

Sujet de thèse

Modélisation multi-échelle de la combustion d'un nuage de particules : mélanges hybrides et transferts radiatifs

– Contexte et Objectifs –

Les risques d'explosion de poussières sont fréquemment rencontrés dans les installations industrielles. Les secteurs industriels concernés sont nombreux (industrie pharmaceutique, céréalière, ...) et les composés pulvérulents mis en jeu sont d'une grande diversité (matières organiques, ...). Dans le secteur nucléaire, un des scénarios étudiés traite du risque d'explosion de poussières de graphite lié aux opérations de démantèlement des réacteurs UNGG (Uranium Natural Graphite Gaz). D'autres types de poussières sont concernés par le risque d'explosion comme par exemple les poudres de zirconium [7] mises en oeuvre dans la fabrication des gaines de combustible ou des poussières de graphite et de tungstène [5] ou de béryllium [4] remises en suspension dans le tore ITER en cas d'accident de perte de vide.

La thèse proposée s'inscrit dans le cadre du développement d'un outil de calcul prédictif de propagation de flamme plane laminaire dans un nuage de poussières. Les modèles de vitesse de flamme turbulentes étant construits comme une correction de la vitesse de flamme laminaire, cet outil sera utilisé comme pré-processeur d'un calcul P²REMICS à la manière de CHEMKIN ou CANTERA pour les mélanges gazeux. Un tel outil est indispensable, dans la mesure où le nombre de paramètres (composition, granulométrie, concentration, température, ...) est trop grand pour permettre une exploration expérimentale systématique. Cette exploration expérimentale est de plus rendue difficile dans la mesure où la mise en suspension des poussières pour obtenir un nuage homogène permet difficilement de s'affranchir des effets de la turbulence.

Les développements menés au cours d'une première thèse sur le sujet ont permis de développer un code de simulation Euler-Lagrange pour la combustion de particules de graphite [1]. Les développements menés dans le cadre d'une technique de changement d'échelle [3] ont permis d'apporter une analyse critique de la modélisation des transferts de masse et de chaleur. Des comparaisons avec une simulation numérique directe d'un problème non-réactif ont permis d'illustrer les qualités prédictives du modèle proposé. Enfin, dans le cadre d'une chimie simplifiée en phase gazeuse, des premières simulations de propagation de flamme plane laminaire ont été menées pour un mélange air-graphite.

Le sujet de thèse proposé consiste à poursuivre les développements menés pour des particules de graphite et de prendre en compte des mélanges dits hybrides, c'est-à-dire des mélanges constitués de particules de graphite et des particules métalliques. Il s'agit principalement de particule de fer ou d'aluminium pour les applications UNGG et du tungstène ou du béryllium pour les applications ITER. Pour ce type de particules, les transferts radiatifs jouent un rôle important sur la vitesse du front de combustion et leur modélisation s'appuiera sur la technique de changement d'échelle [6] utilisée pour décrire les transferts chaleur par conducto-convection.

Ce travail sera mené en collaboration avec Yohan Davit et Michel Quintard du groupe GEMP (Groupe d'Études sur les Milieux Poreux) de l'Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse, Unité Mixte

de Recherche de Toulouse (UMR CNRS-INP Toulouse-Université Toulouse 3). Ce groupe mène une activité de premier plan sur la modélisation multi-échelle des milieux hétérogènes.

– Déroulement de la thèse –

Pour atteindre les objectifs fixés, la thèse se déroulera de la manière suivante :

- La première année sera consacrée à une étude bibliographique des modèles d’oxydation de particule métallique (fer, aluminium, tungstène et béryllium). Une description macroscopique des transferts de masse sera proposée dans le cadre d’une technique de changement d’échelle basée sur la méthode de moyenne volumique [3]. Des premières simulations Euler-Lagrange seront menées pour illustrer les aspects hybrides.
- Les développements conduisant au modèle macroscopique décrivant les transferts radiatifs seront menés au cours de la deuxième année. Ces développements s’appuieront également sur une technique de changement d’échelle basée sur la méthode de moyenne volumique [6]. Le modèle macroscopique proposé pour les particules métalliques (oxydation des particules et transferts radiatifs) sera validé à partir de simulations Euler-Lagrange en comparant les résultats obtenus pour la vitesse de flamme avec les données expérimentales disponibles dans la littérature.
- Enfin, la troisième année sera consacrée à des simulations Euler-Lagrange à l’échelle de quelques particules mettant en oeuvre l’ensemble des fermetures proposées pour des mélanges hybrides. Ces simulations seront menées pour un nuage homogène monodisperse de particules de graphite et métallique et les résultats seront comparés aux données expérimentales disponibles dans la littérature [2]. Une étude sera également menée sur les effets polydisperses. Ces résultats seront utilisés à terme en données d’entrée de calculs P²REMICS sur des cas de déflagrations turbulentes disponibles dans la littérature.

Domaine d’études - Explosion, Calcul scientifique

Techniques utilisées - Mécanique des fluides, Changement d’échelle, Programmation objet C++

Divers - Lieu : Centre Nucléaire de Cadarache - Contact : fabien.duval@irsn.fr

Références

- [1] M. Belerajoul, Y. Davit, F. Duval, M. Quintard, and O. Simonin. Eulerian-Lagrangian approach to modeling heat transfer in gas-particle mixtures : volume-averaged equations, multi-scale modeling and comparison with DNS. In *16th International Heat Transfer Conference*, 2018. to be published.
- [2] M. D’Amico. *Étude expérimentale et modélisation des explosions hybrides solides/solides : application au cas des mélanges de poussières graphite/métaux*. PhD thesis, Université de Lorraine - LRGP, 2016.
- [3] Y. Davit and M. Quintard. *Handbook of Porous Media*, chapter Theoretical analysis of transport in porous media : Multi-Equation and Hybrid Models for a Generic Transport Problem with Non-Linear Source Terms. Taylor & Francis, 2015.
- [4] D.A. Davydov, O.V. Kholopova, and B.N. Kolbasov. Some characteristics of fine beryllium particle combustion. *Journal of Nuclear Materials*, 367-370, Part B :1079–1084, aug 2007.
- [5] A. Denkevits and S. Dorofeev. Dust explosion hazard in ITER : Explosion indices of fine graphite and tungsten dusts and their mixtures. *Fusion Engineering and Design*, 75-79 :1135–1139, 2005.
- [6] V. Leroy, B. Goyeau, and J. Taine. Coupled upscaling approaches for conduction, convection, and radiation in porous media : Theoretical developments. *Transport in Porous Media*, 98(2) :323–347, 2013.
- [7] T. Matsuda, M. Yashima, M. Nifuku, and H. Enomoto. Some aspects in testing and assessment of metal dust explosions. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 14(6) :449–453, 2001.