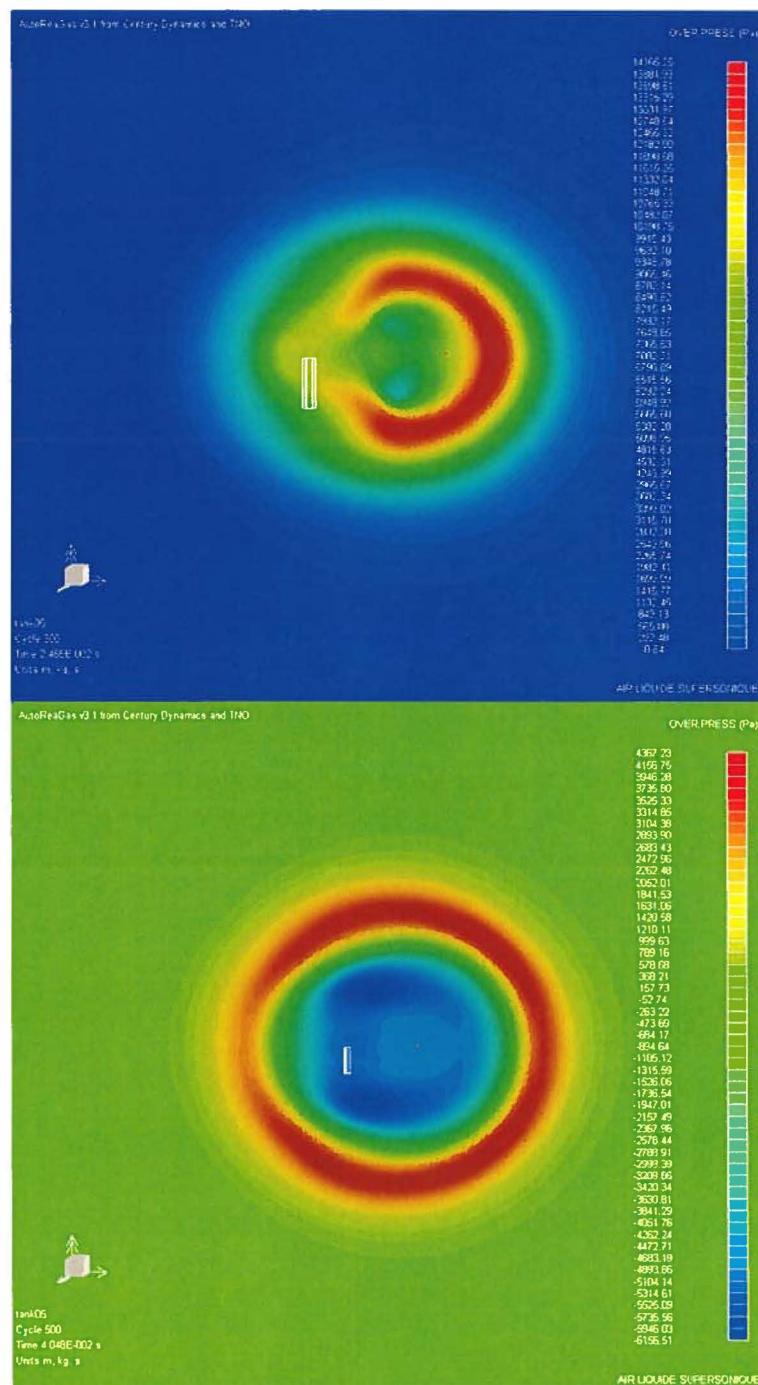


Figure 5.31 Surpression prédictive en fonction de la distance à 0.025 sec et 0.04 sec après l'allumage, obtenue par ARG pour un jet supersonique à 0.082 secondes après le début de la fuite. On remarque qu'un allumage effectué aux extrémités du nuage influence la forme de l'onde de choc et réduit légèrement les surpressions mesurées. (Allumage à 4 m de l'ouverture, sans tenir compte de la distribution de la vitesse dans le nuage)

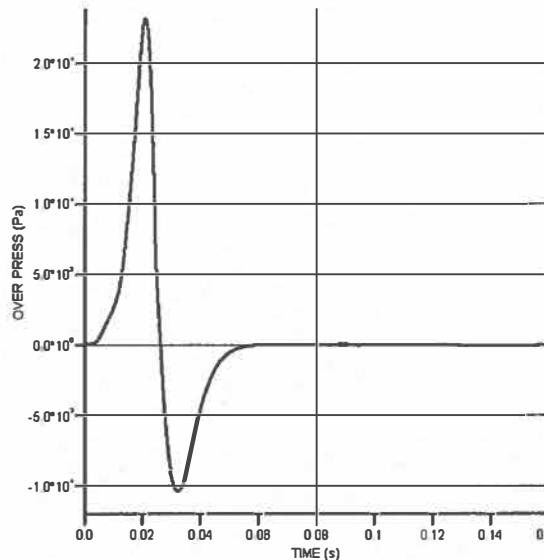


Figure 5.32 Surpression maximale en fonction de la distance à 2.5 m de l'ouverture sur l'axe du jet obtenue par ARG pour un jet supersonique à 0.082 sec après le début de la fuite. (Allumage à 4 m de l'ouverture, sans tenir compte de la distribution de la vitesse dans le nuage)

6. Conclusion

Des simulations de dispersions et d'explosions furent présentées pour des jets d'hydrogène verticaux et horizontaux en régime subsonique stationnaire, pour des jets horizontaux en régime sonique stationnaire et pour un jet horizontal en régime supersonique qui dépend du temps. Les jets provenaient d'une fuite d'hydrogène à travers une ouverture de 6 mm de diamètre. Dans le cas de la fuite supersonique, la pression initiale du réservoir était de 700 bar. La validation de la méthodologie pour l'étude des explosions s'est faite par comparaison avec les résultats expérimentaux présentés par *Seifert, H.* et al. [1]. Pour des jets verticaux subsoniques, l'utilisation d'une vitesse de combustion de l'hydrogène égale à 3.5 m/s menait à des surpressions plus élevées que celles mesurées expérimentalement. Il a été possible de reproduire les résultats expérimentaux en diminuant la vitesse de combustion. On peut conclure que le profil de concentration à l'intérieur du nuage a une influence sur la vitesse de combustion. Pour des nuages plus volumineux, la vitesse de combustion par défaut a été utilisée. Lors de l'importation des données de Fluent à ARG, il a été constaté que les profils de concentration importés dépendent de l'affinité du maillage dans Fluent. Un maillage assez détaillé (0.01 m de coté dans la zone centrale) pour bien reproduire la géométrie des nuages fut donc utilisé. De plus, il a été démontré par comparaison entre les simulations et le modèle présenté par *Birch* et al. [15][16] que les simulations de nuages horizontaux à proximité du sol ont une géométrie et une étendue fondamentalement différente des nuages verticaux.

Dans le cas des simulations subsoniques horizontales, l'étendue maximale mesurée le long de l'axe de la fuite pour un jet de 250 m/s était de 1.77 m pour un contour de 4 % (vol). La surpression maximale mesurée était de 0.246 kPa à 2 m du point d'allumage en présence d'un plafond à 4 m. Pour la simulation sonique, l'étendue maximale mesurée le long de l'axe de la fuite était de 3.58 m pour un contour de 4 % (vol). La surpression maximale mesurée était de 1.17 kPa à 2 m du point d'allumage. Dans le cas de la simulation supersonique, l'étendue maximale mesurée dans l'axe de la fuite, avant que le jet se sépare en deux, à 8.0 secondes était de 60.0 m pour un contour de 4 % (vol) et la

position maximale du nuage détaché était de 65.7 m à 12.5 sec. La surpression maximale mesurée lors de l'explosion d'un nuage formé à 0.082 sec après le début de la fuite était de 42.9 kPa à 4 m du point d'allumage. Il a été trouvé que la dispersion du nuage se faisait linéairement selon l'inverse de la concentration à partir d'une distance de 10 m de l'ouverture. Des ondes de choc ont été observées dans le contour de densité de la zone supersonique à la sortie du réservoir. Les conditions physiques (température, vitesse, pression et fraction massique de l'hydrogène) présentes dans cette zone ont été validées à l'aide des résultats trouvés par *Xu, B.P.* et al. [4]. Pour les explosions, dans le pire des cas étudiés, il a été trouvé que la distance minimale permettant d'éviter des dommages est de 20 m au-devant de la fuite et 15 m tout autour. Il a été trouvé, que l'influence de la vitesse de la fuite, de la turbulence et de la position du point d'allumage sur l'amplitude des ondes de choc n'était pas négligeable. De plus, il a été constaté que la position de la surpression maximale était fortement influencée par la géométrie et la vitesse du nuage.

Bien que des résultats intéressants sur l'allumage de nuages d'hydrogène provenant de jets soient présentés dans ce mémoire, il serait pertinent d'effectuer une étude comparative sur l'allumage de nuages créés par une fuite supersonique à différents moments de leur évolution. De plus, la comparaison des résultats avec un autre programme de dispersion et d'allumage pourrait aussi être envisagée.

7. Bibliographies

1. Seifert H. and H. Giesbrecht, Safer design of inflammable gas vents, Loss prevention and safety promotion in the process industries: 5th International symposium of the European Federation of Chemical Engineering, 1986.
2. Gundelach, V.G., Fortschritte der Sichertechnik II: Berichte aus der Arbeit der Dechema-Fachhausschusse im Jahre 1987, Dechema-Monographien, No 11, 1987.
3. Takeno K., Okabayashi K., Ishinose T., Koushi A., Nokana T., Hashiguchi K. and Chitose K.: Phenomena of dispersion and explosion of high pressurized hydrogen, Proceedings of the International Conference on Safety 2005, Sept 8-10, 2005, Pisa, Italy.
4. Xu B.P., Zhang J.P., Wen J.X., Dembele S. and Karwatzki J., Numerical study of a highly underexpanded hydrogen jet, Proceedings of the International Conference on Safety 2005, Sept 8-10, 2005, Pisa, Italy.
5. AutoReaGas version 3.1 Theory Manual, Century Dynamics & TNO, 2002.
6. Angers B., Hourri A., Bénard P., Tessier P. and Perrin J. (2005), Simulations of Hydrogen Releases from a Storage Tank: Dispersion and Consequences of Ignition, Proceedings of the International Conference on Hydrogen Safety 2005, Sept 8-10, 2005, Pisa, Italy.
7. Angers B., Hourri A., Bénard P., Tessier P. and Perrin J. (2006), Simulations of hydrogen releases from high pressure storage systems, WHEC 16, 13-16 June, 2006 Lyon France.
8. Center for Chemical Process Safety. *Guidelines for evaluating the characteristics of vapor cloud*. American Institute of Chemical Engineers, New York, New York. 1994.
9. Lea, C.J., et Ledin, H.S. *A Review of the State-of-the-Art in Gas Explosion Modelling*. Health and Safety Laboratory, Explosion Group, Harpur Hill, Buxton. 2002.
10. *Yellow Book: Methods for the calculation of physical effects*, CPR 14E, Third Edition 1997.
11. Fickett W., Davis W.C., *Detonation Theory and Experiment*. Dover Publications Inc., Mineola, New York. 1979.
12. Sonntag R.E., Borgnakke C., Van Wylen G.J., *Fundamentals of Thermodynamics*. John Wiley & Sons Inc., USA 1998.
13. Mannan S., Lees's *Loss Prevention in the Process Industries*. Third Edition, Elsevier, Burlington, USA, 2005.
14. Swain, M., Codes and standards analysis, 2004 annual program review meeting of the hydrogen, fuel cells & infrastructure program of the US Department of Energy, 2004
15. Birch, A.D., Brown, D.R., Dodson, M.G., and Swaffield, F., *The Structure and Concentration Decay of high Pressure Jets of Natural Gas*, Combustion Science and Technology 36: 249-261, 1983.
16. Birch, A.D., Hughes, D.J., and Swaffield, F., *Velocity Decay of High Pressure Jets*, Combustion Science and Technology 52: 161-171, 1986.
17. Houf, W., Schefer, R., *Predicting Radiative Heat Fluxes and Flammability Envelopes from Unintended Releases of Hydrogen*, Presented at 16th Annual Hydrogen Conference and Hydrogen Expo USA, March 29 – April 1, Washington, D.C., 2005.

18. Hourri, A., Bénard, B., *Computational Fluid Dynamics Validation, Calibration, and enhancement project*. NRCan Ref.# C0414-CETC 502 Task 5.1. Report submitted to Suart Energy, March 2005.

Annexe 1. Code

Les différents codes utilisés à travers cette étude sont présentés dans cette section.

A1.1 Importation des données de Fluent à AutoReaGas

Cette routine, écrite en Fortran, fut utilisé par AutoReaGas lors de l'importation des contours de concentration et vitesses simuler par Fluent.

```
SUBROUTINE EXVAL (NSUB,I,J,K,IJK,X,Y,Z,C)

INCLUDE  'implic.cmn'
INCLUDE  'GRID.CMN'
INCLUDE  'XN.EQV'
INCLUDE  'YN.EQV'
INCLUDE  'ZN.EQV'

C
C
*****
C      THIS IS A USER SUPPLIED SUBROUTINE WHICH IS CALLED WHEN FILLING
C      EACH CELL.
C
C      YOU CAN USE THIS ROUTINE TO CUSTOM MODIFY THE INITIAL GAS CLOUD
C      CONCENTRATION FOR EACH CELL
C
C
C      INPUT PARAMETERS
C
C      NSUB          CURRENT LOCALGRID #
C      I,J,K,IJK    INDICES FOR CURRENT CELL
C      X,Y,Z        X,Y,Z CO-ORDINATE OF UPPER RIGHT HAND CORDER OF
CELL IJK
C      C            INPUT VOLUME FRACTION OF COMBUSTIBLE GAS (%)
C
C      OUTPUT PARAMETERS
C
C      C            VOLUME FRACTION OF COMBUSTABLE GAS (%)
C
C      NOTES:-
C
C      THIS ROUTINE IS ONLY CALLED FOR USED CELLS ONLY
C
C      ALSO USE THIS ROUTINE TO SET INITIAL VALUES OF VARIABLES SUCH AS
C
C      CDI(IJK)     - DRAG COEF. IN I DIRM
C      CDJ(IJK)     - DRAG COEF. IN J DIRM
C      CDK(IJK)     - DRAG COEF. IN K DIRM
C      D(IJK)       - TOTAL TURBULENT LENGTH SCALE IN A CELL
```

```

C      SUBC(IJK)   -  NUMBER OF SUBGRIDS CONTRIBUTING IN A CELL
C      EPS(IJK)    -  DISSIPATIVE RATE OF TURB. KIN. ENERGY
C      TK(IJK)     -  TURBULENT KINETIC ENERGY
C
C
C ****
C
REAL X, XMIN, XMAX, Y, YMIN, YMAX, Z, ZMIN, ZMAX, CNODE
REAL XNODE, YNODE, ZNODE, XOFF, YOFF, ZOFF
INTEGER MAXNODE, NODE, NODES, DATAPOINTS, IJKXMIN, IJKYMIN
INTEGER IJKZMIN
DIMENSION CARRAY(5000)
CHARACTER (8) FILENAME

C      IF C=100 INVOKE SUBROUTINE

      IF (C.EQ.1.00) THEN

C      HARDWIRED TOTAL NUMBER OF NODE POINTS IN FLUENT DATA

      MAXNODE = 4291

C      NODES = LINES READ

      NODES = 1

C      DATAPOINT = NUMBER OF "GOOD" VALUES IE THAT ARE WITHIN CURRENT
ARG CELL

      DATAPOINTS = 0

      CARRAY = 0

C      HARDWIRED FILENAME

      FILENAME = "TK02.txt"

      OPEN (UNIT=70, FILE=FILENAME, STATUS='OLD', ACTION = "READ",
1           POSITION = "REWIND", ERR=200)

      REWIND 70

C      THIS DO LOOP READS EACH LINE IN THE FLUENT DATA AND STORES
C      THE GOOD CONCENTRATION VALUES IN AN ARRAY TO BE AVERAGED.

      DO 100 NODE = 1, MAXNODE

      READ (70,* ,ERR=201,END=202) XNODE, YNODE, ZNODE, CNODE, UNODE,
1           VNODE, WNODE

C      FIND XMIN, XMAX ETC FOR CURRENT CELL
C      X, Y AND Z FROM ARG ARE THE UPPER VALUES FOR THE CELL

      XMAX = X
      YMAX = Y
      ZMAX = Z

```

```

C      FIND THE LOWER VALUES FOR THE CELL

IJKXMIN = IJKSET(I-1, J, K)
IJKYMIN = IJKSET(I, J-1, K)
IJKZMIN = IJKSET(I, J, K-1)

XMIN = XN(IJKXMIN)
YMIN = YN(IJKYMIN)
ZMIN = ZN(IJKZMIN)

C      IF DATA FOR THE CURRENT LINE IN THE TXT FILE IS APPROPRIATE FOR
THE CURRENT
C      ARG CELL IE IF XMIN < XNODE < XMAX ETC THEN WRITE CONCENTRATION
TO AN ARRAY

C      FLUENT AND ARG MESHES MAY NOT HAVE THE SAME ORIGIN

C      HARDWIRE OFFSETS, POSITION OF ARG ORIGIN WITH RESPECT TO FLUENT
ORIGIN:

XOFF = 40.5
YOFF = 41.4
ZOFF = 0.5

XNODE = XNODE + XOFF
YNODE = YNODE + YOFF
ZNODE = ZNODE + ZOFF

IF (XMIN.LE.XNODE.AND.XMAX.GT.XNODE.AND.YMIN.LE.YNODE.AND.
1     YMAX.GT.YNODE.AND.ZMIN.LE.ZNODE.AND.ZMAX.GT.ZNODE) THEN

CARRAY(NODES)= CNODE

C      INCREMENT THE DATAPoint COUNTER

DATAPOINTS = DATAPOINTS + 1

ENDIF

C      NODES INCREMENTED SO PROGRAM KNOWS HOW FAR TO LOOK DOWN CARRAY
BELOW

NODES = NODES + 1

100    CONTINUE

C      WHEN ALL FLUENT DATA IS READ, AVERAGE C DATA

CSUM = 0

DO N = 1, (NODES)

C      FIND THE TOTAL CONCENTRATION

CSUM = CSUM + CARRAY(N)

```

```

ENDDO

C      AVERAGE THE CONCENTRATION FOR THIS CELL IF THERE IS ANY DATA FOR
IT

CAVG = 0

IF (DATAPOINTS.GT.0) THEN

CAVG = CSUM/(DATAPOINTS)

ENDIF

C      FILL C DATA INTO ARG MESH

C = CAVG*100

C      ECHO VALUES TO DOS WINDOW

WRITE (*,*) I, J, K, C

C      ERROR MESSAGES

RETURN

200  WRITE (*,*) 'ERROR READING DATA'
RETURN
201  WRITE (*,*) 'ERROR READING DATA1'
RETURN
202  WRITE (*,*) 'ERROR READING DATA2'

ENDIF

RETURN

END

C
C      SUBROUTINE EXZONE (LGRID,I1,I2,J1,J2,K1,K2)
INCLUDE  'implic.cmn'

C
INCLUDE  'grid.cmn'
INCLUDE  'xn.eqv'
INCLUDE  'yn.eqv'
INCLUDE  'zn.eqv'

C      CHARACTER*10 LGRID
C
C
*****
C      THIS SUBROUTINE IS USED TO DEFINE THE COORDINATES OF A BLOCK OF
C      NODES WITHIN A LOCALGRID.
C
C      INPUT PARAMETERS:
C
C      LGRID - LOCALGRID NAME

```

```

C      I1,I1  - I-RANGE OF NODES TO BE GENERATED
C      J1,J1  - J-RANGE OF NODES TO BE GENERATED
C      K1,K1  - K-RANGE OF NODES TO BE GENERATED
C
C      TO DEFINE THE COORDINATES OF THE THE NODE (I,J,K), FIRST
C      GET THE GRID ARRAY INDEX OF THE POINT USING THE FUNCTION
C      "IJKSET" AS FOLLOWS:
C
C      IJK = IJKSET (I,J,K)
C
C      THEN ASSIGN THE (X,Y,Z) VALUES AS FOLLOW:
C
C      XN(IJK) = XVALUE
C      YN(IJK) = YVALUE
C      ZN(IJK) = ZVALUE
C
C
C ****
C
C      TEMPORARY ERROR MESSAGE - REPLACE WITH YOUR OWN CODE
CALL CLRMES
C      User subroutine EXZONE missing
CALL MESSAG (CHAR(53))
C
C      TERMINATION OF SUBROUTINE EXZONE
RETURN
END
C
SUBROUTINE EXFLDV (XX,YY,ZZ,UX,UY,UZ)
INCLUDE 'implic.cmn'

CHARACTER (8) FILENAME
REAL XX, YY, ZZ, CSIZE, XMIN, YMIN, ZMIN, XNODE, YNODE, ZNODE
REAL CNODE, UNODE, VNODE, WNODE
INTEGER MAXNODE, NODE

C
C ****
C      THIS SUBROUTINE IS USED TO INITIALISE THE VECTOR FLOW FIELD
C
C      INPUT PARAMETERS:
C
C          XX, YY, ZZ - THE X,Y AND Z LOCATION OF THE VECTOR
C
C      ON RETURN
C
C          UX, UY, UZ - THE THREE COMPONENTS OF THE VELOCITY VECTOR
C                      AT THIS LOCATION (IN SI UNITS)
C
C ****
C
C      IF CELL IS OUTSIDE OF CLOUD ZONE, SKIP SUBROUTINE
C
C      HARDWIRED CLOUD ZONE LIMITS
C
CXMIN = 40.0
CXMAX = 45.5

```

```

CYMIN = 40.0
CYMAX = 42.8
CZMIN = 0.0
CZMAX = 1.3

IF (XX.LT.CXMIN.OR.XX.GT.CXMAX.OR.YY.LT.CYMIN.OR.YY.GT.CYMAX.
1      OR.ZZ.LT.CZMIN.OR.ZZ.GT.CZMAX) THEN

GOTO 300

ELSE

C   HARDWIRE FILENAME

FILENAME = "TK02.txt"

OPEN (UNIT=70, FILE=FILENAME, STATUS='OLD', ACTION = "READ",
1      POSITION = "REWIND", ERR=200)

REWIND 70

C   HARDWIRE NUMBER OF LINES IN TEXT FILE

MAXNODE = 4291

DO NODE = 1, MAXNODE

READ (70,* ,ERR=201,END=202) XNODE, YNODE, ZNODE, CNODE, UNODE,
1      VNODE, WNODE

C   HARDWIRE IN CELL SIZE IN ZONE OF INTEREST TO FIND LOWER LIMITS

CSIZE = 0.1

XMIN = XX - CSIZE
YMIN = YY - CSIZE
ZMIN = ZZ - CSIZE

C   HARDWIRE OFFSETS, POSITION OF ARG ORIGIN WITH RESPECT TO FLUENT
ORIGIN:

XOFF = 40.5
YOFF = 41.4
ZOFF = 0.5

XNODE = XNODE + XOFF
YNODE = YNODE + YOFF
ZNODE = ZNODE + ZOFF

C   FIND IF DATA IS FOR CURRENT CELL

IF (XMIN.LE.XNODE.AND.XX.GT.XNODE.AND.YMIN.LE.YNODE.AND.
1      YY.GT.YNODE.AND.ZMIN.LE.ZNODE.AND.ZZ.GT.ZNODE) THEN

C   IF DATA IS FOR CURRENT CELL SET VELOCITIES

UX = UNODE

```

```
UY = VNODE
UZ = WNODE

C   WRITE (*,*) "X = ",XX, "X VEL = ", UX
C   WRITE (*,*) "Y = ",YY, "Y VEL = ", UY
C   WRITE (*,*) "Z = ",ZZ, "Z VEL = ", UZ

ENDIF

ENDDO

ENDIF

C   ERRORS

RETURN

200  WRITE (*,*) 'ERROR READING DATA'
      RETURN
201  WRITE (*,*) 'ERROR READING DATA1'
      RETURN
202  WRITE (*,*) 'ERROR READING DATA2'

300  CONTINUE
      RETURN
      END
```

A1.2 Optimisation de l'importation des données de Fluent à AutoReaGas

Le code suivant fut développé pour augmenter la vitesse de traitement des données lors de leurs transferts du maillage de Fluent au maillage d'AutoReaGas.

```
// MoyenneGrid.cpp
//
#include "stdafx.h"

using namespace std;

int _tmain()
{
    int Nbi,Nbj,Nbk,Nb, n, loop, poire=0;
    double FluentX, FluentY, FluentZ, FluentVX, FluentVY, FluentVZ,
FluentMole;
    char nom_fichier[150] = "Tank8_9_OptimizedMesh_Cylindre_4PC.txt";
    char
nom_fichier_mod[150] = "Tank8_9_OptimizedMesh_Cylindre_4PC_Moyenner.txt";

    //Variable du GRID ARG
    double *ARGX;
    ARGX=(double*)malloc(30000*sizeof(double));
    double *ARGY;
    ARGY=(double*)malloc(30000*sizeof(double));
    double *ARGZ;
    ARGZ=(double*)malloc(30000*sizeof(double));

    //Variables des positions moyenneé de Fluent
    double *FAX;
    FAX=(double*)malloc(30000*sizeof(double));
    double *FAY;
    FAY=(double*)malloc(30000*sizeof(double));
    double *FAZ;
    FAZ=(double*)malloc(30000*sizeof(double));
    double *FAMole;
    FAMole=(double*)malloc(30000*sizeof(double));
    double *FAVX;
    FAVX=(double*)malloc(30000*sizeof(double));
    double *FAYV;
    FAYV=(double*)malloc(30000*sizeof(double));
    double *FAVZ;
    FAVZ=(double*)malloc(30000*sizeof(double));
    double *FAFacteurDivision;
    FAFacteurDivision=(double*)malloc(30000*sizeof(double));

    //Initialisation du Tableau FA
    for (int m=0;m<30000;m++){
        FAX[m]=0;
        FAY[m]=0;
        FAZ[m]=0;
        FAMole[m]=0;
        FAVX[m]=0;
```

```

FAVY[m]=0;
FAVZ[m]=0;
FAFacteurDivision[m]=0;
}
wcout<<"Tableau FA initialisé \n";

//Formation du GRID ARG
Nb=0;
Nbi=54; //55 minus 1 pour être au centre de la cellule
Nbj=27; //28 minus 1 pour être au centre de la cellule
Nbk=17; //18 minus 1 pour être au centre de la cellule
for (int i=0;i<=Nbi;i++){
    for (int j=0;j<=Nbj;j++){
        for (int k=0;k<=Nbk;k++){
            ARGX[Nb]=-0.5+i*0.1+0.05;
            ARGY[Nb]=-1.4+j*0.1+0.05;
            ARGZ[Nb]=-0.5+k*0.1+0.05;
            Nb++;
        }
    }
}

ofstream outfile_arg("arg_node_points.txt", ios::out);
if (!outfile_arg){
    cerr <<"Error: output file could not be opened.\n";
    exit(1);
}
for (int s=0;s<Nb;s++){
    outfile_arg<<ARGX[s]<< "      "<<ARGY[s]<<""
"<<ARGZ[s]<<"\n";
}
outfile_arg.close();

wcout<<"Grid ARG initialisé \n";

//Ouverture du fichier non moyenné
ifstream infile_donnee(nom_fichier, ios::out);
if (!infile_donnee){
    cerr <<"Error: output file could not be opened.\n";
    exit(1);
}

//Traitement du fichier non moyenné. Moyennage BRUTE FORCE, ligne
de fichier par ligne de fichier
//comparant chaque ligne au GRID de ARG.
while(infile_donnee>>FluentX>>FluentY>>FluentZ>>FluentMole>>Flu
tVX>>FluentVY>>FluentVZ){
    n=0;
    loop=1;
    while(loop==1){
        if ((abs(FluentX-ARGX[n]))<=0.05 && (abs(FluentY-
ARGY[n]))<=0.05 && (abs(FluentZ-ARGZ[n]))<=0.05){
            if (FAMole[n]==0){
                FAX[n]=ARGX[n];
                FAY[n]=ARGY[n];
                FAZ[n]=ARGZ[n];
                FAMole[n]=FluentMole;
            }
        }
    }
}

```

```

        FAVX[n]=FluentVX;
        FAVY[n]=FluentVY;
        FAVZ[n]=FluentVZ;
        FAFacteurDivision[n]=1;
    }
    else{
        FAMole[n]=FAMole[n]+FluentMole;
        FAVX[n]=FAVX[n]+FluentVX;
        FAVY[n]=FAVY[n]+FluentVY;
        FAVZ[n]=FAVZ[n]+FluentVZ;

FAFacteurDivision[n]=FAFacteurDivision[n]+1;
    }
    loop=0;
}
else{
    n++;
}
}

infile_donnee.close();
wcout<<"Moyenne Phase 1 Terminé \n";

//Moyennage
for (int p=0;p<Nb;p++) {
    if (FAFacteurDivision[p]!=0) {
        FAMole[p]=FAMole[p]/FAFacteurDivision[p];
        FAVX[p]=FAVX[p]/FAFacteurDivision[p];
        FAVY[p]=FAVY[p]/FAFacteurDivision[p];
        FAVZ[p]=FAVZ[p]/FAFacteurDivision[p];
    }
}
wcout<<"Moyenne Phase 2 Terminé \n";

//Copie des données moyennées dans le fichier texte
ofstream outfile_donnee(nom_fichier_mod, ios::out);
if (!outfile_donnee) {
    cerr <<"Error: output file could not be opened.\n";
    exit(1);
}

for (i=0;i<Nb;i++){
    if(FAMole[i]!=0){
        outfile_donnee<<FAX[i]<<      "<<FAY[i]<<"
"<<FAZ[i]<<"      "<<FAMole[i]<<"      "<<FAVX[i]<<"      "<<FAVY[i]<<"
"<<FAVZ[i]<<"\n";
    }
}
outfile_donnee.close();

return 0;
}

```

A1.3 Fonction définie par l'usager pour la pression, température et débit dans Fluent

Le code suivant fut utilisé dans Fluent pour spécifier la température, la pression et le débit à l'ouverture d'une fuite supersonique provenant d'un réservoir de 700 bar se déversant dans l'atmosphère à travers une ouverture de 6 mm de diamètre.

```
#include "udf.h"

/* This function determines the mass flow to be used as a boundary
condition for a "mass flow inlet" boundary.*/

DEFINE_PROFILE (mass_flow_rate_v16, thread, nv)
{
    face_t f;
    double time = RP_Get_Real ("flow-time") + 5.0;
    double flow = 0;

    // Calculate de flow for this time of simulation. The flow
given must be in kg/(m2*s)
    if (time <= 10)
        flow = (2.2622E-8)*pow(time,6) - (1.2463E-
6)*pow(time,5) + (3.5352E-5)*pow(time,4) - (7.1877E-4)*pow(time,3) +
(1.157E-2)*pow(time,2) - (1.4035E-1)*time + 9.9447E-1;
    else if (time <= 20)
        flow = (2.3866E-9)*pow(time,6) - (2.8230E-
7)*pow(time,5) + (1.4971E-5)*pow(time,4) - (4.7177E-4)*pow(time,3) +
(9.7624E-3)*pow(time,2) - (0.13285)*time + 0.98088;
    else if (time <= 30)
        flow = (2.4219E-10)*pow(time,6) - (4.7661E-
8)*pow(time,5) + (4.064E-6)*pow(time,4) - (1.9545E-4)*pow(time,3) +
(5.7322E-3)*pow(time,2) - (0.10076)*time + 0.87194;
    else if (time <= 40)
        flow = (3.4406E-13)*pow(time,6) - (2.6206E-
9)*pow(time,5) + (5.4815E-7)*pow(time,4) - (4.8185E-5)*pow(time,3) +
(2.2411E-3)*pow(time,2) - (5.6353e-2)*time + 0.63523;
    else if (time <= 50)
        flow = (5.2285E-11)*pow(time,6) - (1.4764E-
8)*pow(time,5) + (1.7603E-6)*pow(time,4) - (1.1429E-4)*pow(time,3) +
(4.3142E-3)*pow(time,2) - (9.1699E-2)*time + 0.8903;
    else if (time <= 60)
        flow = (1.0176E-9)*pow(time,6) - (3.3681E-
7)*pow(time,5) + (4.6398E-5)*pow(time,4) - (3.4057E-3)*pow(time,3) +
(1.4052E-1)*pow(time,2) - (3.0918)*time + 28.374;
    else if (time <= 80)
        flow = -(1.2433E-12)*pow(time,6) + (2.9254E-
10)*pow(time,5) - (1.0584E-8)*pow(time,4) - (2.8119E-6)*pow(time,3) +
(3.5167E-4)*pow(time,2) - (1.6172E-2)*time + 0.28496;
    else if (time <= 120)
        flow = (5.4254E-13)*pow(time,6) - (3.4108E-
10)*pow(time,5) + (8.9367E-8)*pow(time,4) - (1.2504E-5)*pow(time,3) +
(9.869E-4)*pow(time,2) - (4.1767E-2)*time + 0.74349;
```

```

    else
        flow = 9.5579E-5;

    flow = flow / 2.827433388e-5; // 2.6450296e-5 is the area
of the outflow surface (m2).

    // Set the mass flow on all cell faces of boundary face.
begin_f_loop (f, thread)
{
    F_PROFILE(f, thread, nv) = flow;
}
end_f_loop (f, thread)
}

/* This function determines the pression to be used as a boundary
condition for a "mass flow inlet" boundary. */

DEFINE_PROFILE (pression_custom_v16, thread, nv)
{
    face_t f;
    double time = RP_Get_Real ("flow-time") + 5.0;
    double pression = 0;

    if (time <= 10)
        pression = (1.1706)*pow(time,6) -
(63.628)*pow(time,5) + (1727.3)*pow(time,4) - (32420)*pow(time,3) +
(467181)*pow(time,2) - (4.957E6)*time + 3.0031E7;
    else if (time <= 20)
        pression = (0.1012)*pow(time,6) -
(11.931)*pow(time,5) + (622.71)*pow(time,4) - (18945)*pow(time,3) +
(368238)*pow(time,2) - (4.5463E6)*time + 2.9288E7;
    else if (time <= 30)
        pression = (9.5754E-3)*pow(time,6) -
(1.8296)*pow(time,5) + (150.84)*pow(time,4) - (6961.5)*pow(time,3) +
(193463)*pow(time,2) - (3.1569E6)*time + 2.4585E7;
    else if (time <= 40)
        pression = (2.2425E-3)*pow(time,6) -
(0.54661)*pow(time,5) + (57.034)*pow(time,4) - (3292.3)*pow(time,3) +
(112456)*pow(time,2) - (2.1997E6)*time + 1.9855E7;
    else if (time <= 50)
        pression = (5.8990E-4)*pow(time,6) -
(0.17736)*pow(time,5) + (22.662)*pow(time,4) - (1586.8)*pow(time,3) +
(64905)*pow(time,2) - (1.4938E6)*time + 1.55E7;
    else if (time <= 60)
        pression = -(0.79725)*pow(time,6) +
(259.43)*pow(time,5) - (35142)*pow(time,4) + (2.5364E6)*pow(time,3) -
(1.0288E8)*pow(time,2) + (2.2236E9)*time - 2.0006E0;
    else
        pression = 101350;

    pression = pression - 101350; // Pression de jauge

begin_f_loop (f, thread)
{
    F_PROFILE(f, thread, nv) = pression;
}
end_f_loop (f, thread)
}

```

```
}

/* This function determines the temperature to be used as a boundary
condition for a "mass flow inlet" boundary. */

DEFINE_PROFILE (temperature_custom_v16, thread, nv)
{
    face_t f;
    double time = RP_Get_Real ("flow-time") + 5.0;
    double temperature = 0;

    temperature = (2.2012E-9)*pow(time,6) - (9.1866E-
7)*pow(time,5) + (1.4225E-4)*pow(time,4) - (1.0444E-2)*pow(time,3) +
(0.44058)*pow(time,2) - (12.413)*time + 250.55;

    begin_f_loop (f, thread)
    {
        F_PROFILE(f, thread, nv) = temperature;
    }
    end_f_loop (f, thread)
}
```

Annexe 2. Captures d'écran

A2.1 Fluent

Voici une série de captures d'écran présentant les différentes fenêtres permettant de configurer les modèles et paramètres propres aux simulations. Cette annexe est un complément pour la section 4.1.1.

