
Développement d'une approche par simulation des grandes échelles pour la déflagration

– Contexte et Objectifs –

L'explosion des gaz et plus particulièrement celle de l'hydrogène constitue une source d'accidents majeurs aussi bien dans les installations industrielles classiques que nucléaires. Dans les installations nucléaires, ces explosions peuvent entraîner la perte de confinement des matières radioactives et leur rejet dans l'environnement. Afin de prévenir ces risques et de limiter leurs conséquences, il est primordial de se doter d'outils de calculs capables de prédire de manière réaliste les charges en pression et en température générées par l'explosion de gaz.

Le logiciel P²REMICS [14, 5] (Partially Premixed Combustion Solver) a été développé par l'IRSN dans ce but. Il permet de traiter les écoulements turbulents réactifs compressibles ou faiblement compressibles (selon une approche à faible nombre de Mach), tels que ceux rencontrés lors d'une explosion. La turbulence est modélisée selon des modèles statistiques (RANS) en un point, à savoir, principalement, les modèles $k-\epsilon$ ou $k-\omega$ avec ou sans lois de parois (extension bas-Reynolds ou relaxation elliptique). Le modèle de combustion suppose que le processus qui transforme les gaz frais en gaz brûlés advient dans une zone réactive mince se propageant à travers l'écoulement. Le modèle implémenté est un modèle de vitesse de flamme. Dans ce type de modèle, la position du front de flamme est déterminée en résolvant une équation ad hoc, qui peut être obtenue par une approche de type level-set ou Volume-Of-Fluid (VOF), appelée la G-équation [7, 9]. Les équations de conservation des espèces sont résolues afin de pouvoir traiter les flammes partiellement prémélangées. On introduit dans celles-ci un taux de réaction original dépendant de l'inconnue de la G-équation, avec une limitation inspirée du plus classique "Eddy Break-Up model", permettant de garder les fractions massiques des espèces dans leurs bornes physiques. Enfin, le modèle de vitesse de flamme est fermé par une corrélation [2, 3, 16, 7, 9, 15], le plus souvent obtenue expérimentalement, qui dépend des propriétés du mélange des gaz frais (via la vitesse de flamme laminaire) ainsi que des caractéristiques turbulentes de l'écoulement (longueurs caractéristiques, énergie cinétique turbulente).

La validation du logiciel sur différentes expériences à petite et à moyenne échelle a mis en évidence d'une part la difficulté de choisir une corrélation de vitesse de flamme "adaptée" à la configuration étudiée et d'autre part la grande dispersion de résultats obtenus selon la corrélation choisie. Cette difficulté est amplifiée par le fait que ces corrélations dépendent fortement des caractéristiques turbulentes de l'écoulement et qu'il n'existe à ce jour pas ou très peu de résultats expérimentaux permettant de valider les modèles de turbulence implémentés dans P²REMICS dans les situations d'intérêt pour l'IRSN (très fort nombre de Reynolds, grande échelle spatiale).

L'objectif de cette thèse est donc tout d'abord de mieux appréhender les phénomènes en jeu en s'appuyant sur une modélisation des déflagrations turbulentes par une technique de simulation des grandes échelles (SGE), plus précise que celle utilisée à ce jour dans le logiciel. Ceci nous permettra par la suite de construire, pour les applications industrielles, une approche RANS plus prédictive en développant une nouvelle corrélation de vitesse de flamme ou en corrigeant celles déjà existantes, ou plus simple-

ment en instaurant des règles qui permettront de choisir la corrélation la plus adaptée à une situation donnée.

– Sujet –

Différents modèles de simulation des grandes échelles pour les déflagrations turbulentes existent d'ores et déjà dans la littérature [11, 13, 12], mais rares sont ceux qui ont été appliqués à des situations à fort nombre de Reynolds. Après une étude bibliographique approfondie des modèles existants, la première étape sera le développement et l'implémentation dans le logiciel P²REMICS d'un modèle aux grandes échelles adapté à nos configurations d'intérêt. On pourra s'inspirer des modèles aux grandes échelles de type level-set existants [10, 6], ce qui aura l'avantage de minimiser les efforts d'implémentation et de se concentrer sur le développement d'un modèle pour la vitesse de flamme turbulente sous-maille. Une approche différente, complémentaire, sera d'utiliser un modèle de flamme épaissie [4, 13, 12], modèle qui a l'avantage de permettre une description fine du front de flamme.

Une fois cette étape terminée, il s'agira de comparer et de valider ces deux approches sur des configurations académiques [8, 13], en s'appuyant sur des calculs DNS ou des grandes échelles de la littérature. Ces techniques permettant une description plus fine de la turbulence, il sera possible de les utiliser afin d'améliorer les modèles de turbulence existants.

Par la suite, on confrontera les approches aux grandes échelles et RANS sur des configurations d'intérêt (flammes accélérées par des obstacles). L'étude des flammes accélérées sera effectuée dans le cadre du projet ANR MITHYGÈNE avec l'interprétation des expériences effectuées dans l'enceinte ENACCEF2 [1]. Les expériences effectuées au cours de ce projet sont d'autant plus intéressantes qu'elles disposent d'un dispositif permettant d'obtenir des mesures des champs de vitesses dans les gaz frais au cours du transitoire. La visualisation du contour de la flamme par une approche de type Schlieren est également disponible. Lors de cette étape, on se concentrera sur le modèle à vitesse de flamme à proprement parler et plus particulièrement sur les corrélations de vitesse de flamme, le but étant de construire une approche RANS plus prédictive et plus adaptée aux configurations industrielles.

Domaine d'études - Explosion, Calcul scientifique

Techniques utilisées - Mécanique des fluides, Turbulence, Calcul scientifique, Programmation objet en C++

Divers - Lieu : Centre Nucléaire de Cadarache, Ecole Centrale de Paris - Contact : laura.gastaldo@irsn.fr

Références

- [1] A. Bentaib and N. Chaumeix. MITHYGÈNE-project : Specification report for Double Blind simulations of Flame propagation in the new ENACCEF2 facility, 2016.
- [2] D. Bradley, A.K.C. Lau, and M. Lawes. Flame stretch rate as a determinant of turbulent burning velocity. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London A*, 338 :359–387, 1992.
- [3] K.N.C. Bray. Studies of the turbulent burning velocity. *Proceedings of the Royal Society of London A*, 431 :315–335, 1990.
- [4] T. Butler and P. O'Rourke. A numerical method for two dimensional unsteady reacting flows. In *Symposium (International) on Combustion*, volume 16, pages 1503–1515, 1977.
- [5] L. Gastaldo, Babik F., F. Duval, C. Lapuerta, and J. C. Latché. Simulation of accelerated deflagration using the P²REMICS software. In NURETH Organization, editor, *International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal Hydraulics*, volume 17, 2017.
- [6] E. Knudsen and H. Pitsch. A dynamic model for the turbulent burning velocity for large eddy simulation of premixed combustion. *Combustion and Flame*, 154 :740–760, 2008.

- [7] A.N. Lipatnikov and J. Chomiak. Turbulent flame speed and thickness : phenomenology, evaluation, and application in multi-dimensional simulations. *Progress in Energy and Combustion Science*, 28 :1–74, 2002.
- [8] A. R. Masri, A. AlHarbi, S. Meares, and S.S. Ibrahim. A Comparative Study of Turbulent Premixed Flames Propagating Past Repeated Obstacles. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 51 :7690–7703, 2012.
- [9] N. Peters. *Turbulent Combustion*. Cambridge Monographs of Mechanics. Cambridge University Press, 2000.
- [10] H. Pitsch. Large eddy simulations of turbulent combustion. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 38 :453–482, 2006.
- [11] D. Veynante and V. Moureau. Analysis of dynamic models for large eddy simulations of turbulent premixed combustion. *Combustion and Flame*, 162 :4622–4642, 2015.
- [12] P.S. Volpiani. *Modèle de plissement dynamique pour la simulation aux grandes échelles de la combustion turbulente prémélangée*. Sciences mécaniques et Énergétiques, matériaux et géosciences, Université de Paris-Saclay, 2017.
- [13] P.S. Volpiani, T. Schmitt, O. Vermorel, P. Quillatre, and D. Veynante. Large eddy simulations of explosion deflagrating flames using a dynamic wrinkling formulation. *Combustion and Flame*, 186 :17–31, 2017.
- [14] P²REMICS Collaborative website. Physical modelling in P²REMICS. Technical report, IRSN, <http://gforge.irsn.fr/gf/project/p2remics/docman>.
- [15] M. Wirth and N. Peters. Turbulent premixed combustion : a flamelet formulation and spectral analysis in theory and IC-engine experiments. In *24th Symposium (International) on Combustion - The Combustion Institute*, pages 483–501, 1992.
- [16] V.L. Zimont. Gas premixed combustion at high turbulence. Turbulent Flame Closure combustion model. *Experimental Thermal and Fluid Science*, 21 :179–186, 2000.