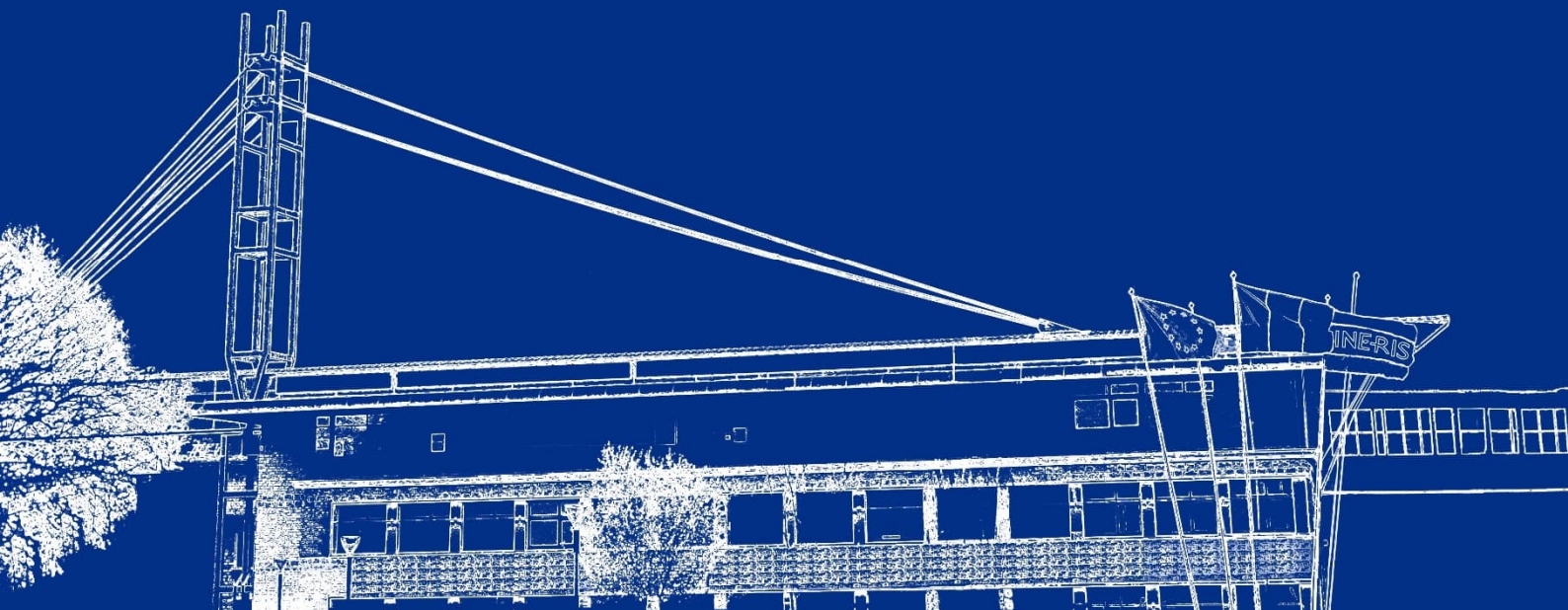




(ID Modèle = 454913)

Ineris - 226908 - 2791408 - v1.0

06/11/2024

Guide de Bonnes Pratiques pour la réalisation de modélisations CFD pour des scénarios d'explosion en situation accidentelle

PRÉAMBULE

Le présent document a été réalisé au titre de la mission d'appui aux pouvoirs publics confiée à l'Ineris, en vertu des dispositions de l'article R131-36 du Code de l'environnement.

La responsabilité de l'Ineris ne peut pas être engagée, directement ou indirectement, du fait d'inexactitudes, d'omissions ou d'erreurs ou tous faits équivalents relatifs aux informations utilisées.

L'exactitude de ce document doit être appréciée en fonction des connaissances disponibles et objectives et, le cas échéant, de la réglementation en vigueur à la date d'établissement du document. Par conséquent, l'Ineris ne peut pas être tenu responsable en raison de l'évolution de ces éléments postérieurement à cette date. La mission ne comporte aucune obligation pour l'Ineris d'actualiser ce document après cette date.

Au vu de ses missions qui lui incombent, l'Ineris, n'est pas décideur. Les avis, recommandations, préconisations ou équivalent qui seraient proposés par l'Ineris dans le cadre des missions qui lui sont confiées, ont uniquement pour objectif de conseiller le décideur dans sa prise de décision. Par conséquent, la responsabilité de l'Ineris ne peut pas se substituer à celle du décideur qui est donc notamment seul responsable des interprétations qu'il pourrait réaliser sur la base de ce document. Tout destinataire du document utilisera les résultats qui y sont inclus intégralement ou sinon de manière objective. L'utilisation du document sous forme d'extraits ou de notes de synthèse s'effectuera également sous la seule et entière responsabilité de ce destinataire. Il en est de même pour toute autre modification qui y serait apportée. L'Ineris dégage également toute responsabilité pour chaque utilisation du document en dehors de l'objet de la mission.

Nom de la Direction en charge du rapport : DIRECTION INCENDIE DISPERSION EXPLOSION

Rédaction : LECOCQ GUILLAUME ; HEUDIER LAURE

Vérification : LEPRETTE EMMANUEL ; TRUCHOT BENJAMIN

Approbation : Document approuvé le 06/11/2024 par PIQUETTE BERNARD

Liste des personnes ayant participé à l'élaboration du document : Vincent BLANCHETIERE (GRTgaz), Antoine DUTERTE (TOTAL Energies), Laura GASTALDO (IRSN), Romain JAMBUT (GRTgaz), Alban MAHON (APSYS), Namane MECHITOUA (EDF), Sophie TRELAT (IRSN), Etienne STUDER (CEA), Amita TRIPATHI (FLUIDYN), Olivier VERMOREL (CERFACS), Thomas VUILLEZ (ODZ), Elena VYAZMINA (Air Liquide), Pierre WOLF (APSYS)

DEFINITIONS

Cellule (maille) : Elément volumique unitaire du domaine de calcul, voir maillage.

CFD : Abréviation anglaise pour Computational Fluid Dynamics, soit Mécanique des Fluides Numérique en français. Ensemble d'outils numériques impliquant l'utilisation de calculateurs pour la résolution des équations discrétisées de Navier-Stokes, équations décrivant le comportement des fluides, et comprenant donc la simulation de l'écoulement et des phénomènes de dispersion.

Maillage : Ensemble des éléments de volumes unitaires (cellules) utilisés pour discrétiser le domaine de calcul. Il convient de distinguer plusieurs types de maillages selon leurs caractéristiques géométriques.

Modèle : Un modèle peut être physique ou numérique. Un modèle physique est un ensemble d'équations mathématiques décrivant un phénomène physique. Il sera ainsi fait mention de modèles de turbulence, de conditions limites. Un modèle numérique est une méthodologie utilisée pour résoudre les systèmes d'équations aux dérivées partielles (EDP), schémas de discrétisation spatiale, discrétisation temporelle, méthodes algébriques ou itératives de résolution par exemple.

Outil de simulation : Un outil de simulation est un logiciel de calcul proposant d'utiliser un ou plusieurs modèles physiques. Ces outils peuvent être commerciaux ou libres d'accès.

Utilisateur : L'utilisateur désigne l'entité (personnes d'une même équipe) qui réalise les simulations numériques et est à même de montrer sa capacité à utiliser l'outil de modélisation 3D par la réalisation préalable de cas de référence.

Table des matières

1	Résumé non technique.....	6
1.1	Rappel du contexte	6
1.2	Modélisations CFD	6
1.3	Points essentiels identifiés.....	8
1.4	Liste des bonnes pratiques.....	8
1.5	Données de sortie pour présenter les résultats d'une simulation CFD	14
2	Introduction et contexte	15
2.1	Objectifs et champ d'application du guide	16
3	Domaines d'application	17
3.1	Intérêt de la modélisation CFD pour les explosions industrielles de gaz en milieu confiné ou non confiné	17
3.2	Situations accidentelles concernées	18
3.2.1	Situations industrielles recensées.....	18
3.2.2	Résultats de modélisation attendus	19
3.2.3	Sorties attendues d'une modélisation CFD dans une étude réglementaire	19
3.2.4	Mise en œuvre d'une modélisation 3D.....	20
4	Notions fondamentales sur les explosions	23
4.1	Une large gamme d'échelles	23
4.2	Le régime de déflagration	23
4.2.1	Phase de propagation sans turbulence initiale et sans obstacles	23
4.2.2	Interaction flamme / turbulence	25
4.2.3	Interaction flamme / turbulence / instabilités en absence d'obstacles	27
4.2.4	Interaction flamme / obstacles.....	28
4.2.5	Synthèse.....	29
4.3	Le régime de détonation	30
4.4	Effets de surpression.....	30
5	Brève description des modèles de calcul	32
5.1	Modélisation de la turbulence	32
5.1.1	Spécificités des explosions.....	34
5.2	Modélisation de la combustion turbulente	37
5.2.1	DNS.....	37
5.2.2	Approche LES.....	37
5.2.3	Approche RANS.....	38
6	Modèles numériques	41
6.1	Domaine de calcul et maillage	41
6.2	Schémas numériques.....	42
6.3	Convergence.....	43
7	Validité des modèles	44
8	Conclusions	46
9	Annexes.....	47

Pour citer ce document, utilisez le lien ci-après :

Institut national de l'environnement industriel et des risques, Guide de Bonnes Pratiques pour la réalisation de modélisations CFD pour des scénarios d'explosion en situation accidentelle, Verneuil-en-Halatte : Ineris - 226908 - v1.0, 06/11/2024.

Mots-clés :

CFD, explosion, échelle industrielle, GT explosion

1 Résumé non technique

Ce résumé non technique présente une synthèse du Guide de Bonnes Pratiques pour la réalisation de modélisations CFD pour des phénomènes dangereux d'explosion de gaz à l'échelle industrielle en milieu confiné ou non confiné.

Il est principalement destiné aux services instructeurs en charge de l'examen des dossiers (DREAL, ASN) et aux industriels réalisant ou faisant réaliser ce type de modélisations.

Il fait l'hypothèse que le lecteur a une bonne connaissance de la réglementation en vigueur et des connaissances de base en mécanique des fluides.

Ce résumé fournit la liste des bonnes pratiques identifiées et une grille d'évaluation pour l'instruction des dossiers contenant des modélisations CFD d'explosion de gaz.

1.1 Rappel du contexte

Depuis plusieurs années, les outils CFD sont de plus en plus utilisés dans la modélisation des conséquences de phénomènes dangereux, incendie, dispersion atmosphérique mais aussi explosion. La reconnaissance et la banalisation de l'usage des outils 3D par la communauté scientifique conduisent inévitablement à prévenir toute mauvaise utilisation de ces derniers.

Le présent document se focalise sur la thématique de la modélisation CFD des explosions de gaz. Il fait suite à la publication en 2015 d'un guide analogue sur les bonnes pratiques de modélisation numérique de la dispersion atmosphérique¹.

Le présent guide s'appuie notamment sur les résultats d'un Groupe de Travail dédié à la modélisation CFD des explosions qui a œuvré depuis 2014. Celui-ci était coordonné par l'INERIS et regroupait une dizaine d'entités avec des établissements publics, des industriels, des bureaux d'étude et un centre de recherche privé. L'objectif du travail réalisé par le GT a porté notamment sur les points suivants :

- Expliquer simplement les bases scientifiques des modèles CFD afin de justifier plus aisément leurs résultats vis-à-vis des données d'entrée et des paramètres sensibles ;
- Constituer un guide de bonnes pratiques pour la mise en œuvre des modèles tridimensionnels pour la prédiction des conséquences d'une explosion de gaz ;
- Apporter à l'administration des règles de lecture critique des dossiers techniques.

Le présent résumé présente les différentes bonnes pratiques proposées ainsi que les raisons et justifications de celles-ci. Enfin, une grille de lecture des modélisations CFD est présentée, en lien avec ces bonnes pratiques.

1.2 Modélisations CFD

Les modélisations CFD consistent à résoudre numériquement le système des équations aux dérivées partielles (EDP) dit de Navier Stokes. Ce système décrit le mouvement d'un fluide. Ces équations sont résolues dans un domaine de calcul discrétisé. Cela signifie que le domaine d'intérêt est reproduit numériquement et décomposé en un certain nombre d'éléments volumiques unitaires, les mailles ou cellules. L'ensemble de ces mailles constitue le maillage.

¹ J.-M. Lacome et B. Truchot (2016) Guide de Bonnes Pratiques pour la réalisation de modélisations 3D pour des scénarios de dispersion atmosphérique en situation accidentelle. Rapport de synthèse des travaux du Groupe de Travail national. DRA-15-148997-06852A. Téléchargeable sur www.ineris.fr

Le système d'équations de la mécanique des fluides comporte $5 + N$ équations fondamentales :

- la conservation de la masse (ou équation de continuité) ;
- la conservation de la quantité de mouvement (3 équations) ;
- la conservation de l'énergie ;
- la conservation des fractions massiques des N espèces chimiques ou d'une variable d'avancement.

Associées à une loi d'état, c'est-à-dire une équation reliant entre elles pression, température et densité dans le fluide, leur résolution permet de déterminer la densité, la vitesse, la température et la pression ainsi que les fractions massiques des espèces chimiques en tous points du domaine de calcul ou, plus exactement, au niveau de chaque maille.

Il existe trois grandes familles de modèles pour rendre compte des effets de la turbulence. Celles-ci présentent des avantages et des contraintes différents :

- la simulation numérique directe, ou DNS (Direct Numerical Simulation) ;
- les approches de simulation aux grandes échelles ou LES (Large Eddy Simulation) ;
- les approches moyennées, ou RANS (Reynolds Average Navier Stokes equations),

La simulation numérique directe résout la totalité du spectre de la turbulence. Cette approche est la plus coûteuse en moyens de calcul du fait du besoin d'un nombre de mailles important, de l'ordre de $Re^{9/4}$, dans le domaine de calcul pour capturer les plus petites échelles représentatives de la turbulence. En prenant l'exemple d'une interaction entre une flamme se propageant à 100 m/s et un obstacle d'une échelle caractéristique de 10 cm, un maillage comportant plus de 30 000 milliards de cellules serait théoriquement requis pour réaliser une DNS.

A contrario, dans les modèles RANS, l'ensemble de la turbulence est modélisé en ajoutant des équations de transport supplémentaires, généralement l'énergie cinétique turbulente et la dissipation. Il s'agit couramment d'un modèle dit $k-\epsilon$ dont il existe de nombreuses variantes.

Pour les modèles LES, les plus grandes échelles représentatives de la turbulence sont calculées par la résolution spatiale et temporelle des équations de Navier Stokes filtrées. La taille de filtre est locale et est liée au maillage. La partie résiduelle est modélisée, ce qui signifie qu'un modèle de turbulence, plus exactement un modèle de sous maille, est nécessaire. Là encore, il existe différentes approches de modélisation pour cette turbulence non résolue. Ces approches nécessitent des maillages plus fins que ceux requis pour les approches de type RANS et donc des temps de calcul plus importants.

Par ailleurs, les équations de transport des fractions massiques des espèces chimiques ou de la variable d'avancement et de l'équation d'énergie font apparaître des termes sources chimiques. Des modèles doivent être utilisés pour fermer ces termes. Cette phase correspond à ce que l'on appelle la modélisation de la combustion turbulente.

Certaines modélisations CFD propres à l'explosion industrielle ajoutent enfin une couche de modélisation supplémentaire si certains obstacles ne sont pas résolus par le maillage.

Une modélisation dite de sous-maille rend compte de l'effet de ces obstacles par une notion de porosité. Celle-ci est totale si aucun obstacle n'est présentant dans la maille, nulle si la maille est complètement remplie d'obstacles et d'une valeur intermédiaire autrement.

Les équations de transport sont toutes modifiées pour prendre en compte les divers effets induits par ces obstacles non résolus. Ce type de modèle suit une approche PDR, sigle pour *Porosity-Distributed Resistance*.

1.3 Points essentiels identifiés

En préambule à toute utilisation, il convient de disposer d'une étude de validation réalisée par l'**utilisateur** de l'outil². La validation par l'utilisateur est un point de passage essentiel car, au-delà de la validation de l'outil, il impose à l'utilisateur de s'interroger sur le contenu et les limites de l'outil. Au-delà de cette phase cruciale de validation, les paramètres clefs identifiés comme particulièrement influents sur le résultat d'une simulation, et donc sur lesquels il convient d'être particulièrement attentifs, sont :

- la définition de la solution initiale ;
- les choix relatifs à la construction du maillage ;
- l'utilisation de conditions aux limites adaptées ;
- l'utilisation de modèles physiques adaptés ;
- la validation de l'approche utilisée.

Comme indiqué précédemment, la résolution numérique des équations de la mécanique des fluides nécessite de découper le domaine de calcul en éléments volumiques unitaires, les mailles. La bonne réalisation d'un calcul de mécanique des fluides impose de respecter certaines règles lors de la génération du maillage, et en particulier de démontrer par une étude de sensibilité au maillage une influence suffisamment faible de celui-ci sur les résultats. Cela signifie que, pour déterminer la taille de maille adaptée au cas modélisé, l'utilisateur devra présenter plusieurs calculs avec des maillages de tailles différentes dans la zone d'intérêt, jusqu'à obtenir des résultats comparables. Par ailleurs, dans le cas de simulations de type LES, il doit être vérifié qu'au niveau de la zone du domaine de calcul au sein de laquelle il y a propagation de flamme, l'échelle caractéristique de la maille est bien située dans la zone inertielle du spectre de la turbulence.

Un autre point clef souligné dans ce travail concerne la modélisation des phénomènes de turbulence, point central de toute modélisation en mécanique des fluides. De nombreux modèles peuvent être utilisés pour cela, chacun de ces modèles disposant de spécificités. Quelle que soit l'approche choisie, elle doit rendre compte des spécificités de la turbulence qui correspond à un régime d'écoulement particulier.

Enfin la qualité de la modélisation de la propagation de la flamme, de ses instabilités naturelles et de son interaction avec une turbulence créée par son déplacement ou préexistante à celui-ci permet d'accéder à un résultat de modélisation précis et fiable. La prépondérance de tel ou tel phénomène est probablement évolutive au cours de la propagation de flamme et dépend également du cas d'explosion considéré. Chacun doit être modélisé par l'outil de calcul choisi.

Les réflexions sur ces thématiques fondamentales ont conduit à l'élaboration des bonnes pratiques présentées au paragraphe suivant.

1.4 Liste des bonnes pratiques

Afin de cadrer les modélisations qui pourraient être effectuées dans le contexte des études réglementaires et d'assurer la qualité de celles-ci, des bonnes pratiques reprises dans le Tableau 1, ont été identifiées. En parallèle de ces bonnes pratiques, ce tableau présente la grille de lecture associée avec les points qui devront être vérifiés, pour chacune d'elles, lors de l'instruction du dossier.

Afin de faciliter la lecture de ces bonnes pratiques, plusieurs catégories ont été définies. La première série de bonnes pratiques concerne la validation du logiciel et le choix de son domaine d'utilisation. Ces éléments devront être détaillés dans un dossier de validation joint en annexe des études réglementaires pour en faciliter l'analyse. Les bonnes pratiques suivantes sont réparties suivant les points essentiels mentionnés au paragraphe précédent. Pour certaines, des ajustements sont possibles, il conviendra alors de démontrer leur pertinence.

² La notion de validation d'un outil est reprise dans la Bonne Pratique Validation et définie plus largement au travers du dossier type de validation présenté en annexe 2 du présent rapport.

Intitulé de la BP	Définition synthétique de la BP	Modélisateur	A vérifier lors de l'instruction
Choix de la solution initiale			
BP-Solution initiale	BP-1 L'utilisateur présentera de manière détaillée le terme source associé au scénario traité ainsi que l'environnement dans lequel le nuage inflammable est susceptible de se former. Il présentera également son mode de calcul du nuage inflammable. Si celui-ci est de type CFD et en milieu non confiné, alors il devra se conformer au guide de bonnes pratiques « Dispersion »³. Il justifiera à l'aide de ces éléments le caractère enveloppe du cas ou des cas d'explosion qu'il calculera. Il sera ainsi question des caractéristiques du nuage inflammable (dimensions, turbulence initiale, localisation, distribution homogène ou non du produit), localisation du ou des points d'inflammation.	L'utilisateur décrira en amont de tous calculs en quoi la solution initiale adoptée (nuage au repos en proportions stœchiométriques par exemple) couvre ou reproduit les effets d'une inflammation d'un nuage réel et en quoi le choix du point d'inflammation retenu est susceptible de conduire aux effets de pression enveloppes. A défaut une étude exhaustive des possibilités de nuages inflammables et de points d'inflammation doit être menée.	Il conviendra de vérifier que sont décrits : - Le scénario traité par calcul, - Le mode de calcul du nuage inflammable et sa conformité avec le guide Dispersion si un calcul CFD est mené pour caractériser le nuage inflammable, - La justification du choix du ou des nuages inflammables retenus ainsi que son ou leur caractère enveloppe par rapport à la situation réelle
BP-Effets de confinement	BP-2 <u>Dans le cas d'une explosion en milieu confiné</u>, l'utilisateur décrira les éléments « soufflables » identifiés et les caractérisera (surface, pression de rupture, masse surfacique).	L'utilisateur devra décrire les éléments réels ainsi que la modélisation qu'il en fait. Les effets induits (pas de prise en compte d'un événement alors qu'un événement est présent en réalité par exemple) devront être décrits.	Il conviendra de vérifier que sont décrites : - Toutes les parois du milieu confiné, - Toutes les surfaces fragiles, - La modélisation du comportement de chaque paroi dans l'outil de calcul.

³ J.-M. Lacomme et B. Truchot (2016) Guide de Bonnes Pratiques pour la réalisation de modélisations 3D pour des scénarios de dispersion atmosphérique en situation accidentelle. Rapport de synthèse des travaux du Groupe de Travail national. DRA-15-148997-06852A. Téléchargeable sur www.ineris.fr

Intitulé de la BP	Définition synthétique de la BP	Modélisateur	A vérifier lors de l'instruction
Construction du maillage			
BP-Sensibilité au maillage	BP-10 Une étude de sensibilité au maillage doit être réalisée. Celle-ci implique de réaliser deux calculs complémentaires au calcul de référence, le premier avec une taille de maille inférieure à la taille de référence (facteur multiplicateur entre 0,5 et 0,9) et le second en utilisant une taille de maille supérieure à la taille de référence (facteur multiplicateur entre 1,1 et 1,5). Les niveaux de suppression doivent rester dans une gamme - 30 % / + 30 % par rapport au résultat de référence.	L'utilisateur doit clairement mettre en avant qu'en plus de son calcul de référence, 2 autres maillages ont été testés pour son calcul. Ceux-ci doivent satisfaire aux critères ci-dessus.	Il conviendra de vérifier la présence dans l'étude des résultats des deux calculs complémentaires au cas de référence.
BP-LES	BP-4 <u>Lors de la réalisation d'une simulation de type LES</u> , il doit être vérifié que les mailles localisées dans la zone de propagation de flamme ont une taille caractéristique inscrite dans la zone inertielle du spectre turbulent.	L'utilisateur prouvera que cette BP est bien appliquée en quantifiant les échelles de Kolmogorov et intégrale aux instants clés de la propagation de flamme.	Il conviendra de vérifier que la quantification des deux échelles est bien réalisée par l'utilisateur et que la taille de maille adoptée par l'utilisateur est bien inscrite entre ces deux valeurs aux divers instants.
BP-Facteur-de-forme	BP-8 Sauf justification, le facteur de forme des cellules en champ proche devra être de 1. Les justifications pouvant permettre de s'affranchir de cette BP pourront s'appuyer sur les caractéristiques du schéma numérique utilisé, la typologie particulière du cas d'explosion ou des éléments issus d'une phase de validation.	L'utilisateur attestera d'un facteur de forme de 1 pour les mailles situées dans la zone de propagation de flamme, captures d'écran du maillage à l'appui. S'il souhaite déroger à cette règle il devra démontrer l'absence d'influence sur un cas simplifié ; apporter une justification théorique de ce choix.	Il conviendra de vérifier la forme des mailles dans la zone de propagation de flamme via un examen des coupes de maillage proposées par le modélisateur

Intitulé de la BP	Définition synthétique de la BP	Modélisateur	A vérifier lors de l'instruction
BP-Evolution-maillage	BP-7 Sauf justification, la raison géométrique utilisée pour la variation de la taille des mailles dans la zone de champ proche devra être inférieure ou égale à 1,2. Les justifications pouvant permettre de s'affranchir de cette BP pourront s'appuyer sur l'étude de convergence en maillage.	L'utilisateur présentera des vues caractéristiques du maillage permettant de juger le respect de cette bonne pratique. S'il souhaite déroger à cette règle il devra apporter une justification théorique de ce choix.	Il conviendra de vérifier le respect de l'évolution de la taille des mailles dans la zone de propagation de flamme via un examen des coupes de maillage proposées par le modélisateur
BP-Schéma-numérique	BP11 - Utilisation de schémas numériques d'ordre 2 ou supérieur en espace	L'utilisateur attestera de l'utilisation de schémas numériques de discrétisation spatiale d'ordre 2. S'il souhaite déroger à cette règle il devra apporter une justification théorique	Il conviendra de vérifier que l'ordre du schéma est bien supérieur ou égal à 2.
BP-Modélisation des ondes en champ lointain	BP-9 <u>Dans le cas où l'approche CFD est utilisée pour résoudre la propagation des ondes de pression en champ lointain</u> , l'outil de calcul doit être en mesure de retrouver une décroissance du pic de surpression en accord avec la théorie jusqu'au seuil de surpression recherché (200, 140, 50 ou 20 mbar)	Si l'utilisateur utilise une approche CFD pour rendre compte des effets de surpression en champ lointain, il doit montrer que la décroissance de de surpression est de la forme $1 / R$ (avec R la distance à la source de pression) pour les seuils compris entre 200 et 20 mbar. Les niveaux de surpression doivent rester dans une gamme - 30 % / + 30 % par rapport à cette décroissance théorique.	Si l'utilisateur utilise une approche CFD pour quantifier les distances d'effets réglementaires, alors il conviendra de vérifier que le modélisateur fournit les éléments justifiant la bonne décroissance de surpression à distance.
BP-Conservation-Masse	BP-12 L'utilisateur démontrera la propriété de conservation de la masse au fil du temps par son outil de calcul pour son calcul d'application	L'utilisateur réalisera un bilan de masse, par exemple sur la masse de carbone ou d'hydrogène contenu dans le domaine de calcul.	Il conviendra de vérifier que figure dans le rapport une courbe temporelle caractéristique proposée par le modélisateur et montrant la conservation de la masse.

Intitulé de la BP	Définition synthétique de la BP	Modélisateur	A vérifier lors de l'instruction
Utilisation de conditions aux limites adaptées			
BP-Eloignement-CL	BP-5 Dans le cas d'une explosion en milieu non confiné, les conditions aux limites de sortie doivent être suffisamment éloignées de la zone de champ proche pour éviter toute interaction entre la flamme et celles-ci	L'utilisateur attestera, captures d'écran à l'appui, que la flamme en fin de combustion n'atteint pas la condition limite de sortie la plus proche de celle-ci.	Il conviendra de vérifier sur la capture d'écran que la flamme en fin de combustion est loin des conditions limites de sortie.
BP-Nature des CL	BP-6 Dans le cas d'une explosion en milieu non confiné, les conditions aux limites de sortie doivent permettre une évacuation correcte des ondes de surpression ou être situées suffisamment loin pour qu'il n'y ait pas interaction entre les ondes de surpression et les conditions aux limites durant le temps physique simulé	L'utilisateur attestera, captures d'écran à l'appui et pour plusieurs instants, l'absence de réflexion d'onde au niveau des conditions limites de sortie du domaine de calcul ou prouvera que les réflexions éventuelles n'impactent pas les résultats du calcul sur le temps physique couvert par celui-ci.	Il conviendra de vérifier que les captures d'écran prouvant l'absence de retour d'onde sont bien fournies.
Utilisation de modèles physiques adaptés			
BP-TDD	BP-3 L'approche mise en œuvre par l'utilisateur doit pouvoir modéliser une éventuelle TDD. A défaut, il convient que l'utilisateur propose des éléments d'analyse permettant d'exclure toute occurrence de TDD dans le cas traité	L'approche mise en œuvre par l'utilisateur doit pouvoir modéliser une éventuelle TDD. A défaut, il convient que l'utilisateur propose des éléments d'analyse permettant d'exclure toute occurrence de TDD dans le cas traité. Pour ce faire, l'utilisateur peut utiliser différents critères de détection de conditions favorisant une TDD, comme par exemple, une vitesse de flamme supérieure ou égale à 500 m/s ou un gradient local de pression (dp/dx) supérieur à 0,5.	Il conviendra de vérifier que dans le rapport lié au calcul figurent bien des éléments propres à la TDD

Intitulé de la BP	Définition synthétique de la BP	Modélisateur	A vérifier lors de l'instruction
Validation			
BP-Validation	BP-13 L'utilisateur doit identifier et décrire les phénomènes prépondérants responsable de l'accélération de flamme au niveau de son cas d'application et présenter les cas de validation représentatifs de ceux-ci, qu'il aura traités en amont du cas d'application. Des cas de comparaison exemples sont cités en annexe 2 du présent document	L'utilisateur fournira un dossier de validation réalisé par ses soins et non par l'éditeur du logiciel dans lequel il présentera les résultats obtenus pour des cas de validation représentatifs du cas traité. L'utilisateur décrira la phénoménologie du cas d'intérêt et détaillera en quoi les cas de validation sont pertinents.	Les points à vérifier sont : - l'exhaustivité des cas modélisés, - les écarts entre expériences et modèles.
BP-Conservation de la démarche de validation	BP-14 Le cas d'application devra être modélisé par l'utilisateur avec la même démarche de modélisation c'est-à-dire les mêmes méthodes numériques (maillage et schémas numériques) et les mêmes modèles de turbulence et de combustion turbulente que ceux mis en œuvre pour calculer les cas de validation	L'utilisateur démontrera que sa démarche de calcul pour le cas d'étude est analogue à celle mise en œuvre pour les cas de validation. Si l'un des paramètres de calcul est modifié, par exemple la taille de maille, l'utilisateur devra démontrer que l'effet de ce changement sur le résultat reste limité.	Il conviendra de vérifier que la modélisation physique et les méthodes numériques utilisés pour le calcul de référence sont identiques à celles figurant dans le dossier de validation présenté. Dans le cas contraire, un argumentaire devra être proposé à l'inspecteur par le modélisateur.

Tableau 1 : Synthèse des bonnes pratiques identifiées pour la réalisation des simulations CFD des cas d'explosion en situation accidentelle

1.5 Données de sortie pour présenter les résultats d'une simulation CFD

D'une manière générale, toutes les informations qui permettent de comprendre les hypothèses faites et les résultats obtenus devront être indiquées dans l'étude. Les sorties pourront être a minima :

- Des iso-surfaces en 3D permettant de localiser le front de flamme en fonction du temps. La localisation du front de flamme est permise par un champ de variable d'avancement⁴ ou de température, par exemple.
- Des plans de coupe 2D représentant les isolignes correspondant aux plus grandes distances atteintes par les seuils de surpression réglementaires.

Par ailleurs, afin d'améliorer la lisibilité des résultats, le modélisateur devra présenter toutes les sorties nécessaires à la bonne compréhension des résultats.

⁴ La variable d'avancement est une quantité normalisée évoluant de manière monotone de 0 dans la zone de gaz frais à 1 dans les gaz brûlés.

2 Introduction et contexte

Les études réglementaires des installations classées peuvent faire apparaître des scénarios accidentels de rejets de produits inflammables. Que le produit soit à l'état gazeux ou liquide en amont de la brèche, la formation d'un nuage inflammable de taille significative peut être attendue ainsi qu'une explosion en cas de présence d'une source d'inflammation au sein de celui-ci.

La formation du nuage inflammable peut être observée en milieu confiné, tel qu'un local, ou en milieu non confiné.

Pour un produit inflammable et des conditions de rejet donnés, le nuage inflammable est caractérisé par :

- Ses dimensions. On délimite le contour du nuage inflammable en identifiant les distances auxquelles la limite inférieure d'explosivité du mélange (LIE) est atteinte.
- La distribution du produit inflammable en son sein.
- Une masse inflammable. Celle-ci est typiquement quantifiée comme la masse de produit inflammable contenue entre l'iso-surface de concentration égale à la LIE et celle de concentration égale à la LSE (limite supérieure d'explosivité) du mélange.

Ces caractéristiques dépendent notamment de paramètres environnant le point de rejet et susceptibles d'impacter la dispersion du produit : présence d'obstacles, présence d'un relief, effet du vent, effet d'un confinement ...

Dans l'hypothèse d'une inflammation d'un nuage, ses caractéristiques vont impacter l'historique de la flamme qui balaye celui-ci et par suite le champ de surpression généré. La flamme sera également sensible aux effets des obstacles au sein du nuage et aux effets de confinement.

Concernant le cas du milieu confiné, certaines spécificités sont notables. Dans l'exemple d'une explosion en local, la montée en pression induite par une inflammation éventuelle du nuage sera influencée par les effets de décharge liés à l'arrachement ou l'ouverture des éléments fragiles. Les portes du local peuvent par exemple s'ouvrir du fait de l'explosion, à une pression caractéristique bien inférieure à celle pouvant occasionner une rupture des parois créant le confinement. Au contraire, il est possible que l'ensemble des parois puisse céder à un même ordre de grandeur de niveau de pression.

Si la pression maximale atteinte dans le local peut dépasser la pression de tenue des parois, alors une ruine du local sera observée.

Si des effets de décharge de pression permettent au local de conserver son intégrité, des explosions externes liées à des expulsions de gaz frais à l'extérieur du local, dites explosions secondaires, pourront se produire.

Les modèles CFD sont de plus en plus utilisés pour la modélisation de la dispersion atmosphérique. Ces modèles permettent de prendre en compte des phénomènes physiques supplémentaires liés, par exemple, à la présence de mesures de maîtrise des risques ou encore la topographie à proximité des sites. Les modèles CFD ont par ailleurs fait l'objet d'un guide de bonnes pratiques pour la dispersion atmosphérique⁵.

S'agissant des phénomènes d'explosion, les approches CFD présentent l'avantage d'intégrer intrinsèquement l'influence sur la flamme d'effets géométriques, liés à distribution du gaz au sein du mélange inflammable, la forme du nuage et les obstacles au sein de celui-ci. Ces outils sont susceptibles d'offrir un champ d'application plus large que les outils phénoménologiques élaborés sur un nombre d'hypothèses plus important. En revanche, du fait d'une plus grande latitude de choix de modèles, une plus grande variabilité des résultats peut être attendue d'un utilisateur à l'autre.

⁵ J.-M. Lacome et B. Truchot (2016) Guide de Bonnes Pratiques pour la réalisation de modélisations 3D pour des scénarios de dispersion atmosphérique en situation accidentelle. Rapport de synthèse des travaux du Groupe de Travail national. DRA-15-148997-06852A. Téléchargeable sur www.ineris.fr.

Depuis 2014, un Groupe de Travail (GT) national a été constitué à l'initiative de l'INERIS autour de la modélisation par approche CFD de l'explosion pour :

- Établir une analyse des points forts et faiblesses des modèles disponibles pour prédire des dynamiques de flamme et des champs de pression ;
- Réaliser un premier positionnement des approches CFD par rapport aux outils simples ;
- Proposer des axes de R&D permettant d'améliorer les outils.

L'exercice s'est limité à ce stade à des atmosphères inflammables en phase gazeuse, cas souvent rencontré dans les études de sécurité.

Les entités impliquées dans ce groupe de travail sont :

- des Etablissements Publics: CEA, INERIS et IRSN ;
- des industriels : Air Liquide, EDF, GRTgaz, TotalEnergies ;
- des bureaux d'études : APSYS, DNV-GL, Fluidyn, ODZConsultants ;
- un centre de recherche privé : le CERFACS.

Ce groupe de travail a mis en avant le besoin d'un guide de bonnes pratiques pour la modélisation CFD des explosions d'échelles industrielles.

Le présent document vise à :

- Constituer un guide de bonnes pratiques de paramétrage et de mise en œuvre des modèles CFD modélisant l'explosion en phase gazeuse ;
- Permettre aux industriels et à l'administration d'avoir confiance dans ces modèles et d'expliquer plus aisément leurs résultats.

La présente version du document a été proposée par l'INERIS sur la base des résultats produits par le GT Explosion. La version finale a été élaborée, après consultation des membres du groupe de travail et sur la base des commentaires et avis de ceux-ci.

2.1 Objectifs et champ d'application du guide

Les objectifs de ce guide sont :

1. D'identifier les critères qui justifient la mise en œuvre de modèles tridimensionnels ;
2. De définir les bonnes pratiques pour cette mise en œuvre ;
3. D'être accessible à tous, concepteurs de logiciels, bureaux d'études, administration, ... ;
4. De proposer une cartographie des modèles CFD actuellement utilisés et proposer des critères pour les modèles en développement pour qu'ils soient utilisables dans les études réglementaires en clarifiant leurs hypothèses et leurs limites, et leurs résultats comparés aux essais en grandeur nature disponibles ;
5. De décrire le post-traitement des résultats au regard des objectifs des études réglementaires ;
6. De fournir une grille de lecture qualitative à usage de l'administration synthétisant les points essentiels.

Le document est organisé de la manière suivante :

- Le chapitre 3 présente les domaines d'applications de la modélisation CFD ;
- Le chapitre 4 rappelle les notions fondamentales sur les explosions ;
- Le chapitre 1 décrit brièvement des modèles de calcul des explosions ;
- Le chapitre 6 décrit les modèles numériques destinés à la simulation ;
- Une conclusion.

Les Bonnes Pratiques sont proposées au fil de l'eau au niveau des divers chapitres.

3 Domaines d'application

3.1 Intérêt de la modélisation CFD pour les explosions industrielles de gaz en milieu confiné ou non confiné

Il est possible de modéliser les effets de pression générés par des explosions confinées ou non par des approches phénoménologiques. Ces approches visent à quantifier les effets de pression générés pour une situation simple.

On peut ainsi évoquer à titre d'exemple la méthode Multi-Energy⁶ qui fait partie de ce type d'approche. Cette méthode est couramment mise en œuvre pour la modélisation d'explosions non confinées.

Deux données d'entrée sont requises par cette méthode : un indice de violence et une masse inflammable. L'indice de violence est une valeur entière comprise entre 1 et 10. Il existe une correspondance entre chaque valeur et la pression maximale d'explosion susceptible d'être rencontrée au sein du nuage inflammable considéré. La méthode Multi-Energy est liée à un abaque qui décrit la décroissance de pression maximale à distance d'une explosion en fonction de l'indice de violence et de la masse inflammable.

Cet abaque a été élaboré pour une explosion avec volume inflammable hémisphérique et une vitesse de flamme constante. Par suite, le champ de surpression prédit par cette approche est également isotrope.

Cette méthode est intéressante car simple de mise en œuvre mais peut présenter certaines limites étant donné que les nuages inflammables considérés lors des études (nuages non hémisphériques, présence d'obstacles, présence d'hétérogénéité de distribution de nuage inflammable, ...) sont distincts du nuage type sur la base duquel l'abaque a été élaboré. Des pratiques visant à aider au choix de l'indice de violence notamment ont été proposées⁷.

D'autres outils phénoménologiques équivalents sont à disposition dans la littérature pour l'explosion non confinée⁸, leur principe est en général relativement voisin.

D'autres modèles phénoménologiques⁹ sont proposés pour rendre spécifiquement compte de l'interaction flamme/obstacle. Cependant ces modèles sont élaborés pour une distance entre obstacles et un diamètre caractéristique d'obstacle constants.

L'intérêt de la modélisation CFD est d'être plus générique au niveau des cas susceptibles d'être traités et de pouvoir lever certaines limites d'utilisation des outils phénoménologiques en incluant par construction des effets géométriques intervenant dans l'explosion :

- Effet de la localisation du point d'inflammation ;
- Effet des dimensions du nuage ;
- Effet de non-homogénéité au sein du nuage inflammable ;
- Effet de la présence d'obstacles au sein du nuage ;
- Effet de la présence d'une ou plusieurs zones confinées, partiellement ou non au sein du nuage ;
- Effet de la présence d'obstacles en dehors du nuage ;
- ...

⁶VAN DEN BERG A. C. (1984): The Multi-Energy Method – a framework for vapour cloud explosion blast prediction, Rapport TNO-PML 1984-C72

⁷J. Daubech (2016) Les explosions non confinées de gaz et de vapeurs - Ω UVCE. Rapport INERIS DRA-16-133610-06190A

⁸J.F. Lechaudel (1999) Guide des méthodes d'évaluation des effets d'une explosion de gaz à l'air libre. Rapport INERIS DRA - YMo/YMo - 1999 - 20433

⁹S.B. Dorofeev (2007) Evaluation of safety distances related to unconfined hydrogen explosions. International Journal of Hydrogen Energy 32, pp. 2118-2124

Notons que des approches couplant outils phénoménologiques et approches CFD peuvent être mises en œuvre.

Une modélisation CFD peut en effet permettre de quantifier au sein d'un nuage donné la pression maximale atteinte ainsi que la masse inflammable impliquée pour la génération de ce pic de pression.

Dans un second temps, l'utilisation d'une approche phénoménologique de type méthode Multi-Energy exploitant ces données d'entrée peut permettre de quantifier le champ de surpression induit. Cette démarche permet de traiter relativement simplement la propagation des ondes de surpression mais induit une perte de précision si la propagation de flamme et par suite la propagation des ondes de pression est anisotrope.

Concernant le cas plus spécifique de l'explosion en milieu confiné, des modèles phénoménologiques sont également disponibles^{10,11}. Ceux-ci rendent compte de la compétition entre montée en pression interne liée à l'explosion et effet de décharge du fait de l'arrachement ou l'ouverture de surfaces fragiles. La prise en compte de l'effet d'obstacles internes n'est pas intégrée de base dans de tels modèles et ceux-ci étant construits sur une hypothèse de topologie 0-D, inclure leur effet peut s'avérer difficile. Par ailleurs, le cas de décharges de gaz frais et éventuellement d'explosions secondaires à travers plusieurs orifices n'est pas nécessairement pris en compte par de tels modèles.

Là encore, la modélisation CFD permet, en théorie, d'intégrer ces effets géométriques sur le déroulement de l'explosion.

Des couplages sous diverses formes entre approche phénoménologique et approche CFD sont envisageables dans le cas de l'explosion en milieu confiné, par exemple :

- Calcul avec outil phénoménologique du signal de pression interne dans une enceinte sans obstacles et présentant un seul événement / Calcul avec approche CFD de l'écoulement externe induit à travers l'événement et de l'explosion externe.
- Calcul avec approche CFD du signal de pression interne pour le cas d'une obstruction interne importante / Calcul des effets de pression à distance en cas de ruine avec approche phénoménologique.
- ...

3.2 Situations accidentelles concernées

Ce chapitre a pour objectif de fournir :

- une identification et une définition des configurations industrielles ;
- une identification des situations susceptibles de faire l'objet de modélisation.

3.2.1 Situations industrielles recensées

Les situations d'explosions accidentelles susceptibles d'être rencontrées dans des configurations industrielles et pertinentes à traiter dans le cadre du guide de bonnes pratiques sont identifiées.

Les configurations identifiées sont ainsi caractérisées par :

- La forme du nuage : celui-ci pouvant être compact, plat, ... ;
- La turbulence initiale au sein des nuages : celle-ci peut être liée au jet ayant donné lieu à la formation du nuage ou à la turbulence atmosphérique, l'une pouvant être prédominante sur l'autre en fonction de la localisation au sein du nuage, ... ;
- La présence ou non d'obstacles au sein du nuage ainsi que les caractéristiques de ceux-ci (diamètres caractéristiques, écartements entre obstacles).
- La présence de zones partiellement ou totalement confinées au sein du nuage.

¹⁰ C. Proust (2000) Prévoir les effets des explosions de poussières sur l'environnement – EFFEX, un outil de simulation. Rapport INERIS DRA - CPr/CPPr - 22751

¹¹ L.R. Boeck, C.R. Bauwens, S.B. Dorofeev (2021) Modeling of explosion dynamics in vessel-pipe systems to evaluate the performance of explosion isolation systems. Journal of Loss Prevention in the Process Industries 71, 104477

3.2.2 Résultats de modélisation attendus

Dans le cadre réglementaire lié aux ICPE¹², les principales données de sortie attendues d'une modélisation d'explosion sont les distances auxquelles des surpressions de 200, 140, 50 et 20 mbar peuvent être atteintes.

De manière plus générale, il peut être intéressant d'obtenir les signaux temporels de surpression dans l'empreinte limitée par l'iso-ligne correspondant à une pression maximale de 20 mbar. Ces informations pourraient être utiles pour réaliser des études complémentaires de tenue de structures (bâtiments, parois de protection aux effets de pression ...).

3.2.3 Sorties attendues d'une modélisation CFD dans une étude réglementaire

L'objet de ce paragraphe consiste à présenter de manière synthétique les données d'entrée/sortie à produire dans le cadre de modélisations tridimensionnelles d'explosions.

Les points abordés dans ce chapitre sont en accord avec les bonnes pratiques de modélisation. Afin de permettre une bonne compréhension des modélisations tridimensionnelles et de la rigueur avec laquelle celles-ci ont été mises en œuvre, il est important de présenter les éléments suivants :

➤ Maquette du domaine de calcul :

- Indiquer quels sont les obstacles et éléments topographiques explicitement pris en compte dans la maquette (et non pas un « maillage de peau » qui peut s'avérer différent de la vision que le modèle aura du domaine) avec les représentations graphiques associées et ceux pris en compte implicitement (sous la forme d'une porosité par exemple) ;
- Indiquer le type de maillage retenu (non structuré, structuré, structuré par blocs, etc.)¹³, la géométrie des mailles (hexaèdres, tétraèdres, etc.) et leurs nombres, les zones où le maillage est plus fin ou moins fin et la résolution du maillage au niveau du point de rejet d'une part et au niveau des zones d'intérêt d'autre part ;
- Indiquer et justifier les dimensions du domaine de modélisation retenu (calcul préalable pour évaluer grossièrement la zone d'intérêt ou définition du domaine en fonction d'éléments cibles).
- Indiquer les conditions limites retenues (entrée, sortie, symétrie, parois lisses, parois rugueuses, etc.) et notamment faire apparaître de façon explicite les valeurs de rugosité retenue (sol, bâtiment, ...)

➤ Paramètres de calcul et données d'entrée :

- Type de formulation de turbulence retenu (Modèle spécifique, tant en RANS que pour la LES) ;
- Type de formulation pour le modèle de combustion turbulente retenu ;
- Choix du nuage inflammable retenu ;
- Position du point d'inflammation ;
- Modélisation de l'inflammation ;
- Indicateurs sur la « qualité » des modélisations réalisées :
 - règles de construction du maillage (précision en fonction du modèle utilisé, ...) ;
 - tests sur la sensibilité du maillage ;
 - valeur et méthode de contrôle du pas de temps.

¹² Installation classée pour la protection de l'environnement

¹³ Voir annexe 1 pour la définition des différents types de maillage

➤ Types de sorties attendues

D'une manière générale, toutes les informations qui permettent une bonne compréhension de l'écoulement et des phénomènes dangereux représentés et des résultats obtenus (paragraphe explicatif notamment). Les sorties pourront être par exemple :

- les distributions de vitesse, grandeurs représentatives de la turbulence et fraction volumique de gaz inflammable avant toute inflammation au sein du nuage inflammable,
- le signal de surpression en quelques points du nuage inflammable, la valeur maximale atteinte au sein de celui-ci,
- la masse inflammable impliquée dans la génération du pic de pression au sein du nuage inflammable,
- des coupes 2D horizontales et verticales de surpression et de vitesse de flamme.

La spécificité des outils de modélisation 3D est de donner accès à des distances différenciées en fonction de la direction par rapport au point d'inflammation.

Il convient ainsi de déterminer les localisations de point d'inflammation pertinentes. Ce choix doit être réalisé en fonction des enjeux spécifiques au site.

3.2.4 Mise en œuvre d'une modélisation 3D

La modélisation 3D implique trois étapes :

- Etape 1 : caractérisation de la situation à calculer ;
- Etape 2 : réalisation du calcul d'explosion 3D. Cette étape contient elle-même des sous-étapes :
 - Sous-étape a) Création d'un domaine de calcul et du maillage, choix des modèles de turbulence, de combustion, schémas numériques, choix et saisie des conditions limites ;
 - Sous-étape b) Réalisation du calcul par l'outil informatique ;
 - Sous-étape c) Post-traitement ;
- Etape 3 : proposition d'une cartographie pour les effets de surpression.

Les paragraphes ci-dessous sont propres à l'étape 1 et rappellent quelques aspects spécifiques aux calculs d'explosion.

Avant tous calculs d'explosion, il convient de caractériser le nuage inflammable au sein duquel une explosion est susceptible de se produire ainsi que les sources d'inflammation à retenir.

La phase d'analyse de risques permet d'identifier les scénarios de rejets de produits inflammables et ainsi que leurs caractéristiques (inventaire, phase du produit, pression et température, diamètre de l'orifice de rejet, coefficient de décharge ...). Pour un scénario donné, un terme source doit être calculé. Celui-ci décrit l'évolution temporelle ou stationnaire du débit massique, de la vitesse de rejet, etc. Le nuage inflammable peut alors être calculé sur la base de la connaissance de ce terme source à l'aide :

- d'un outil phénoménologique ;
- d'un outil intégral ;
- d'un outil de modélisation CFD.

Notons que plusieurs orientations de rejet peuvent être considérées, ainsi que plusieurs orientations de vent par rapport à la direction de rejet dans le cas de rejets en milieu non confiné et si l'outil de modélisation le permet.

Les caractéristiques essentielles d'un nuage inflammable sont :

- ses dimensions, limitées par l'iso-surface de concentration égale à la LIE ;
- les champs :
 - de vitesse et des grandeurs turbulentes,
 - de température,
 - de fraction volumique des espèces chimiques ou d'un champ représentatif.

Si un calcul CFD d'explosion est envisagé à ce stade, il conviendra d'initialiser le calcul par la « mise en place » d'un nuage inflammable. Ce dernier peut présenter des propriétés différentes du nuage caractérisé par le calcul de dispersion. On parlera de nuage réaliste dans la suite pour évoquer celui-ci.

Les distances d'effets de surpression calculées pour une inflammation du nuage modèle doivent rester enveloppées par rapport à l'ensemble des distances d'effets envisageables du fait des inflammations possibles au sein du nuage réaliste. Le choix du nuage modèle est également lié à la source d'inflammation retenue. Celle-ci est caractérisée par :

- une position,
- une énergie libérée,
- un mode d'inflammation.

L'énergie d'inflammation est un paramètre important car celle-ci pilote le régime de propagation de flamme initié. Notons qu'en pratique, les sources d'inflammation propres à des accidents industriels conduisent généralement à l'initiation d'un régime de déflagration.

Le mode d'inflammation, suivant la situation considérée, peut également impacter l'historique de vitesse de flamme dans le nuage et par suite les niveaux de surpression générés. On peut penser :

- A une inflammation ponctuelle (par exemple, étincelle au niveau d'un interrupteur) ;
- A une inflammation par surface chaude ;
- A une inflammation indirecte : si le nuage inflammable remplit deux zones dont l'une est confinée et que l'inflammation est déclenchée dans cette dernière, il est alors possible de créer un jet turbulent enflammé qui déclenchera le phénomène d'explosion dans l'autre zone. Une inflammation par ce jet est susceptible de majorer les effets de pression liés à l'explosion.

Afin que le calcul d'explosion soit démonstratif, les lieux de source d'inflammation susceptibles de conduire aux effets de pression dimensionnants doivent être choisis pour les calculs d'explosion. S'il est difficile d'identifier le lieu conduisant aux effets de pression dimensionnants, alors l'effet de plusieurs lieux d'inflammation doit être simulé. On veillera notamment à étudier des points d'inflammation maximisant le chemin de flamme (en bord de nuage/congestion) et minimisant les effets d'échappement (au centre, en paroi...).

Par ailleurs, le nombre, le type d'obstacles et leur arrangement dans l'espace sont susceptibles d'impacter l'historique de flamme. Notons que dans le cadre d'études d'explosion en avance de construction, tous les détails géométriques de l'installation ne sont pas disponibles. Dans ce cas, l'utilisateur peut chercher à compenser le manque d'information par un encombrement anticipé, dimensionné de telle façon à ne pas sous-estimer les effets d'une explosion éventuelle. Par ailleurs, la même problématique peut être rencontrée pour des sites existant pour lesquels le détail de l'encombrement au sein d'un éventuel nuage inflammable n'est pas connu.

Cependant, il reste hasardeux de produire un calcul sur la base de détails géométriques non connus et les résultats produits doivent être vérifiés une fois la conception finale connue.

Identifier le nuage inflammable d'initialisation du calcul d'explosion peut tout d'abord s'effectuer par exemple en choisissant un nuage préalablement calculé par une approche CFD. On parlera ici de nuage « réaliste ». Néanmoins, ce choix peut s'avérer délicat si :

- L'évolution du nuage inflammable est fortement instationnaire. Il peut par exemple être difficile de distinguer la situation dimensionnante entre un nuage peu turbulent et couvrant de nombreux obstacles et un nuage plus turbulent couvrant moins d'obstacles.
- De nombreuses possibilités de points d'inflammation sont envisageables. En effet, le lieu d'inflammation pilote l'historique de vitesse de flamme et par suite les effets de pression générés par celle-ci.

La difficulté du choix de nuage par le modélisateur peut amener à retenir un nombre prohibitif de nuages et de lieux d'inflammation pour lesquels des calculs d'explosion devraient être menés.

Enfin, un nuage « réaliste » présentera probablement une distribution non homogène de produit inflammable. Or, les outils CFD sont de manière générale validés par confrontation à des bases de données expérimentales correspondant à des inflammations de mélanges homogènes et le plus souvent en proportions stœchiométriques.

Il est également possible de calculer les effets de pression liés à un nuage inflammable « équivalent » à un nuage réaliste. Ce nuage sera homogène en concentration et en proportions stœchiométriques. Il reste à caractériser pour ce nuage des dimensions ainsi qu'une turbulence initiale. Cette approche est compatible avec une méthode de calcul pour la phase de dispersion de type intégrale, phénoménologique ou CFD.

Dans son application, l'utilisation de la méthode du nuage équivalent implique de considérer plusieurs localisations du nuage inflammable équivalent ainsi que plusieurs points d'inflammations par localisation.

Plusieurs méthodes sont proposées dans la littérature pour déterminer toutes les propriétés du nuage telles la méthode Q9¹⁴ bien que celle-ci soit discutée sur son caractère enveloppe.

Le choix d'un nuage inflammable initial pour le calcul d'explosion présente un fort impact sur les distances d'effets de surpression qui seront quantifiées et reste un sujet de discussion dans la communauté de la modélisation des explosions industrielles. La problématique est présentée succinctement et sa résolution reste hors du scope du présent guide dédié à la phase de modélisation de l'explosion d'un nuage inflammable donné.

De manière plus générale, le choix du ou des ensembles nuage inflammable / point d'inflammation permettant de retrouver les distances d'effets de surpression enveloppes est à justifier par l'utilisateur.

Cas de l'explosion confinée : Caractérisation des surfaces « soufflables »

Dans le cas d'une explosion en milieu confiné, la montée en pression dans un local peut conduire au décrochage et à la mise en mouvements des ouvrants ou des éléments de paroi les plus fragiles.

La surpression à partir de laquelle ces éléments sont susceptibles d'être mis en mouvement, leur surface ainsi que leur inertie pilotent la valeur de surpression maximale liée à l'explosion dans l'enceinte.

Il convient ainsi d'identifier les éléments fragiles et de quantifier pour chacun leur surface, leur masse surfacique et leur pression de mise en mouvement.

BP1	L'utilisateur présentera de manière détaillée le terme source associé au scénario traité ainsi que l'environnement dans lequel le nuage inflammable est susceptible de se former. Il présentera également son mode de calcul du nuage inflammable. Si celui-ci est de type CFD et en milieu non confiné, alors il devra se conformer au guide de bonnes pratiques « Dispersion »¹⁵. Il justifiera à l'aide de ces éléments le caractère enveloppe du cas ou des cas d'explosion qu'il calculera. Il sera ainsi question des caractéristiques du nuage inflammable (dimensions, turbulence initiale, localisation, distribution homogène ou non du produit), localisation du ou des points d'inflammation.
BP2	Dans le cas d'une explosion en milieu confiné, l'utilisateur décrira les éléments « soufflables » identifiés et les caractérisera (surface, pression de rupture, masse surfacique).

¹⁴ J. Stewart, S. Gant (2019) A review of the Q9 equivalent cloud method for explosion modelling. 61st UKELG discussion meeting

¹⁵ J.-M. Lacome et B. Truchot (2016) Guide de Bonnes Pratiques pour la réalisation de modélisations 3D pour des scénarios de dispersion atmosphérique en situation accidentelle. Rapport de synthèse des travaux du Groupe de Travail national. DRA-15-148997-06852A. Téléchargeable sur www.ineris.fr

4 Notions fondamentales sur les explosions

Ce chapitre a pour objectif de présenter, de manière synthétique, les éléments caractéristiques principaux des explosions. Ces notions sont utilisées par la suite pour établir le lien avec les choix de modélisation qui peuvent être faits.

4.1 Une large gamme d'échelles

Une spécificité propre aux explosions est la gamme d'échelles caractéristiques à relier à ces phénomènes.

Il est ainsi possible considérer un nuage inflammable dont la taille peut aller du mètre à la centaine de mètres (cf. accident de Buncefield en 2005 par exemple). Des effets de pression significatifs, marqués par exemple par des bris de vitre peuvent être observés jusqu'à plusieurs kilomètres.

Le front de flamme qui se propage est caractérisé par une épaisseur inférieure au cm. La flamme en se propageant peut interagir avec des tuyauteries dont le diamètre est de l'ordre de quelques centimètres jusqu'à des éléments dont la taille caractéristique est du mètre (panneaux solaires par exemple) voire de quelques dizaines de mètres (bac de stockage par exemple).

4.2 Le régime de déflagration

4.2.1 Phase de propagation sans turbulence initiale et sans obstacles

Si une source d'inflammation suffisamment énergétique est présente dans le nuage inflammable, alors il est possible d'initier un noyau de gaz brûlés entouré d'un front de flamme qui va ensuite se propager dans tout le nuage inflammable.

Le régime de déflagration est rencontré si l'énergie initiale est inférieure à l'énergie d'initiation directe de détonation. Pour ce régime, le front de flamme se propage par un équilibre entre la diffusion des espèces et de la chaleur et des processus de réaction chimique.

En absence de turbulence initiale, aux premiers instants de propagation, la vitesse de flamme peut s'écrire :

$$V_f = \tau \cdot S_l$$

Où :

- τ est le taux d'expansion thermique, soit le ratio entre la masse volumique des gaz frais et des gaz brûlés ;
- S_l est la vitesse de flamme laminaire, c'est-à-dire la vitesse atteinte par une flamme monodimensionnelle dans les mêmes conditions d'inflammation.

Les valeurs de ces deux paramètres dépendent des caractéristiques du mélange inflammable considéré : produit inflammable, richesse du mélange, température et pression avant inflammation.

Lors de sa propagation, la flamme est sujette à un étirement κ . Celui-ci peut s'écrire :

$$\kappa = \frac{1}{A} \frac{dA}{dt}$$

Où A est un élément de surface de flamme. L'étirement κ peut-être décomposé en un terme de cisaillement et un terme de courbure. Ainsi, les effets de l'étirement sont-ils les plus manifestes peu après l'inflammation, lorsque le rayon de courbure de la flamme est limité et lors d'interactions flamme/obstacle susceptibles de conduire à une déformée locale significative du front de flamme.

En fonction du mélange inflammable considéré, les effets de l'étirement conduisent à une augmentation de la vitesse de flamme par rapport à V_f ou au contraire à une diminution. Ces tendances sont liées au nombre de Lewis du mélange (Le). Celui-ci compare la diffusivité thermique du mélange à la diffusivité massique du réactif en défaut (dans le cas d'un mélange pauvre, ce réactif sera le produit inflammable, dans le cas d'un mélange riche, ce sera l'air ambiant). Il s'écrit :

$$Le = \frac{D_{th}}{D_i}$$

Dans le cas où $Le > 1$, les effets thermo-diffusifs tendent à stabiliser un front de flamme perturbé. Si la flamme est étirée alors sa vitesse de propagation est inférieure à V_f .

Si $Le < 1$, ces effets sont au contraire déstabilisants et la vitesse de flamme est supérieure à V_f .

Si enfin $Le = 1$, les effets sur la flamme sont nuls.

A titre d'exemple, un nombre de Lewis inférieur à 1 est rencontré pour des mélanges hydrogène/air pauvres ou des mélanges propane/air riches. Un nombre de Lewis unitaire correspond à des mélanges méthane/air pauvres.

L'effet thermo-diffusif et de l'étirement de la flamme peut également être traité à travers la longueur de Markstein ou le nombre de Markstein¹⁶, ce dernier étant égal au rapport entre longueur de Markstein et épaisseur de flamme laminaire. Si l'étirement de la flamme est suffisamment faible, alors il est possible de quantifier la vitesse de flamme étirée par une relation linéaire fonction du nombre de Markstein¹⁷.

Lorsque la flamme est d'un rayon suffisamment important, une instabilité dite de Darrieus-Landau^{18,19} est susceptible de se produire à la surface de la flamme. Celle-ci a été mise en avant de manière analytique dès lors que le taux d'expansion est supérieur à l'unité, condition vérifiée en pratique pour toutes les flammes. Cette instabilité se matérialise par l'apparition de cellules à la surface de la flamme. Lorsque la propagation de flamme se poursuit, d'autres cellules apparaissent, avec une gamme de taille caractéristique de plus en plus étendue. Ce phénomène conduit à une augmentation du plissement d'ensemble de la flamme et à une augmentation du taux de production de gaz brûlés.

Il est à noter que l'instabilité se produit à partir d'un rayon caractéristique en raison d'une stabilisation de la flamme liée aux effets de l'étirement et nombre de Lewis du mélange²⁰.

La littérature fournit des ordres de grandeur de rayon caractéristique d'initiation d'une structure de flamme cellulaire pour plusieurs mélanges :

- Pour des flammes méthane/air, il est de la vingtaine ou la trentaine de centimètres (pour une richesse comprise entre 0,8 et 1,2) ²¹ ;
- Pour des flammes propane/air, le rayon d'initiation des cellules est de la dizaine ou de la vingtaine de centimètres (pour une richesse comprise entre 0,9 et 1,5) ²² ;
- Pour des flammes hydrogène/air, le rayon d'initiation des cellules est de quelques centimètres (pour une richesse comprise entre 0,3 et 0,6) ²³.

La Figure 1 met en avant l'effet d'une réduction progressive du nombre de Lewis sur une flamme propane/air sphérique via la visualisation de plusieurs flammes au même rayon, chacune étant caractérisée par une richesse différente.

¹⁶ G.H. Markstein (1951) Experimental and theoretical studies of flame-front stability. Journal of Aeronautical Science 18 :199-209

¹⁷ P. Clavin. Dynamic behavior of premixed flame fronts in laminar and turbulent flows. Progress in Energy and Combustion Science 11:1-59 (1985)

¹⁸ G. Darrieus (1938) Propagation d'un front de flamme. Présenté à La Technique Moderne (Paris) et en 1945 au Congrès de Mécanique Appliquée (Paris).

¹⁹ L.D. Landau (1944) On the theory of slow combustion. Acta Physicochim. USSR.

²⁰ D. Bradley, T. Cresswell, J. Puttock, Flame acceleration due to flame-induced instabilities in large-scale explosion, Combust. Flame, 124 (2001), pp. 551-559

²¹ C.R. Bauwens et al. (2015) Critical Peclet numbers for the onset of Darrieus-Landau instability in atmospheric-pressure methane-air flames, ICDEERS

²² C.R. Bauwens et al. (2015) Experimental study of spherical acceleration mechanisms in large-scale propane-air flames, Proc. Combust. Inst. 35

²³ C.R. Bauwens et al. (2017) Experimental investigation of spherical-flame acceleration in lean hydrogen-air mixtures, Int. J. of Hydrogen Energy 42

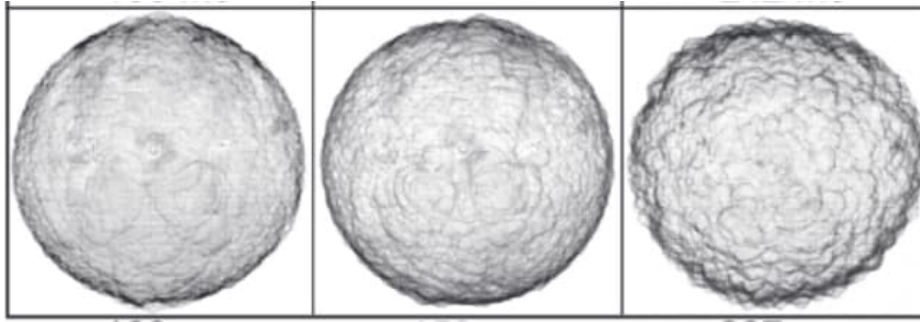


Figure 1 : Flammes propane/air de richesse variable (de gauche à droite : 0,95, 1,20 et 1,45) à un rayon de 50 cm²⁴

Enfin, la littérature met en avant des expériences de propagation de flammes hémisphériques sur quelques mètres ou dizaines de mètres sans obstacles sur le passage de la flamme. Celles-ci indiquent que la flamme accélère de manière continue jusqu'à la fin de la consommation des gaz du nuage inflammable²⁵.

4.2.2 Interaction flamme / turbulence

Il est envisageable qu'un champ de vitesse soit préexistant au passage de la flamme. Ce champ de vitesse est généré par la fuite ou par la propagation de flamme qui met en mouvement les gaz frais qui l'environnent tandis que celle-ci se propage.

L'écoulement est caractérisé par un nombre de Reynolds, qui compare les effets d'inertie de l'écoulement à ses effets de viscosité :

$$Re = \frac{uL}{\nu}$$

Où u et L sont une vitesse et une longueur caractéristique de l'écoulement et ν la viscosité cinématique de l'écoulement. Si Re est suffisamment grand, l'écoulement est dit turbulent car la viscosité ne suffit plus à compenser les perturbations locales de l'écoulement qui conduisent à la formation d'un ensemble de structures tourbillonnaires.

La turbulence dans un fluide est un phénomène complexe difficilement prédictible. Lesieur²⁶ propose la définition suivante.

- « Premièrement un écoulement turbulent doit être imprévisible au sens où une petite incertitude sur la connaissance de l'état initial va s'amplifier en rendant impossible une prédiction déterministe précise de son évolution.
- Deuxièmement, il doit satisfaire la propriété d'accroissement du mélange. Cela signifie qu'un écoulement turbulent doit engendrer un mélange plus rapide que sous le seul effet de la diffusion moléculaire.
- Troisièmement, il doit impliquer une large gamme d'échelles spatiales ».

Si les phénomènes turbulents restent extrêmement complexes, différentes théories ont été développées pour permettre sa compréhension. Ainsi, suivant la théorie de Kolmogorov²⁷, Figure 2, il ressort que :

- la majeure partie de l'énergie cinétique turbulente est contenue dans les plus grandes échelles de la turbulence ;
- les petites échelles sont responsables des phénomènes de dissipation de l'énergie cinétique turbulente ;
- les transferts d'énergie s'effectuent des grandes échelles vers les petites.

²⁴ C.R. Bauwens et al. (2015) Experimental study of spherical-flame acceleration mechanisms in large-scale propane–air flames. Proc. Combust. Int. 35

²⁵ V. Molkov et al. (2006) LES modelling of an unconfined large-scale hydrogen–air deflagration. J. Phys. D: Appl. Phys. 39, pp. 4366–4376

²⁶ Turbulence in Fluids, M. LESIEUR, Second revised Edition, Kluwer Academic Publishers, 1990

²⁷ A.N. Kolmogorov. The local structure of turbulence in incompressible viscous fluid for very large Reynolds numbers. C.R. Acad. Sci. USSR, 30 :301, 1941

Il est également important de noter que, généralement, les grandes échelles sont anisotropes alors que les petites sont isotropes.

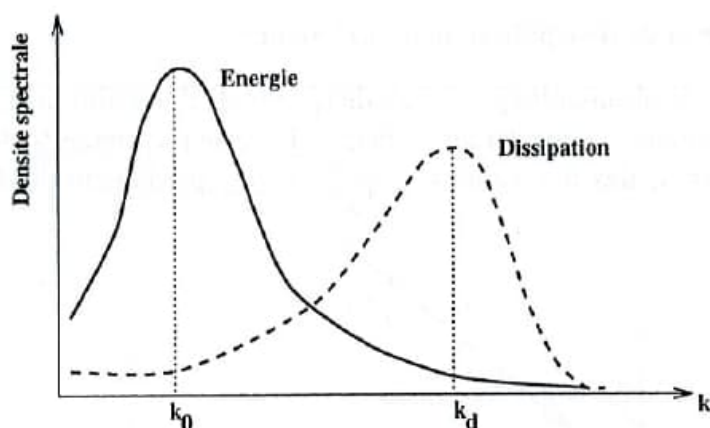


Figure 2 : Distribution spectrale de l'énergie cinétique turbulente et de la dissipation scalaire en fonction du nombre d'onde

L'échelle intégrale L_t correspond à la taille caractéristique des plus grandes échelles du spectre tandis que l'échelle de Kolmogorov η_k correspond à celles des plus petites.

Un diagramme de combustion théorique a été proposé pour rendre compte des divers types d'interactions flamme/turbulence en fonction des ratios u'/S_L et L_T/η_0 avec u' la fluctuation de vitesse liée à l'échelle intégrale et η_0 l'épaisseur de flamme laminaire (Figure 3). Le diagramme met en avant une zone de flammes non perturbées correspondant à des flammes laminaires.

En se déplaçant de la zone en bas à droite du diagramme vers la partie en haut à gauche, une part de plus en plus importante du spectre turbulent pénètre l'épaisseur de flamme laminaire. Le régime est tout d'abord de « flammelettes » : le front de flamme est alors simplement plissé par les diverses échelles du spectre turbulent. On parle ensuite de flamme plissée-épaissie : la zone de réaction du front n'est pas pénétrée par les échelles du spectre turbulent. Enfin, les flammes épaissies correspondent à une interaction entre zone de réaction et une partie du spectre.

Notons néanmoins qu'il ne s'agit que d'une classification qualitative, élaborée sur la base de nombres adimensionnels et négligeant certains effets physiques.

D'après Proust²⁸, les situations d'explosions industrielles correspondent essentiellement à la zone de « flammelettes ».

L'interaction flamme/turbulence conduit, dans cette zone du diagramme, à une augmentation de la surface de flamme.

²⁸ C. Proust (2004) Formation, inflammation, combustion des atmosphères explosives et effets associés. Habilitation à Diriger les Recherches. INP Lorraine.

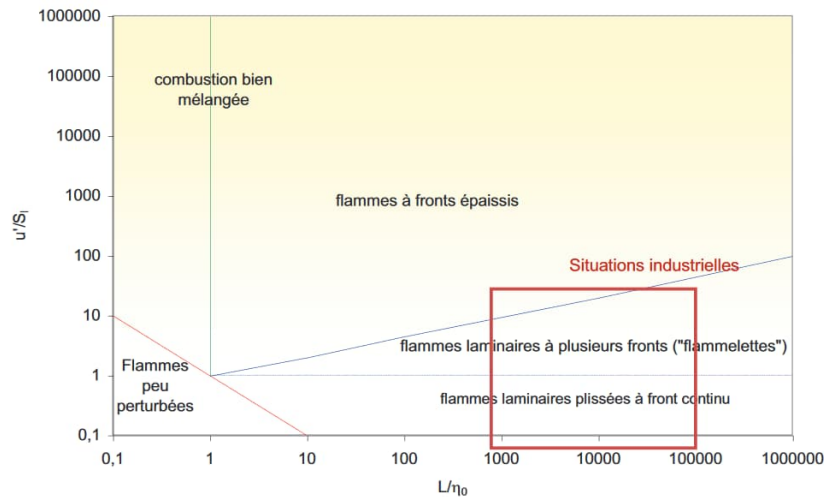


Figure 3 : Les différents régimes de combustion (Borghi, 1995 modifié par Proust, 2004)

4.2.3 Interaction flamme / turbulence / instabilités en absence d'obstacles

Si une flamme se propage dans un milieu turbulent présentant peu d'obstacles, il convient d'envisager une combinaison des effets de la propension intrinsèque de la flamme aux instabilités ainsi que ceux du champ turbulent sur la dynamique de la flamme.

A l'aide d'expériences menées avec une échelle de propagation de quelques cm, Yang et al.²⁹ indiquent, pour une flamme modérément sujette aux instabilités thermo-diffusives, que la prédominance des instabilités ou de la turbulence sur l'intensité de la vitesse de flamme dépend du nombre de Karlovitz³⁰ et du ratio u'/S_L .

Un autre travail (Liu et al.³¹) basé sur le même montage expérimental inclut l'effet des instabilités thermo-diffusives. Celles-ci accroissent la vitesse de flamme quel que soit le régime de propagation de flamme.

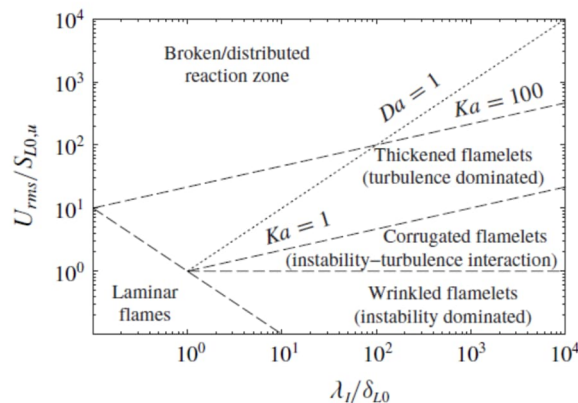


Figure 4 : Interaction entre instabilités de Darrieus-Landau et turbulence positionnés sur le diagramme de combustion. Tiré de Yang et al

Ainsi l'outil de calcul doit comporter une modélisation physique rendant compte de l'interaction flamme / turbulence / instabilités pour la gamme d'échelles représentatives de la turbulence dans le cas considéré et pour le produit inflammable d'intérêt.

²⁹ Yang S. et al. (2018) Role of Darrieus-Landau instability in propagation in expanding turbulent flames. J. Fluid Mech 850, pp. 784-802

³⁰ Ce nombre est le ratio entre l'échelle de temps chimique de la flamme et l'échelle de temps liée à l'échelle de Kolmogorov

³¹ Z. Liu et al. (2018) Cellular instability in $Le < 1$ turbulent expanding flames, Proc. Combust. Inst. 37, pp. 2611-2618

4.2.4 Interaction flamme / obstacles

L'interaction flamme/obstacles est susceptible de conduire à un accroissement de surface de flamme plus rapide que celui correspondant à une propagation du front de flamme en champ libre. Un exemple d'interaction est représenté en Figure 5.

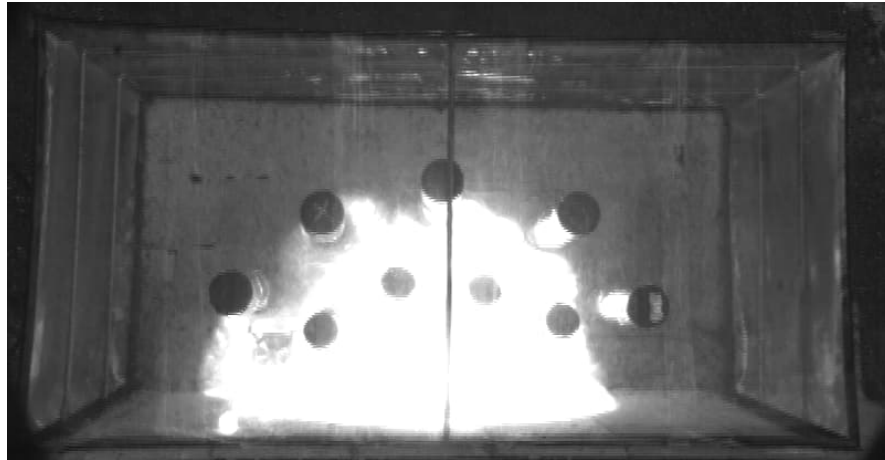


Figure 5 : Vue du dessus d'une interaction flamme/obstacles. Image tirée de la campagne expérimentale DRA72

Plusieurs mécanismes sont susceptibles d'expliquer l'accélération du front de flamme.

4.2.4.1 Effet de sillage

La propagation d'une flamme en milieu confiné ou non conduit à la génération d'un écoulement de gaz frais en amont du front de flamme vers un ensemble d'obstacles.

B. Mutlu Sumer et J. Fredsoe³² ont observé le comportement de l'écoulement en aval de cylindres à paroi lisse. L'augmentation progressive du nombre de Reynolds propre à l'interaction fluide/cylindre conduit à la mise en place d'une zone de recirculation, puis de lâchers de tourbillons de part et d'autre du cylindre de manière périodique : il s'agit de l'allée de Von Karman (Figure 6). Lorsque le nombre de Reynolds augmente, ces tourbillons se détachent et se comportent de manière chaotique. Le dernier stade correspond à une couche limite turbulente autour du cylindre. Des régimes intermédiaires existent entre chacune des phases mais une description fine de la phénoménologie n'est pas l'objet du présent document.

Notons que ces phénomènes sont considérés pour un écoulement amont stationnaire. Les temps d'établissement spécifiques des divers régimes ne sont pas renseignés.

L'interaction entre l'écoulement aval et le front de flamme est susceptible de conduire à une augmentation de surface de flamme par interaction avec les grandes structures ou les plus petites liées à la production de turbulence. Si la flamme rencontre sur son trajet plusieurs rangées d'obstacles, il est envisageable que les interactions successives soient de nature différente si la flamme accélère après chaque rangée.



Figure 6 : Divers types d'interaction fluide/obstacle. Gauche : zone de recirculation, centre : allée de Von Karman, droite : cas de la couche limite turbulente³³

³² B. Sumer and J. Fredsoe (1997) Hydrodynamics around cylindrical structures.

³³ Emmanuelle Itam (2017) Simulation numérique d'écoulements autour de corps non profilés par des modèles de turbulence hybrides et un schéma multirate. Manuscrit de thèse. Université de Montpellier.

4.2.4.2 Instabilités de Rayleigh-Taylor

Les instabilités de Rayleigh-Taylor sont susceptibles d'apparaître au niveau d'une interface séparant un fluide lourd et un fluide léger lorsque le second est accéléré vers le premier. Si l'interface est perturbée, le non-alignement des gradients de densité et de pression conduit à générer un couple (dit couple barocline) contribuant à accroître la perturbation.

Les instabilités de Rayleigh-Taylor se concrétisent par l'apparition de piquants orientés vers le fluide léger et de bulles orientées vers le fluide lourd. Ces piquants sont susceptibles de s'allonger. Dans le cas d'une accélération g constante, d'après certains travaux théoriques³⁴, leur longueur est de l'ordre de gt^2 et dépend du ratio des masses volumiques des fluides de part et d'autre de l'interface. Enfin, à la suite de mécanismes physiques complexes consécutifs au développement des piquants, la formation d'une couche de mélange turbulente est envisageable (Figure 7).

Par le biais de l'augmentation de surface de flamme et/ou la génération de turbulence au voisinage du front de flamme, ces instabilités sont susceptibles d'augmenter la vitesse de consommation des gaz frais par la flamme.

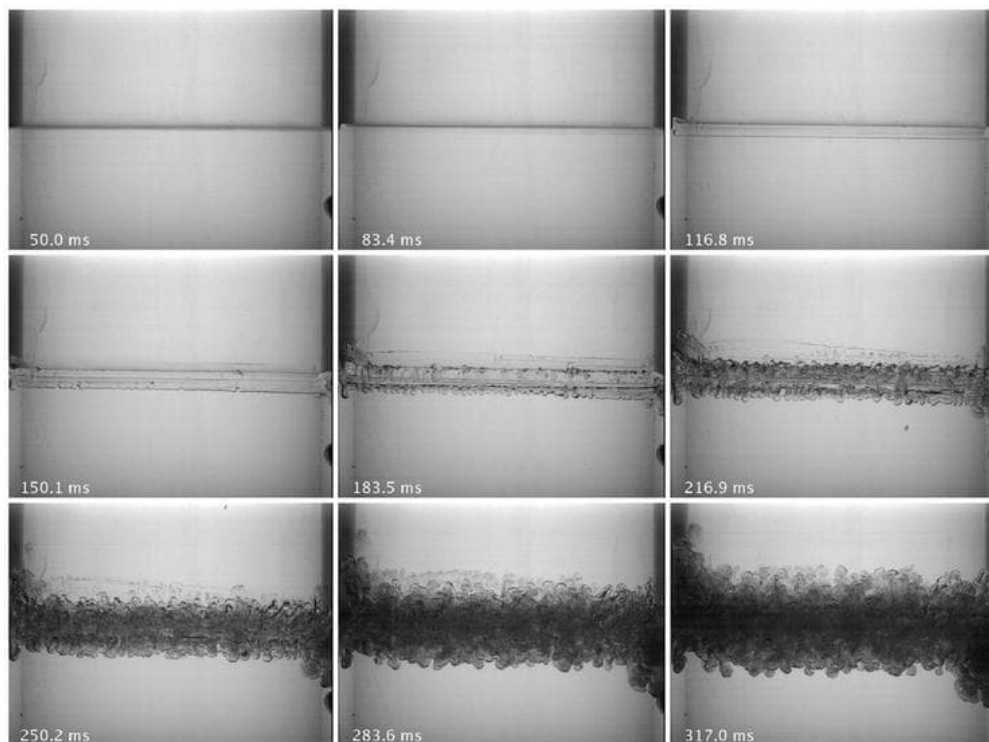


Figure 7 : Images tirées de l'expérience de Roberts³⁵

4.2.5 Synthèse

Divers mécanismes susceptibles de conduire à une accélération de flamme ont été identifiés.

En fonction du scénario considéré, certains vont être prépondérants. De nombreuses possibilités de scénario existent et il est difficile a priori de hiérarchiser les mécanismes en intensité d'autant que la hiérarchie entre mécanismes est susceptible d'évoluer au cours de la propagation de flamme.

Ainsi l'outil de calcul doit comporter une modélisation physique rendant compte de l'interaction flamme / obstacle pour les tailles d'obstacles rencontrées dans le cas considéré et pour des niveaux de vitesse de flamme équivalents.

³⁴ Youngs DL. 2013 The density ratio dependence of self-similar Rayleigh–Taylor mixing. Phil Trans R Soc A 371:20120173

³⁵ Roberts MS (2012) Experiments and simulations on the incompressible, Rayleigh-Taylor instability with small wavelength initial perturbation [Dissertation]. The University of Arizona.

4.3 Le régime de détonation

La pensée courante est que le régime de détonation est un phénomène peu rencontré lors des accidents industriels³⁶. Une revue récente invite néanmoins à revenir sur certaines analyses d'accidents en intégrant à l'analyse l'hypothèse de la détonation³⁷. Le régime de détonation sera brièvement évoqué dans cette partie.

Le régime de détonation est caractérisé par la propagation d'une interface gaz frais/gaz brûlés par auto-inflammation des gaz frais de proche en proche par effet de compression. La vitesse de propagation de l'interface est de l'ordre de quelques milliers de m/s.

Ce régime de propagation peut être initié directement au sein d'un nuage inflammable si l'énergie d'inflammation excède l'énergie d'initiation directe de détonation.

Il peut également être expliqué par un phénomène de Transition de la Déflagration à la Détonation (TDD). La combustion du mélange inflammable démarre alors par une déflagration. Celle-ci peut être caractérisée, du fait du scénario considéré, par une accélération de l'interface conduisant à la formation d'un choc précurseur en amont de l'interface gaz frais/gaz brûlés. L'amplification de ce choc peut alors conduire à la génération de centres d'explosion et à la formation d'une détonation autonome³⁸.

L'approche mise en œuvre par l'utilisateur doit pouvoir modéliser une éventuelle TDD. Dans le cas contraire, il est possible de passer à côté de l'occurrence d'un tel phénomène susceptible d'augmenter significativement les distances d'effets. Il convient alors que l'utilisateur propose des éléments d'analyse excluant toute occurrence de TDD, tout particulièrement si la vitesse de flamme peut approcher 500 m/s ou si la vitesse de propagation du front de flamme excède 70 % de la vitesse du son dans les gaz brûlés.

BP3	L'approche mise en œuvre par l'utilisateur doit pouvoir modéliser une éventuelle TDD. A défaut, il convient que l'utilisateur propose des éléments d'analyse permettant d'exclure toute occurrence de TDD dans le cas traité
------------	---

4.4 Effets de surpression

Des expressions analytiques basées sur des hypothèses simplificatrices ont été proposées pour décrire le champ de surpression induit par une explosion confinée ou non. Ces expressions sont rappelées afin de mettre en avant les paramètres prépondérants sur les résultats.

Dans le cas d'une explosion en milieu confiné³⁹, l'évolution de la surpression interne s'écrit :

$$\frac{1}{P} \frac{dP}{dt}(t) = \gamma \frac{\dot{Q}_{fl}(t) - \dot{Q}_{ouv}(t)}{V}$$

Où γ est le rapport des capacités calorifiques des gaz frais, $\dot{Q}_{fl}$ est le débit volumique des gaz brûlés produits par la flamme et $\dot{Q}_{ouv}$ est le débit volumique des gaz chassés par les ouvertures du local. V est le volume du local.

Cette expression met en avant que la surpression interne résulte de la compétition entre la production de gaz brûlés et la décharge de pression liée à la présence d'un événement.

³⁶ Y. Mouilleau et al. (1999) Guide des méthodes d'évaluation des effets d'une explosion de gaz à l'air libre. Rapport INERIS DRA - YMo/YMo - 1999 – 20433. Téléchargeable sur www.ineris.fr.

³⁷ E.S. Oran (2020) Mechanisms and occurrence of detonations in vapor cloud explosions. Progress in Energy and Combustion Science 77

³⁸ G. Cheng (2012) Contribution à l'étude de la Transition Déflagration Détonation (TDD) dans des Mélanges Gazeux Binaires H₂/C₃H₈/Air. Manuscrit de thèse. Thèse ENSMA.

³⁹ B. Lewis, G. Von Elbe (1987) : Combustion, Flames and Explosion, 3rd ed., Academic Press, London ISBN 0 12 446751 2

Dans le cas d'une explosion en milieu non confiné, si la flamme est suffisamment lente (vitesse de propagation inférieure à 120 m/s environ) et dans l'hypothèse où celle-ci est hémisphérique, le champ de pression à distance de la flamme s'écrit⁴⁰ :

$$\Delta P(r, t) = \rho_0 \frac{\left(1 - \frac{1}{\tau}\right)}{4\pi r} \cdot \frac{d^2 V_b}{dt^2}(t)$$

Avec ρ_0 la masse volumique de l'air ambiant, r la distance au point d'inflammation, τ le taux d'expansion thermique (soit le rapport entre la masse volumique des gaz frais et des gaz brûlés pour le mélange considéré) et V_b est le volume de gaz brûlés.

Dans ce cas, toute chose égale par ailleurs, la surpression à distance de la flamme dépend de la dérivée seconde du volume de gaz brûlés.

Les deux expressions mettent en avant que la dynamique de production des gaz brûlés pilote les effets de surpression.

⁴⁰ A. Lannoy, J.C. Leyer, D. Desbordes, J.P. St Cloud (1989) Déflagrations sans turbulence en espace libre : expérimentation et modélisation. Bulletin de la DER, série A, Electricité de France

5 Brève description des modèles de calcul

Pour modéliser les phénomènes d'explosion de nuages, les modèles numériques 3D sont basés sur la résolution des équations de comportement des fluides. De ce fait, ils doivent permettre de prendre en compte l'ensemble des phénomènes intervenant de façon significative sur l'explosion, qu'ils soient liés à la propension à l'auto-accélération de la flamme, à la turbulence de nuage préexistante à l'inflammation ou aux obstacles présents sur le chemin de la flamme. Différents modèles et les hypothèses associées sont ensuite introduits pour permettre la résolution de ce système d'équations au moyen d'outils de calcul.

Le système décrivant le modèle physique est composé de⁴¹ :

- une équation de conservation de la masse ;
- trois équations de conservation de la quantité de mouvement ;
- une équation de conservation de l'énergie ;
- des équations de conservation des espèces ;
- la loi d'état du mélange gazeux.

La résolution exacte de ce système d'équations aux dérivées partielles étant impossible pour les configurations réelles, différents sous-modèles doivent être introduits. En particulier, la présence de phénomènes turbulents nécessite l'usage de filtres ou de moyennes pour permettre la résolution des équations. Ces opérations font apparaître des corrélations entre les fluctuations des différentes grandeurs ainsi qu'un terme source chimique filtré ou moyenné. La fermeture de ces termes nécessite le recours à un modèle de turbulence d'une part et à un modèle de combustion turbulente d'autre part.

Sans détailler ces modèles, ce chapitre en décrit les grandes lignes, leurs avantages mais aussi leurs limitations sur la base de leurs hypothèses fondatrices. Ces différentes hypothèses pour chacun des modèles, et sous modèles physiques associés, seront comparées aux caractéristiques des explosions pour juger de l'applicabilité ou non de ces modèles.

5.1 Modélisation de la turbulence

Il est possible de distinguer trois grandes familles de modélisation des phénomènes turbulents :

- La simulation numérique directe (SND ou DNS en anglais), qui consiste à résoudre de manière explicite toutes les échelles de la turbulence.
- La Simulation des grandes échelles (SGE ou LES en anglais), qui résout explicitement les plus grandes échelles (celles qui contiennent l'énergie de la turbulence) et modélise les petites.
- Les approches moyennées (RANS en anglais), qui modélisent toutes les échelles de la turbulence.

Il est possible de représenter, de façon schématique, les résultats issus de ces différentes approches, Figure 8.

⁴¹ Les équations de transport évoquées sont celles de la modélisation CFD au sens macroscopique. D'autres méthodes CFD existent, telle la méthode de Lattice-Boltzmann basée sur une résolution d'équations décrivant l'évolution des fluides à échelle mésoscopique. Cette méthode est plus récente et potentiellement plus performante pour des calculs réalisés en parallèle sur supercalculateur que la modélisation CFD macroscopique. Les méthodes Lattice-Boltzmann sont à l'heure actuelle en développement mais sont susceptibles d'être utilisées de manière plus intensive à l'avenir.

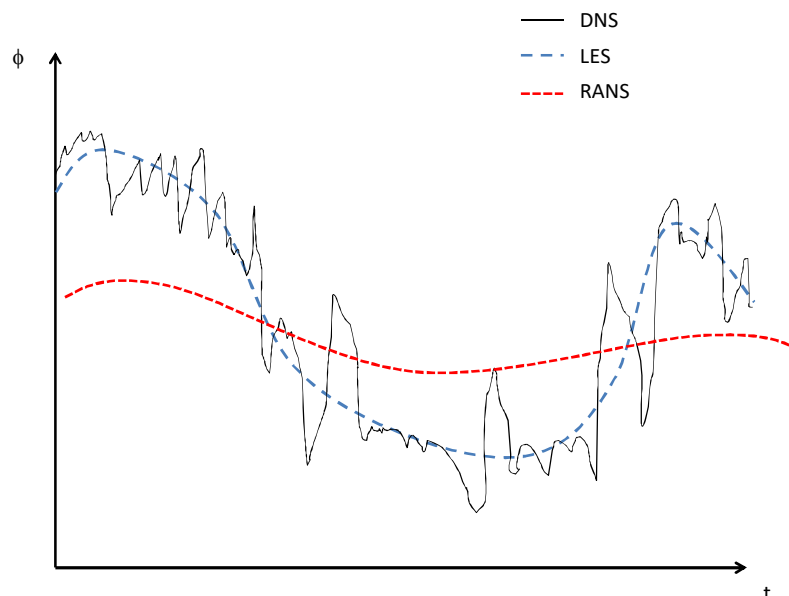


Figure 8 : Représentation schématique de l'évolution d'une grandeur physique au cours du temps selon les différentes modélisations de la turbulence⁴²

Comme le montre cette figure, la DNS permet de capturer toutes les fréquences de l'écoulement et ainsi l'ensemble des fluctuations. La LES consiste à filtrer les fréquences les plus élevées mais reproduit les fluctuations liées aux plus grandes échelles. Enfin, l'approche RANS ne fournit que l'information du mouvement moyen. Il convient de noter que les deux premières approches correspondent à une réalisation alors que l'approche RANS correspond à la moyenne statistique d'un grand nombre de simulations.

Le corollaire de cette figure est lié au maillage. Ainsi, la DNS requiert un maillage capable de capturer toutes les échelles de la turbulence, donc y compris l'échelle de Kolmogorov, ce qui impose des maillages très fins. En pratique, ceux-ci ne sont pas compatibles avec les explosions d'échelle industrielle.

La précision d'un calcul LES dépend du maillage. L'échelle de coupure doit impérativement se situer dans la zone dite inertielle du spectre de turbulence, zone correspondant au transfert d'énergie entre grandes et petites échelles. A l'extrême, une échelle de coupure au-delà de l'échelle de Kolmogorov fait tendre la simulation vers la DNS.

BP4	<u>Lors de la réalisation d'une simulation de type LES, il doit être vérifié que les mailles localisées dans la zone de propagation de flamme ont une taille caractéristique inscrite dans la zone inertielle du spectre turbulent.</u>
------------	--

Les approches de type RANS ne représentant que l'écoulement moyen, les résultats des simulations deviennent, au-delà d'un certain seuil, peu sensibles au maillage. Ce dernier point doit être vérifié avant l'exploitation d'un résultat en réalisant des simulations pour plusieurs tailles de mailles.

Les approches de type RANS sont aujourd'hui les plus utilisées dans le monde industriel car elles permettent de minimiser les efforts de maillage et donc les temps de simulation. Ces approches consistent à simplifier la résolution du système d'équations aux dérivées partielles en ne s'intéressant qu'aux grandeurs moyennes. Chaque variable est décomposée en la somme d'une valeur moyenne statistique, sur un ensemble de réalisations d'écoulement, et d'une fluctuation.

⁴² J.-M. Lacome et B. Truchot (2016) Guide de Bonnes Pratiques pour la réalisation de modélisations 3D pour des scénarios de dispersion atmosphérique en situation accidentelle. Rapport de synthèse des travaux du Groupe de Travail national. DRA-15-148997-06852A. Téléchargeable sur www.ineris.fr

Dans un contexte RANS, certains outils de modélisation utilisent également un sous-modèle spécifique pour rendre compte de la turbulence en aval d'obstacles de faible taille caractéristique et non résolus par le maillage, il s'agit de l'approche PDR (pour Porosity Distributed Resistance en anglais)⁴³. Celle-ci introduit une notion de porosité qui rend compte du taux d'occupation de chaque maille par un ensemble d'obstacles. Les diverses équations de transport sont alors réécrites en incluant des facteurs représentatifs de la porosité. La complexification induite du système d'équations est susceptible d'augmenter la dépendance au maillage du résultat de calcul.

Les outils exploitant cette approche sont hybrides dans le sens où une gamme d'obstacles est résolue explicitement par le maillage et une autre est traitée par l'approche PDR.

L'approche LES s'appuie également sur une décomposition mais présente l'intérêt de ne pas nécessiter de moyenne statistique. Chacune des variables est ainsi décomposée en une grandeur filtrée et une partie dite de sous maille. La partie filtrée est résolue directement, les valeurs de sous maille sont modélisées. Ces approches permettent de capturer plus finement les phénomènes physiques sous réserve de réaliser un maillage suffisamment fin. Dans ce cas, la majeure partie des échelles turbulentes sont résolues explicitement, assurant une meilleure prédiction des phénomènes de mélange turbulent.

Notons également que d'autres approches de modélisation de la turbulence sont possibles, telles la modélisation hybride RANS / LES permettant de limiter les coûts de calcul tout en conservant la précision pouvant être apportée par la modélisation LES dans certaines régions du domaine de calcul. Aucun papier n'a été trouvé concernant l'application à l'explosion bien qu'il soit envisageable que de tels calculs soient réalisés à l'avenir.

5.1.1 Spécificités des explosions

La turbulence générée par les explosions présente plusieurs spécificités :

- Celle-ci est instationnaire : le champ turbulent évolue au fur et à mesure de la propagation de flamme. Dans l'exemple d'une flamme approchant un obstacle cylindrique, la vitesse de l'écoulement généré en amont du front de flamme à proximité de l'obstacle augmente au fur et à mesure que la flamme se rapproche de l'obstacle. Le type d'écoulement en aval de l'obstacle évoluera ainsi également en fonction du temps.
- La turbulence est par ailleurs anisotrope, étant donné que la propagation de flamme, responsable de la génération de cette turbulence est elle-même anisotrope. Cette anisotropie peut être liée à une hauteur de nuage inflammable limitée, à une distribution de produit inflammable non homogène au sein du nuage, à une distribution d'obstacles non isotrope, ...
- La turbulence est multi-échelle. La turbulence peut être générée à proximité directe de la flamme en absence d'obstacles, elle peut également être produite en aval d'obstacles de taille variable ou encore par le jet qui a généré l'accumulation de produit inflammable. Toutes ces origines peuvent conduire à des spectres turbulents distincts vus par la flamme à divers stades de sa propagation.

Il convient de retenir la nécessité d'utilisation de modèles de turbulence adaptés aux spécificités de l'écoulement pré-existant à toute inflammation et celui en amont du front de flamme. Le modèle de turbulence utilisé dans l'outil de calcul doit permettre de prendre en compte ces spécificités.

Le Tableau 2 donne un aperçu des différents modèles disponibles dans la littérature et l'application qui peut en être faite pour la modélisation des phénomènes d'explosion.

Notons que, de manière générale, ces modèles ont été développés pour des écoulements non réactifs.

⁴³ S.V. Patankar, D.B. Spalding (1974) Heat exchangers: design and theory sourcebook, chapter "A calculation procedure for the transient and steady-state behavior of shell-and-tube heat exchangers", pp. 155-176. McGraw-Hill

	Approche théorique des modèles			Application pratique	Synthèse
Approche	Modèle / Type de fermeture	Hypothèses et Limites	Domaine d'application	Dans la littérature	Utilisation pour l'explosion d'échelle industrielle
DNS	-	Résolution directe des équations nécessitant la capture de toutes les échelles de la turbulence	Cas petite échelle ou cas 2-D	Des articles exploitent la DNS pour étudier la TDD ⁴⁴ .	Maillages requis pour l'échelle industrielle incompatibles avec les moyens de calcul actuels.
LES	Modèle de Smagorinsky	Taux de transfert d'énergie constant des grandes vers les petites échelles Nécessité de positionner la taille du filtre dans la zone inertielle du spectre de la turbulence	Permet de prendre en compte l'anisotropie de la turbulence	Pas de papier trouvé pour la modélisation de l'explosion	Bonne prise en compte des phénomènes physiques. Maillages requis importants nécessitant des moyens de calcul conséquents Besoin de contrôler la qualité du calcul en vérifiant le niveau de résolution de la turbulence
	Modèle à équation de transport de k	Nécessité de positionner la taille du filtre dans la zone inertielle du spectre de la turbulence		Des papiers ont été publiés avec ce modèle pour l'explosion ^{45,46} pour lesquels le mélange inflammable est initialement au repos. Pas de comparaison modélisation/expérience pour la turbulence générée par la flamme	
	Modèle WALE	Nécessité de positionner la taille du filtre dans la zone inertielle du spectre de la turbulence Retrouve comportement asymptotique de la turbulence dans les couches limites			
VLES / LES	Modèle RNG	Taux de transfert d'énergie constant des grandes vers les petites échelles Nécessité de positionner la taille du filtre dans la zone inertielle du spectre de la turbulence	Permet de prendre en compte l'anisotropie de la turbulence	Des papiers ont été publiés avec ce modèle pour l'explosion ⁴⁷ pour lesquels le mélange inflammable est initialement au repos. Pas de comparaison modélisation/expérience pour la turbulence générée par la flamme	

⁴⁴ O. Dounia, O. Vermorel, A. Misdariis, T. Poinot (2019) *Influence of kinetics on DDT simulations*. Combustion and Flame, 200. 1-14.

⁴⁵ O. Vermorel, P. Quillatre, T. Poinot (2017) *LES of explosions in venting chamber: A test case for premixed turbulent combustion models*. Combustion and Flame, 183. 207-223.

⁴⁶ V.C.M. Rao, P. Satiah, J.X. Wen (2018) *Effects of congestion and confining walls on turbulent deflagrations in a hydrogen storage facility-part 2: Numerical study*. Int. J. of Hydrogen Energy 43, pp. 15593-15621

⁴⁷ D. Makarov et al. (2009) *An inter-comparison exercise on CFD model capabilities to predict a hydrogen explosion in a simulated vehicle refuelling environment*. Int. J. of Hydrogen Energy 34, pp. 2800-2814

Approche théorique des modèles				Application pratique	Synthèse
Approche	Modèle / Type de fermeture	Hypothèses Limites et	Domaine d'application	Dans la littérature	Utilisation pour l'explosion d'échelle industrielle
RANS	Contraintes algébriques turbulentes, types $R_{ij} - \epsilon$	Résolutions de nombreuses équations de transport supplémentaires Résolution de l'écoulement moyen	Permet de prendre en compte l'anisotropie de la turbulence	Pas de papier trouvé avec ce modèle pour l'explosion	
	2-équations $k - \epsilon$	Turbulence isotrope Résolution de l'écoulement moyen	Re très élevé	Des papiers ont été publiés avec ce modèle pour l'explosion ⁴⁸ Pas de comparaison modélisation/expérience pour la turbulence générée par la flamme. Les ordres de grandeur des fluctuations de vitesse générées par un jet, avant inflammation, sont retrouvés.	Besoin en maillages limité Une partie de la physique n'est pas résolue. L'hypothèse d'isotropie de la turbulence reste le handicap principal de ces approches
	2-équations : $k - \omega$ SST	Transition entre $k - \omega$ loin des parois au modèle $k - \epsilon$ près de celles-ci. Le modèle $k - \omega$ permet de décrire la sous-couche visqueuse		Des papiers ont été publiés avec ce modèle pour l'explosion ⁴⁹ pour lesquels le mélange inflammable est initialement au repos. Pas de comparaison modélisation/expérience pour la turbulence générée par la flamme	Ce modèle possède les mêmes limitations que les modèles $k - \epsilon$
	2-équations $k - \epsilon$ + approche PDR	Turbulence isotrope Résolution de l'écoulement moyen Modélisation complexe		Nombreuses applications pour l'explosion industrielle ⁵⁰ Une thèse montre que la prédiction des écoulements en aval d'obstacles par cette approche a été étudiée ⁵¹	Besoin en maillages limité

Tableau 2 : Synthèse du domaine de validité pour les différentes approches de modélisation de la turbulence

⁴⁸ E. Vyazmina, S. Jallais, L. Gastaldo (2017) *Delayed explosion of hydrogen high pressure jets: an inter comparison benchmark study*. ICHS 7

⁴⁹ E. Vyazmina et al. (2019) *Vented explosion of hydrogen/air mixture: An intercomparison benchmark exercise*. Int J of Hydrogen Energy 44, pp. 8914-8926

⁵⁰ O.R. Hansen, P. Hinze, D. Engel, S. Davis (2010) *Using computational fluid dynamics (CFD) for blast wave predictions*. Journal of Loss Prevention in the Process Industries 23, pp. 885-906

⁵¹ Arntzen, B. J. (1998) *Modelling of turbulence and combustion for simulation of gas explosions in complex geometries*. Dr. Ing. Thesis, NTNU, Trondheim, Norway.

5.2 Modélisation de la combustion turbulente

Cette démarche consiste à proposer une fermeture pour les termes sources chimiques.

5.2.1 DNS

En absence de toute modélisation de la turbulence, il est possible de fermer les termes sources chimiques à l'aide de lois d'Arrhenius.

L'utilisation de ces lois présuppose que la combustion du mélange inflammable considéré a été décrite en amont du calcul CFD par un schéma cinétique chimique. Celui-ci rend compte de la combustion par le biais d'équations élémentaires, la cinétique de chacun étant quantifiée par une loi d'Arrhenius. Le schéma peut-être d'une complexité variable en fonction du nombre de réactions élémentaires qui le composent et du nombre d'espèces chimiques pris en compte.

Grossièrement, on parle de schéma cinétique réduit si les espèces chimiques de l'équation bilan à une étape décrivant la combustion du mélange ainsi que quelques autres sont prises en compte. Le nombre typique de réactions élémentaires est inférieur ou égal à 4. On parlera de schéma cinétique complexe sinon.

Si un schéma cinétique est connu, il est possible d'en extraire un taux de réaction pour chaque espèce chimique dont l'équation de transport est résolue par le code CFD. Cette démarche d'utilisation directe des taux de réaction est utilisée par les formalismes DNS.

5.2.2 Approche LES

Si une approche LES est mise en œuvre, le terme source est filtré. Une première approche de modélisation simple consiste à épaissir⁵² le front de flamme pour que celui-ci soit résolu sur le maillage. Une fonction d'efficacité est ensuite utilisée pour conserver les nombres adimensionnels décrivant le régime de propagation de flamme. Ce type d'approche peut être couplée avec une cinétique chimique réduite. Le modèle de flamme épaissie n'a pas de limite d'application théorique.

Une autre famille d'approche consiste à résoudre une équation de transport pour une quantité matérialisant le front de flamme :

- la densité de surface de flamme⁵³ (surface de flamme dans une maille divisée par le volume de la maille) ;
- le plissement de la flamme⁵⁴ (ratio entre la surface de flamme dans la maille et la surface de flamme en absence de toute interaction avec le champ turbulent) ;
- G_{55} , une quantité qui décrit la position de la flamme.

Les termes sources chimiques sont alors fermés par un produit entre la densité de surface de flamme, (ou le plissement de flamme ou le gradient de G) et la vitesse de flamme laminaire. Le premier terme du produit rend ainsi compte de l'interaction flamme / turbulence par une augmentation de surface de flamme par rapport à une situation perturbée. Au travers de chaque élément de surface de flamme, la réaction chimique n'est pas perturbée par la turbulence. Cette modélisation est bâtie sous l'hypothèse d'un régime de flammelettes concernant le régime de propagation de flamme.

Une variante simple des modèles basés sur la densité de surface de flamme ou le plissement consiste à remplacer la résolution d'une équation de transport spécifique par une fermeture algébrique. Ces fermetures sont basées sur la taille de maille et les caractéristiques de la flamme laminaire (épaisseur et vitesse de propagation).

⁵² O. Colin (2000) *A thickened flame model for large eddy simulations of turbulent premixed combustion*. Phys Fluids 12(7)

⁵³ S. Richard et al. (2007) *Towards large eddy simulation of combustion in spark ignition engines*. Proc. Combust. Inst 31(2)
H.G. Weller et al. (1998) *Application of a flame-wrinkling combustion model to a turbulent mixing layer*. Proc. Combust. Inst. 27(1)

⁵⁵ H. Pitsch (2002) *A G-equation formulation for large-eddy simulation of premixed turbulent combustion*. CTR, Annual Research Briefs

Lorsque certains modèles sont utilisés pour simuler l'explosion, des sous-modèles sont mis en œuvre afin de réintroduire par le biais de facteurs caractéristiques des phénomènes physiques non intégrés à la base, essentiellement par manque de résolution spatiale de la flamme⁵⁶ et/ou par simplification de modélisation des propriétés de transport des espèces chimiques :

- les instabilités de Darrieus-Landau ;
- les instabilités de Rayleigh-Taylor.

Dans l'hypothèse où les longueurs d'onde spécifiques à chaque phénomène sont différentes, le terme source global correspond au terme source « turbulent » multiplié par des facteurs représentatifs de chaque phénomène.

Des approches identifiant d'autres phénomènes « non intégrés » dans le modèle de base et proposant une composition du terme source plus complexe sont également rencontrées⁵⁷.

5.2.3 Approche RANS

Les modélisations évoquées dans le paragraphe précédent et basées sur les notions de densité de surface de flamme, de plissement de flamme ou de niveau de G peuvent toujours être exploitées dans un contexte RANS.

Le modèle dit β -flamme permet également de rendre compte d'une propagation du front de flamme avec un contrôle d'épaisseur, celle-ci étant limitée à quelques mailles, la vitesse de flamme turbulente provenant d'une fermeture algébrique.

Il est également possible de fermer le terme source chimique moyenné en le supposant limité par un temps caractéristique de la turbulence (typiquement égal au ratio k/ϵ)⁵⁸. La formalisation du terme source le rend proportionnel à cette quantité. Il s'agit des modèles de type Eddy-Dissipation Concept. Ces modèles par construction sont également adaptés au régime de flammèches.

Le Tableau 3 donne un aperçu des différents modèles disponibles dans la littérature et l'application qui peut en être faite pour la modélisation des phénomènes d'explosion.

⁵⁶ C.R. Bauwens et al. (2011) Vented explosion overpressures from combustion of hydrogen and hydrocarbon mixture. Int. J. of Hydrogen Energy 36(3)

⁵⁷ H. Xiao et al. (2012) Experimental and numerical investigation of premixed flame propagation with distorted tulip shape in a closed duct, Combust. Flame 159

⁵⁸ B.F. Magnussen and B.J. Hjertager (1976) On mathematical modelling of turbulent combustion. Proc. Combust. Inst. 16

	Approche théorique des modèles			Application pratique	Synthèse
Approche	Modèle / Type de fermeture	Hypothèses et Limites	Domaine d'application	Dans la littérature	Utilisation pour l'explosion d'échelle industrielle
DNS	Schéma cinétique	Résolution directe des équations nécessitant la capture de toutes les échelles de la turbulence	Cas petite échelle ou cas 2-D	Des articles exploitent la DNS pour étudier la TDD ⁵⁹ .	Maillages requis incompatibles avec les moyens de calcul actuels.
LES	Modèle de flamme épaissie	Effet du choix de la fonction d'efficacité sur le résultat	La résolution d'une partie de la physique par le maillage permet de limiter effet des modèles	Application à des cas dont l'échelle caractéristique est de quelques mètres ⁶⁰	Bonne prise en compte des phénomènes physiques. Maillages requis important nécessitant des moyens de calcul conséquents Besoin de contrôler la qualité du calcul en vérifiant le niveau de résolution de la turbulence
	Modèle à densité de surface de flamme / Modèle basé sur une équation de transport du plissement	Pas de prise en compte des effets de diffusion différentielle au travers du front de flamme Hypothèse intrinsèque de régime de flammelette Physique complexe contenue dans la fermeture de la vitesse de flamme turbulente		Peu d'utilisations trouvées pour l'explosion ⁶¹	
	Modèle G-Equation	Physique complexe contenue dans la fermeture de la vitesse de flamme turbulente			
VLES / LES	Modèle multi-physique	Question de la portée générale des sous-modèles mis en œuvre Hypothèse de l'indépendance des phénomènes représentés par les sous-modèles	Permet de traiter explosions de plus grande échelle que LES	Plusieurs entités mettent cette démarche en œuvre avec des sous-modèles physiques différents ^{62, 63} . Echelle caractéristique : la dizaine de mètres	Ces modèles ont été mis en œuvre pour des cas de propagation de flamme en champ libre et pour des explosions confinées éventées

⁵⁹ O. Dounia, O. Vermorel, A. Misdariis, T. Poinsot (2019) *Influence of kinetics on DDT simulations*. Combustion and Flame, 200. 1-14.

⁶⁰ O. Vermorel, P. Quillatre, T. Poinsot (2017) *LES of explosions in venting chamber: A test case for premixed turbulent combustion models*. Combustion and Flame, 183. 207-223

⁶¹ S.S. Ibrahim, S.R. Gubba, A.R. Masri, W. Malasekera (2009) *Calculations of explosion deflagrating flames using a dynamic flame surface density model*. Journal of Loss Prevention in the Process Industries 22, pp. 264

⁶² D. Makarov et al. (2009) *An inter-comparison exercise on CFD model capabilities to predict a hydrogen explosion in a simulated vehicle refuelling environment*. Int. J. of Hydrogen Energy 34, pp. 2800-2814

⁶³ C.R. Bauwens, J. Chaffee, S.B. Dorofeev (2011) *Vented explosion overpressures from combustion of hydrogen and hydrocarbon mixtures*. Int J of Hydrogen Energy 36, pp. 2329-2336

Approche théorique des modèles				Application pratique	Synthèse
Approche	Modèle / Type de fermeture	Hypothèses et Limites	Domaine d'application	Dans la littérature	Utilisation pour l'explosion d'échelle industrielle
RANS	Modèle Eddy-Dissipation Concept	Hypothèse de vitesse de flamme limitée par un temps caractéristique de turbulence Hypothèse de régime de flammelette		Peut être couplé à un modèle PDR pour l'explosion industrielle ⁶⁴	L'ensemble de la démarche de modélisation (RANS + PDR + EDC) est compatible avec des calculs d'explosions industrielles et des ressources de calcul limitées
	Modèle à densité de surface de flamme / Modèle basé sur une équation de transport du plissement	Physique complexe contenue dans la fermeture de la vitesse de flamme turbulente Hypothèse de régime de flammelette		Pas d'utilisation trouvée pour l'explosion	Maillages comportant potentiellement un nombre de mailles important L'utilisation à échelle industrielle est limitée par la puissance de calcul de l'utilisateur
	Modèle G-Equation	Physique complexe contenue dans la fermeture de la vitesse de flamme turbulente		Peu d'utilisations trouvées pour l'explosion ⁶⁵	Maillages comportant potentiellement un nombre de mailles important L'utilisation à échelle industrielle est limitée par la puissance de calcul de l'utilisateur
	Modèle Beta-flamme	Physique complexe contenue dans la fermeture de la vitesse de flamme turbulente		Peut être couplé à un modèle PDR pour l'explosion industrielle ⁶⁶ . Utilisation étendue de cette approche pour la modélisation de l'interaction flamme/obstacle pour de grandes installations.	L'ensemble de la démarche de modélisation (RANS + PDR + Beta-flamme) est compatible avec des calculs d'explosions industrielles et des ressources de calcul limitées
	Modèle multi-physique	Question de la portée générale des sous-modèles mis en œuvre Hypothèse de l'indépendance des phénomènes représentés par les sous-modèles		Peu d'utilisations trouvées pour l'explosion ⁶⁷ Plusieurs types d'explosion confinées d'échelles variables sont traités par ce modèle	Maillages comportant potentiellement un nombre de mailles important L'utilisation à échelle industrielle est limitée par la puissance de calcul de l'utilisateur

Tableau 3 : Synthèse du domaine de validité pour les différentes approches de modélisation de la combustion turbulente

⁶⁴ K.E. Rian et al. (2016) *Coherent Computational Analysis of Large-Scale Explosions and Fires in Complex Geometries* – From Combustion Science to a Safer Oil and Gas Industry. Chemical Engineering Transactions

⁶⁵ E. Vyazmina, S. Jallais, L. Gastaldo (2017) *Delayed explosion of hydrogen high pressure jets: an inter comparison benchmark study*. ICHS 7

⁶⁶ Arntzen, B. J. (1998) *Modelling of turbulence and combustion for simulation of gas explosions in complex geometries*. Dr. Ing. Thesis, NTNU, Trondheim, Norway

⁶⁷ G. Momferatos et al. (2022) *Vapor cloud explosions in various types of confined environments: CFD analysis and model validation*. Journal of Loss Prevention in the Process Industries 104681

6 Modèles numériques

La résolution numérique des EDP nécessite le recours à des méthodes numériques.

L'importance des techniques de résolution numérique spatiale et temporelle des équations est grande car le système d'équations aux dérivées partielles (EDP), ne peut être résolu exactement. Le continuum espace-temps est ainsi découpé en éléments discrets spatiaux (mailles) et temporels (pas de temps) sur lesquels les représentations algébriques des équations sont intégrées.

Cette discrétisation peut être réalisée selon plusieurs principes et chaque discrétisation n'est pas équivalente aux autres du point de vue de la qualité de la représentation algébrique et de la résolution associée.

Ainsi les bonnes pratiques concernant les techniques numériques sont primordiales pour s'assurer d'une bonne représentation des phénomènes physiques. De mauvais choix de méthodes numériques peuvent conduire à une augmentation des phénomènes de diffusion numérique qui conduisent à minimiser les distances d'effet calculées.

6.1 Domaine de calcul et maillage

Dans le cas d'un calcul d'explosion en milieu non confiné, il existe deux principales zones d'intérêt au niveau du domaine de calcul :

- La zone de champ proche, correspondant à la zone de propagation de flamme et de génération des ondes de surpression. Cette zone est d'une taille supérieure à la taille initiale du nuage inflammable étant donné que les gaz brûlés produits par la flamme occupent un volume supérieur aux gaz frais.
- La zone de champ lointain, dans laquelle est observée la propagation des ondes de surpression avec décroissance progressive des pics au fur et à mesure de l'éloignement des ondes par rapport à la source.

Le domaine de calcul dans lequel sont résolues les diverses équations de transport discrétisées est fini et délimité par des conditions limites de sortie.

Deux situations problématiques peuvent être envisagées dans le cas de l'explosion en milieu non confiné :

- Soit la flamme interagit avec une condition de limite de sortie, ce qui indique que le domaine de calcul est trop petit,
- Soit l'interaction des ondes de pression émises par l'explosion avec les limites du domaine de calcul impacte le résultat. Des ondes peuvent en effet être réfléchies par les conditions limites de sortie ou la pression peut augmenter dans le domaine de calcul si l'évacuation correcte des ondes n'est pas assurée. Des méthodologies ont été proposées afin de permettre cet effet⁶⁸.

BP5	Dans le cas d'une explosion en milieu non confiné, les conditions aux limites de sortie doivent être suffisamment éloignées de la zone de champ proche pour éviter toute interaction entre la flamme et celles-ci
BP6	Dans le cas d'une explosion en milieu non confiné, les conditions aux limites de sortie doivent permettre une évacuation correcte des ondes de surpression ou être situées suffisamment loin pour qu'il n'y ait pas interaction entre les ondes de surpression et les conditions aux limites durant le temps physique simulé

Il est également possible qu'une prédiction des effets de l'explosion implique une modélisation correcte de l'interaction entre l'écoulement généré par la flamme ou par le scénario de rejet de produit inflammable et une paroi environnante (mur, plafond, surface latérale d'un ou plusieurs obstacles). La circulation du fluide à vitesse relativement élevée sur la paroi est susceptible de conduire au développement d'une couche limite turbulente. Celle-ci comporte plusieurs sous-couches, depuis la paroi : la sous-couche visqueuse, la sous-couche de transition et la sous-couche complètement turbulente en loi logarithmique. La valeur du paramètre y^+ , fonction de la distance à la paroi et des contraintes locales, permet d'identifier la position de la première maille dans la couche limite.

⁶⁸ Poinso Lele : Boundary Conditions for Direct Simulations of Compressible Viscous Flows, 1992, Journal of Computational Physics, p.41

Dans le cas d'une résolution par le maillage de parois, il convient d'utiliser au niveau de celles-ci une condition limite adaptée ainsi qu'un couple condition limite de paroi / modèle de turbulence adapté. Un aspect propre aux simulations d'explosion est que la valeur du paramètre y^+ évolue au cours du calcul étant donné que la flamme se déplace et accélère.

Les différentes notions associées à la génération d'un maillage sont décrites en annexe 1. La notion de maillage est une part importante de la modélisation et nécessite à ce titre plusieurs préconisations et notamment la bonne pratique suivante.

Afin de garantir la qualité du calcul, des critères généraux de construction du maillage sont proposés.

BP7	Sauf justification, la raison géométrique utilisée pour la variation de la taille des mailles dans la zone de champ proche devra être inférieure ou égale à 1,2. Les justifications pouvant permettre de s'affranchir de cette BP pourront s'appuyer sur l'étude de convergence en maillage.
BP8	Sauf justification, le facteur de forme des cellules en champ proche devra être de 1. Les justifications pouvant permettre de s'affranchir de cette BP devront s'appuyer sur les caractéristiques du schéma numérique utilisé.

Notons toutefois qu'il sera difficile de conserver des mailles de facteur de forme unitaire en proximité des obstacles si ceux-ci sont résolus explicitement par le maillage.

Il est envisageable que les contraintes en maillage liées à la propagation des ondes de pression en champ lointain, particulièrement sur le facteur de forme et la raison géométrique, sont moins drastiques. Il reste néanmoins à l'utilisateur à démontrer que la méthode numérique adoptée rende bien compte de la décroissance des ondes de surpression à distance.

BP9	<u>Dans le cas où l'approche CFD est utilisée pour résoudre la propagation des ondes de pression en champ lointain, l'outil de calcul doit être en mesure de retrouver une décroissance du pic de surpression en accord avec la théorie jusqu'au seuil de surpression recherché (200, 140, 50 ou 20 mbar)</u>
------------	--

Par ailleurs, une étude de sensibilité doit être réalisée afin de s'assurer que la dépendance des résultats de calcul au choix du maillage reste limitée. La BP suivante est ainsi proposée.

BP10	Une étude de sensibilité au maillage doit être réalisée. Celle-ci implique de réaliser deux calculs complémentaires au calcul de référence, le premier avec une taille de maille inférieure à la taille de référence (facteur multiplicateur entre 0,5 et 0,9) et le second en utilisant une taille de maille supérieure à la taille de référence (facteur multiplicateur entre 1,1 et 1,5). Les niveaux de surpression doivent rester dans une gamme - 30 % / + 30 % par rapport au résultat de référence.
-------------	--

6.2 Schémas numériques

Ces schémas ont pour objet de transformer les gradients continus en différences discrètes en s'appuyant sur les développements de Taylor. Ces développements sont utilisés de manière tronquée, générant une erreur numérique, le niveau de troncature donnant l'ordre du schéma.

Plus l'ordre est élevé, moins le schéma est diffusif, la diffusion numérique liée au schéma créant un phénomène artificiel purement numérique favorisant le mélange. Il convient ainsi d'utiliser des schémas permettant de minimiser ce phénomène de diffusion numérique. Si les schémas d'ordre 1 sont inconditionnellement stables, ce qui n'est pas le cas des schémas d'ordre supérieurs, ils induisent en revanche un niveau de diffusion numérique ne permettant pas d'assurer une modélisation correcte des phénomènes physiques. De tels schémas peuvent être utilisés en première approche, les temps de calcul étant plus faibles, avant d'affiner les modélisations avec des schémas d'ordre supérieur.

En résumé, il ressort la bonne pratique suivante :

BP11	Utilisation de schémas numériques d'ordre 2 ou supérieur en espace
-------------	---

Les schémas d'ordre strictement supérieur à 1 nécessitent l'utilisation d'outils numériques, appelés limiteurs de flux, permettant de limiter les gradients afin d'assurer leur stabilité. Il conviendra de s'assurer que ces limiteurs ne dégradent pas de manière abusive l'ordre du schéma comme c'est le cas des limiteurs les plus simples. L'ordre effectif du schéma pourra être retrouvé au moyen des méthodes usuelles⁶⁹.

6.3 Convergence

La modélisation CFD vise à résoudre numériquement un jeu d'équations physiques. La notion de convergence rend compte du fait que la solution fournie par cette modélisation approche effectivement, à une erreur près restant limitée, la solution réelle de ce système.

Des problèmes de méthodes numériques peuvent limiter la convergence du calcul. De manière analogue au projet européen SUSANA dont l'une des composantes visait à proposer des bonnes pratiques pour la modélisation CFD des phénomènes dangereux impliquant l'hydrogène⁷⁰, il est proposé d'étudier la bonne convergence du calcul par l'étude de la conservation de la masse au sein du domaine de calcul.

BP12	L'utilisateur démontrera la propriété de conservation de la masse au fil du temps par son outil de calcul pour son calcul d'application
-------------	--

⁶⁹ Celik, I., "Procedure for estimation and reporting of discretization error in CFD applications", Journal of Fluids Engineering

⁷⁰ SUSANA project – Project Deliverable 3.2 - Guide to best practice in numerical simulations

7 Validité des modèles

Il apparaît que la phénoménologie de l'explosion industrielle est complexe car impliquant une physique très dynamique et à de nombreuses échelles. Par ailleurs, les choix de modèles physiques (turbulence et combustion turbulente) demeurent nombreux et que le traitement numérique de l'explosion (domaine de calcul, conditions limites, schémas numériques, maillage ...) laisse également une liberté de choix à l'utilisateur.

Il est donc crucial en amont de tout calcul d'application de confronter une démarche de calcul complète correspondant à des choix de modèles physique et numériques à une expérience suffisamment documentée afin de démontrer son caractère prédictif.

Plusieurs difficultés peuvent néanmoins survenir dans la réalisation de cet exercice. Il convient en premier lieu à l'utilisateur d'identifier les caractéristiques de l'explosion et les principaux facteurs dans son cas d'application responsables de l'accélération de flamme et des effets de pression. On peut penser aux cas suivants :

- Explosion non confinée, avec effets :
 - Du produit inflammable au sein du nuage : hydrocarbure ou hydrogène ou autre ou mélange de produits ou effet d'un inerte.
 - Du type de nuage : nuage plat ou compact.
 - De la distribution du produit inflammable au sein du nuage : homogène ou hétérogène.
 - De l'encombrement interne au nuage : pas d'obstacles ou peu influents sur la dynamique de flamme, obstacles de taille caractéristique comparable et régulièrement espacés (tuyauteries par exemple) ou obstacles avec distribution en taille et en espace complexe.
 - Du fait que le nuage comporte/ne comporte pas des zones confinées.
 - D'une turbulence initiale dont l'effet est important sur l'explosion (turbulence de jet, turbulence atmosphérique).
 - Des longueurs de propagation de flamme depuis le point d'inflammation,
 - ...
- Explosion confinée, avec effets :
 - Du produit inflammable au sein du nuage : hydrocarbure ou hydrogène ou autre ou mélange de produits ou effet d'un inerte.
 - Du remplissage du local en nuage inflammable : total ou partiel.
 - De la distribution du produit inflammable au sein du nuage : homogène ou hétérogène.
 - De l'encombrement interne au nuage : pas d'obstacles ou peu influents sur la dynamique de flamme, obstacles de taille caractéristique comparable et régulièrement espacés (tuyauteries par exemple) ou obstacles avec distribution en taille et en espace complexe.
 - Du local comportant des surfaces soufflables : un événement ou plusieurs événements (localisé au même endroit ou distribués) ou plusieurs types de surfaces fragiles (portes, fenêtres, ...).
 - De la turbulence initiale dont l'effet est important sur l'explosion (turbulence de jet ...).
 - Des longueurs de propagation de flamme depuis le point d'inflammation.
 - ...

Idéalement, l'utilisateur devrait montrer avec une expérience présentant de nombreux points communs (phénomènes prépondérants responsables de l'accélération de flamme et échelle analogues) avec son cas d'application. En réalité, de tels cas sont rarement identifiables dans la littérature, pour plusieurs raisons :

- Les expériences sont en général réalisées afin d'investiguer un effet physique particulier (par exemple : explosion dans un jet ou explosion dans un module d'obstacles).
- Il reste incertain que tous les choix opérés par les expérimentateurs (par exemple : le type et l'arrangement spatial des obstacles au sein du nuage inflammable) au moment de la réalisation de la campagne d'essais coïncident avec les besoins de l'utilisateur au moment de la réalisation de son calcul.
- Les expériences d'échelle industrielle sont relativement rares car relativement coûteuses au regard des expériences de laboratoire ou d'échelle métrique.
- Toutes les campagnes expérimentales ne sont pas nécessairement documentées dans les « sources ouvertes ».

L'utilisateur doit donc identifier les expériences permettant de rendre compte : des phénomènes prépondérants sur l'accélération de flamme et confronter à celles-ci sa démarche de modélisation.

Il doit ensuite réaliser le travail de validation proprement dit en confrontant sa démarche de modélisation à ces expériences.

L'utilisateur doit ensuite réaliser son calcul d'application de référence en reprenant en intégralité sa démarche de modélisation. A défaut, si par exemple un passage à l'échelle réelle implique un choix de maillage moins fin que celui exploité dans le cadre de l'exercice de validation, alors l'utilisateur devra justifier en quoi ce changement est non impactant sur les capacités de prédiction de sa démarche de calcul.

BP13	L'utilisateur doit identifier et décrire les phénomènes prépondérants responsables de l'accélération de flamme au niveau de son cas d'application et présenter les cas de validation représentatifs de ceux-ci, qu'il aura traités en amont du cas d'application. Des cas de comparaison exemples sont cités en annexe 2 du présent document
BP14	Le cas d'application devra être modélisé par l'utilisateur avec la même démarche de modélisation c'est-à-dire les mêmes méthodes numériques (maillage et schémas numériques) et les mêmes modèles de turbulence et de combustion turbulente que ceux mis en œuvre pour calculer les cas de validation

8 Conclusions

Le contexte réglementaire impose aujourd'hui de dimensionner aussi précisément que possible les zones de dangers autour des installations industrielles et ce, pour tous types de phénomènes dangereux, incendie, explosion et dispersion de produits toxiques. Dans le cas particulier des phénomènes d'explosion de nuages de gaz, ces zones d'effet sont généralement évaluées au moyen d'outils intégraux ou phénoménologiques.

L'approche CFD est susceptible d'apporter un calcul plus précis des effets, compte-tenu du fait qu'elle intègre intrinsèquement les spécificités géométriques de l'explosion (forme de nuage, obstacles, bâtiments et autres singularités au sein du nuage inflammable et au-delà).

Il convient toutefois de souligner que ces approches nécessitent à la fois des méthodes numériques précises mais également la paramétrisation de sous modèles physiques essentiels comme la représentation des phénomènes turbulents et des divers modes d'accélération du front de flamme.

Le présent document propose un ensemble de bonnes pratiques à mettre en œuvre pour reproduire de manière satisfaisante les explosions en situation accidentelle. Celles-ci sont réparties en 5 grands thèmes :

- la définition de la solution initiale ;
- les choix relatifs à la construction du maillage ;
- l'utilisation de conditions aux limites adaptées ;
- l'utilisation de modèles physiques adaptés ;
- la validation de l'approche utilisée.

Il convient toutefois de rappeler que, quelle que soit l'approche utilisée, des écarts sont toujours possibles entre les résultats des outils au regard de l'incertitude entourant la modélisation. A ce titre, la validation des outils de modélisation utilisés, quelle que soit l'approche, reste le point essentiel pour l'évaluation de distances de sécurité.

9 Annexes

Liste des annexes :

- Annexe 1 : Discrétisation, notions de maillage
- Annexe 2 : Guide de constitution du dossier de validation à destination des utilisateurs et concepteurs d'outils
- Annexe 3 : Bonnes pratiques

Annexe 1 : Discrétisation, notions de maillage

Le maillage est la discrétisation de l'espace dans lequel le calcul doit être réalisé (domaine de calcul) en un nombre fini de volumes, les mailles. Le système d'EDP de Navier-Stokes est discrétisé et intégré sur ces mailles pendant un pas de temps. Les variables simulées sont supposées uniformes dans une maille au cours d'un pas de temps. Ainsi, la précision avec laquelle le modèle représentera les équations mathématiques dépend de la taille de ces éléments discrets. Il existe une forte relation entre le modèle de turbulence utilisé et la finesse du maillage. Ainsi, une approche de type DNS nécessite une discrétisation du domaine en des mailles de la taille de l'échelle de Kolmogorov. Une approche de type RANS permet l'utilisation d'un maillage plus large, sous réserve d'une indépendance des résultats au maillage. Il convient de la même manière de garder à l'esprit que le coût en temps de calcul et d'espace mémoire, augmente avec le nombre de mailles et peut devenir prohibitif. Le temps CPU nécessaire est approximativement proportionnel au carré du nombre total de mailles. Le maillage est donc un paramètre important du calcul pour un bon compromis entre la précision du calcul et le temps de calcul. Les capacités des machines de calcul, donc en termes de nombre de mailles, doivent ainsi guider le choix du modèle de turbulence.

Il existe de nombreuses possibilités de discrétisation du domaine. Chacune ayant présentant avantages et inconvénients. L'objet est ici de proposer une brève description de ces différentes solutions afin de guider l'utilisateur dans ses choix.

La discrétisation de l'espace peut se concevoir de deux manières différentes :

- par un ensemble ordonné d'éléments, les maillages structurés,
- par un ensemble arbitraire d'éléments, les maillages non-structurés.

La discrétisation spatiale utilise comme brique élémentaire soit des hexaèdres, soit des tétraèdres. Si les maillages structurés sont nécessairement réalisés au moyen d'hexaèdres, les maillages non structurés peuvent être composés de l'un ou l'autre de ces types d'éléments.

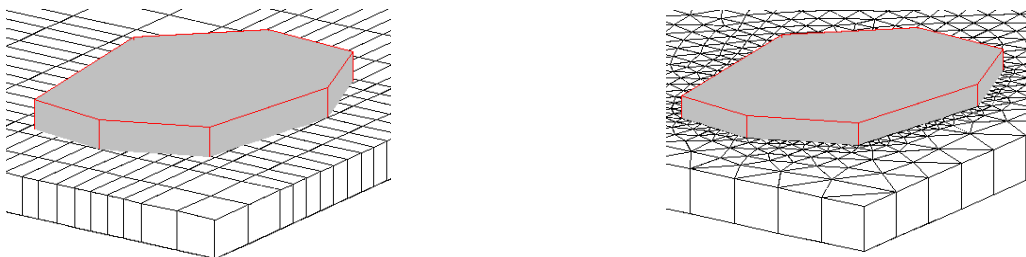


Figure 9 : Exemple de maillages structuré et non-structuré

Ces éléments peuvent être tous identiques, c'est la notion de maillage uniforme, mais il est possible de raffiner localement le maillage afin de capturer plus précisément les phénomènes physiques dans la zone d'intérêt, Figure 10.

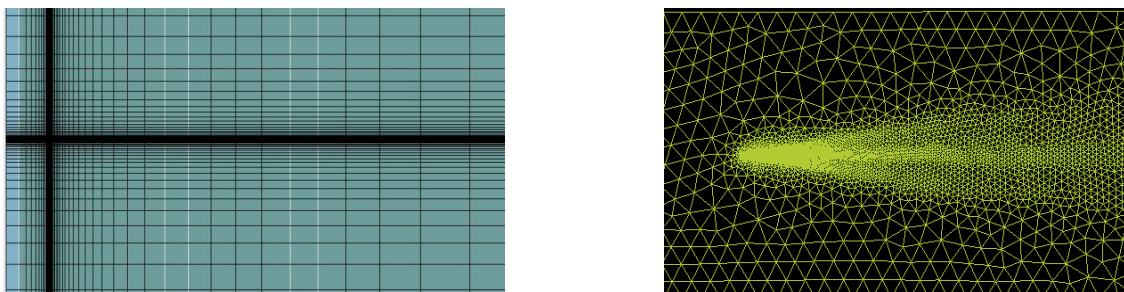


Figure 10 : Deux exemples de maillages raffinés (plan de mailles au sol)

Dans certains cas, le domaine peut être subdivisé en domaines plus petits possédant chacun son maillage propre. On parle alors de maillages imbriqués. La Figure 11 présente un exemple.

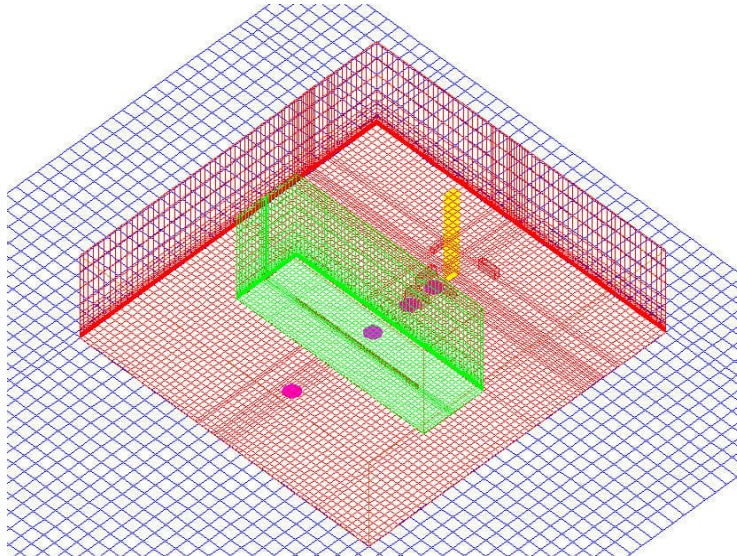


Figure 11 : Exemple de maillages imbriqués

Les facteurs qui prévalent dans le choix du type de maillage (structuré ou non-structuré) sont notamment :

- La nécessité de suivre exactement les contours d'une géométrie complexe ou d'obstacles.
- Une économie souhaitée dans le nombre total de mailles décrivant le domaine de calcul.

La résolution peut être définie comme le nombre de mailles dédiées à la description des phénomènes physiques. Il convient ainsi de distinguer la capture des phénomènes intrinsèques à l'écoulement, tels que discuté précédemment pour les différentes approches de la turbulence des éléments géométriques.

Le premier jet du maillage est souvent fait avec un nombre important de mailles. Le nombre de mailles doit être cohérent avec les dimensions du domaine et sa complexité afin que le maillage ne soit ni trop lâche ni trop fin. Ce critère est retenu à la fois par rapport aux dimensions du domaine (horizontal et vertical) ainsi que sur examen des éléments présents à l'intérieur de celui-ci (éléments/obstacles 3 D, courbes d'altitudes...).

Afin de considérer les éléments volumiques présents dans le domaine, ces derniers doivent avant tout être traversés par des lignes de mailles. Une première vérification se fait visuellement et par l'expérience de l'utilisateur. Le principe est d'évaluer d'après la taille et la forme de l'objet s'il y a suffisamment de mailles pour le décrire.

L'utilisation de maillages incorrects peut générer plusieurs types de problèmes dont un lissage des gradients élevés des champs dynamiques.

1. Lissage

Le lissage est le rapport de taille entre deux mailles adjacentes. Une valeur importante entraînera un maillage très peu uniforme et une mauvaise estimation des gradients. La précision du résultat augmente avec la diminution du rapport (lissage plus important). Cependant, il est également important de capturer les petits éléments et la taille nécessaire pour cette capture est en général inapplicable à l'ensemble du domaine en raison de la taille du maillage complet. De ce fait, des maillages raffinés sont souvent nécessaires, générant une non-uniformité.

Ce facteur de lissage est également important pour les domaines imbriqués, le nombre des mailles en bordure du domaine imbriqué ne devant pas être plus du double ou éventuellement du triple des mailles dans le domaine l'englobant.

2. Dissymétrie

Le facteur de dissymétrie décrit le degré de déformation d'une cellule. Plus ce degré est important et plus des problèmes de convergence peuvent émerger. Les formes de références entraînant le meilleur facteur de dissymétrie sont le triangle équilatéral et le carré.

3. Facteur de forme

Le facteur de forme est le rapport entre la plus petite et la plus grande dimension d'une maille. Un rapport important ne peut être toléré que si l'écoulement est aligné avec la dimension la plus importante de l'élément.

4. Vérification du maillage

La plupart des maillages intégrés dans les logiciels CFD respectent de façon inhérente certains critères de lissage, de dissymétrie et de facteur de forme. L'utilisateur doit cependant garder ces règles en tête s'il opère des modifications manuelles du maillage comme le proposent certains outils.

Les premières étapes de calcul permettent également de vérifier que le maillage permet une convergence correcte ou non. Les critères de convergence numériques type nombre de Courant (CFL) liant pas de temps et taille de maille et qui définissent la résolution des équations sont non respectés si le maillage ne respecte pas certaines règles d'uniformité. Ceci peut engendrer une divergence du calcul. La convergence du calcul sur les premiers pas de temps permet de vérifier donc indirectement le maillage réalisé.

En conclusion le principe de validation du maillage est basé sur un processus itératif de contrôle. A chaque étape de modélisation, le maillage est remis en cause et modifié si besoin.

BP7	La raison géométrique utilisée pour la variation de la taille des mailles dans la zone de champ proche devra être inférieure à 1,2
BP8	Sauf justification, le facteur de forme des cellules en champ proche devra être de 1. Les justifications pouvant permettre de s'affranchir de cette BP pourront s'appuyer sur les caractéristiques du schéma numérique utilisé, la typologie particulière du cas d'explosion ou des éléments issus d'une phase de validation.

Annexe 2
Guide de constitution du dossier de validation à destination des utilisateurs et concepteurs d'outils

Cette annexe décrit la stratégie de validation qui doit être présentée pour l'outil ou les outils utilisés. Pour rappel, cette validation doit être réalisée par l'utilisateur de l'outil, non par le développeur.

Il convient dans un premier temps que l'utilisateur soit en mesure d'identifier les caractéristiques principales de la situation d'explosion à calculer. On entend ici les spécificités physiques susceptibles d'impacter de manière prépondérante la dynamique de flamme et par suite les effets de surpression. Celles-ci peuvent-être par exemple :

- La force de la source d'inflammation.
- Le fait que l'explosion soit confinée ou non.
- La pré-existence ou non d'une turbulence résiduelle dans le nuage inflammable.
- La présence d'obstacles ou non dans le nuage inflammable.
- L'éventuelle transmission de l'explosion (la flamme est initialement dans un espace confiné, brûlé les gaz frais dans cet espace et se propage vers un autre local dans lequel existe également un nuage inflammable).
- Les spécificités du mélange. Les flammes à l'hydrogène peuvent présenter des spécificités du fait de la diffusivité préférentielle de la molécule hydrogène. Il est également possible d'avoir à considérer un mélange produit inflammable / air auquel est adjoint dans une certaine proportion un produit inerte (eau, azote).
- L'effet de mesures de mitigation : injection de produits retardant la flamme, action d'un événement, ...
- L'échelle de la configuration. L'effet de la distance de propagation de flamme caractéristique de l'expérience ciblée doit être testée, surtout si celle-ci est de quelques dizaines ou centaine de mètres.

Une fois ce travail de découpage réalisé, il convient d'identifier dans la littérature des expériences suffisamment instrumentées et mettant en avant de manière particulière tel ou tel effet physique. Idéalement ces expériences doivent mesurer un historique de vitesse de flamme ainsi qu'un champ de surpression discrétisé.

Le contexte de modélisation étant l'explosion industrielle, il conviendra de prioriser un calcul de validation mettant en avant la capacité de la démarche de modélisation à rendre compte d'une explosion à la même échelle que celle du calcul cible.

La capacité de la démarche de modélisation à intégrer les effets physiques aggravant les effets de l'explosion considérée doit également être testée et validée.

Des exemples de cas de validation pouvant être utilisés sont listés ci-dessous :

- **Cas d'une explosion dans un jet d'hydrogène en champ libre dont le débit est de quelques centaines de g/s⁷¹.** Spécificités : turbulence initiale, gradient de richesse, nuage hydrogène/air.
- **Cas d'une explosion dans un nuage hémisphérique d'hydrogène au repos et homogène en richesse, initialement bâché de 10 m de rayon⁷².** Spécificités : nuage hydrogène/air, homogène, moyenne échelle.
- **Cas d'un jet d'hydrogène impactant un module de 3 m x 1 m x 0,5 m comprenant un ensemble de tube de 2 cm régulièrement espacés⁷³.**
 - Spécificités : turbulence initiale, gradient de richesse, nuage hydrogène/air, interaction flamme/obstacles.
- **Cas d'une propagation de flamme d'une enceinte de 4 m³ vers un nuage externe d'environ 50 m³.** Le nuage inflammable est composé d'un mélange propane/air.
- Spécificités : effet de confinement, transmission d'explosion.
- **Cas d'une explosion dans un jet de méthane dont le débit est de 100 kg/s en champ libre ou dans une zone obstruée⁷⁴.** Les dimensions de cette zone sont 10 m x 2,5 m x 5 m. Deux configurations sont possibles : elle est composée de tubes de 76 mm ou de 168 mm de diamètre.

Spécificités : grande échelle, turbulence initiale, interaction flamme/obstacles.

Certains projets tels le projet SUSANA75 proposent une mise à disposition au public d'un ensemble de cas de validation. Dans le cas du projet SUSANA, ces cas impliquent uniquement l'hydrogène comme produit inflammable.

⁷¹ J. Daubech et al. (2014) Un-ignited and ignited high pressure hydrogen releases: concentration - turbulence mapping and overpressure effects. (X ISHPMIE) Bergen, Norway. pp.93-104.

⁷² V. Molkov et al. (2006) LES modelling of an unconfined large-scale hydrogen-air deflagration. J. Phys. D: Appl. Phys. 39 (2006) 4366-4376

⁷³ E. Vyazmina et al. (2014) Delayed explosion of hydrogen high pressure jets in a highly obstructed geometry. ICHS 2017

⁷⁴ H. Hiskens (2021) Assessing the influence of real releases on explosions: Selected results from large-scale experiments. J. Loss Prev. 72

⁷⁵ D. Baraldi et al. (2017) Development of a model evaluation protocol for CFD analysis of hydrogen safety issues the SUSANA project. J. Loss Prev. 42(11)

Annexe 3 : Bonnes pratiques

Cette annexe constitue un guide de lecture critique de la démonstration de la mise en œuvre des BP. Pour chacune des BP rappelées dans le tableau ci-dessous, la démonstration attendue est décrite.

Intitulé de la BP	Définition synthétique de la BP
Choix de la solution initiale	
BP-Solution initiale	BP-1 L'utilisateur présentera de manière détaillée le terme source associé au scénario traité ainsi que l'environnement dans lequel le nuage inflammable est susceptible de se former. Il présentera également son mode de calcul du nuage inflammable. Si celui-ci est de type CFD et en milieu non confiné, alors il devra se conformer au guide de bonnes pratiques « Dispersion »⁷⁶. Il justifiera à l'aide de ces éléments le caractère enveloppe du cas ou des cas d'explosion qu'il calculera. Il sera ainsi question des caractéristiques du nuage inflammable (dimensions, turbulence initiale, localisation, distribution homogène ou non du produit), localisation du ou des points d'inflammation.
Démonstration attendue	<i>L'utilisateur décrira en amont de tout calcul en quoi la solution initiale adoptée (nuage au repos en proportions stœchiométriques par exemple) couvre ou reproduit les effets d'une inflammation d'un nuage réel et en quoi le choix du point d'inflammation retenu est susceptible de conduire aux effets de pression enveloppes.</i> <i>A défaut une étude exhaustive des possibilités de nuages inflammables et de points d'inflammation doit être menée.</i>
BP-Effets de confinement	BP-2 Dans le cas d'une explosion en milieu confiné, l'utilisateur décrira les éléments « soufflables » identifiés et les caractérisera (surface, pression de rupture, masse surfacique).
Démonstration attendue	<i>L'utilisateur devra décrire les éléments réels ainsi que la modélisation qu'il en fait. Les effets induits (pas de prise en compte d'un événement alors qu'un événement est présent en réalité par exemple) devront être décrits.</i>
Construction du maillage	
BP-Sensibilité au maillage	BP-10 Une étude de sensibilité au maillage doit être réalisée. Celle-ci implique de réaliser deux calculs complémentaires au calcul de référence, le premier avec une taille de maille inférieure à la taille de référence (facteur multiplicateur entre 0,5 et 0,9) et le second en utilisant une taille de maille supérieure à la taille de référence (facteur multiplicateur entre 1,1 et 1,5). Les niveaux de surpression doivent rester dans une gamme - 30 % / + 30 % par rapport au résultat de référence.
Démonstration attendue	<i>L'utilisateur doit clairement mettre en avant qu'en plus de son calcul de référence, 2 autres maillages ont été testés pour son calcul. Ceux-ci doivent satisfaire aux critères ci-dessus.</i>
BP-LES	BP-4 Lors de la réalisation d'une simulation de type LES, il doit être vérifié que les mailles localisées dans la zone de propagation de flamme ont une taille caractéristique inscrite dans la zone inertielle du spectre turbulent.
Démonstration attendue	<i>L'utilisateur prouvera que cette BP est bien appliquée en quantifiant les échelles de Kolmogorov et intégrale aux instants clés de la propagation de flamme.</i>
BP-Facteur-de-forme	BP-8 Sauf justification, le facteur de forme des cellules en champ proche devra être de 1. Les justifications pouvant permettre de s'affranchir de cette BP pourront s'appuyer sur les caractéristiques du schéma numérique utilisé, la typologie particulière du cas d'explosion ou des éléments issus d'une phase de validation.

⁷⁶ J.-M. Lacomme et B. Truchot (2016) Guide de Bonnes Pratiques pour la réalisation de modélisations 3D pour des scénarios de dispersion atmosphérique en situation accidentelle. Rapport de synthèse des travaux du Groupe de Travail national. DRA-15-148997-06852A. Téléchargeable sur www.ineris.fr

Intitulé de la BP	Définition synthétique de la BP
Démonstration attendue	<i>L'utilisateur attestera d'un facteur de forme de 1 pour les mailles situées dans la zone de propagation de flamme, captures d'écran du maillage à l'appui. S'il souhaite déroger à cette règle il devra démontrer l'absence d'influence sur un cas simplifié ; apporter une justification théorique de ce choix</i>
BP-Evolution-maillage	BP-7 Sauf justification, la raison géométrique utilisée pour la variation de la taille des mailles dans la zone de champ proche devra être inférieure ou égale à 1,2. Les justifications pouvant permettre de s'affranchir de cette BP pourront s'appuyer sur l'étude de convergence en maillage.
Démonstration attendue	<i>L'utilisateur présentera des vues caractéristiques du maillage permettant de juger le respect de cette bonne pratique. S'il souhaite déroger à cette règle il devra apporter une justification théorique de ce choix.</i>
BP-Schéma-numérique	BP11 - Utilisation de schémas numériques d'ordre 2 ou supérieur en espace
Démonstration attendue	<i>L'utilisateur attestera de l'utilisation de schémas numériques de discrétisation spatiale d'ordre 2. S'il souhaite déroger à cette règle il devra apporter une justification théorique</i>
BP-Modélisation des ondes en champ lointain	BP9 - Dans le cas où l'approche CFD est utilisée pour résoudre la propagation des ondes de pression en champ lointain, l'outil de calcul doit être en mesure de retrouver une décroissance du pic de surpression en accord avec la théorie jusqu'au seuil de surpression recherché (200, 140, 50 ou 20 mbar)
Démonstration attendue	<i>Si l'utilisateur exploite une approche CFD pour rendre compte des effets de surpression en champ lointain, il doit montrer que la décroissance de de surpression est de la forme $1 / R$ (avec R la distance à la source de pression) pour les seuils compris entre 200 et 20 mbar. Les niveaux de surpression doivent rester dans une gamme - 30 % / + 30 % par rapport à cette décroissance théorique.</i>
BP-Conservation-Masse	BP-12 L'utilisateur démontrera la propriété de conservation de la masse au fil du temps par son outil de calcul pour son calcul d'application
Démonstration attendue	<i>L'utilisateur réalisera un bilan de masse, par exemple sur la masse de carbone ou d'hydrogène contenu dans le domaine de calcul.</i>
Utilisation de conditions aux limites adaptées	
BP-Eloignement-CL	BP-5 Dans le cas d'une explosion en milieu non confiné, les conditions aux limites de sortie doivent être suffisamment éloignées de la zone de champ proche pour éviter toute interaction entre la flamme et celles-ci
Démonstration attendue	<i>L'utilisateur attestera, captures d'écran à l'appui, que la la flamme en fin de combustion n'atteint pas la condition limite de sortie la plus proche de celle-ci.</i>
BP-Nature des CL	BP-6 Dans le cas d'une explosion en milieu non confiné, les conditions aux limites de sortie doivent permettre une évacuation correcte des ondes de surpression ou être situées suffisamment loin pour qu'il n'y ait pas interaction entre les ondes de surpression et les conditions aux limites durant le temps physique simulé
Démonstration attendue	<i>L'utilisateur attestera, captures d'écran à l'appui et pour plusieurs instants, l'absence de réflexion d'onde au niveau des conditions limites de sortie du domaine de calcul ou prouvera que les réflexions éventuelles n'impactent pas les résultats du calcul sur le temps physique couvert par celui-ci.</i>
Utilisation de modèles physiques adaptés	
BP-TDD	BP-3 L'approche mise en œuvre par l'utilisateur doit pouvoir modéliser une éventuelle TDD. A défaut, il convient que l'utilisateur propose des éléments d'analyse permettant d'exclure toute occurrence de TDD dans le cas traité

Intitulé de la BP	Définition synthétique de la BP
Démonstration attendue	<i>L'approche mise en œuvre par l'utilisateur doit pouvoir modéliser une éventuelle TDD. A défaut, il convient que l'utilisateur propose des éléments d'analyse permettant d'exclure toute occurrence de TDD dans le cas traité. Pour ce faire, l'utilisateur peut utiliser différents critères de détection de conditions favorisant une TDD, comme par exemple, une vitesse de flamme supérieure ou égale à 500 m/s ou un gradient local de pression (dp/dx) supérieur à 0,5.</i>
Validation	
BP-Validation	BP-13 L'utilisateur doit identifier et décrire les phénomènes prépondérants responsable de l'accélération de flamme au niveau de son cas d'application et présenter les cas de validation représentatifs de ceux-ci, qu'il aura traités en amont du cas d'application. Des cas de comparaison exemples sont cités en annexe 2 du présent document
Démonstration attendue	<i>L'utilisateur fournira un dossier de validation réalisé par ses soins et non par l'éditeur du logiciel dans lequel il présentera les résultats obtenus pour des cas de validation représentatifs du cas traité. L'utilisateur décrira la phénoménologie du cas d'intérêt et détaillera en quoi les cas de validation sont pertinents.</i>
BP-Conservation de la démarche de validation	BP-14 Le cas d'application devra être modélisé par l'utilisateur avec la même démarche de modélisation c'est-à-dire les mêmes méthodes numériques (maillage et schémas numériques) et les mêmes modèles de turbulence et de combustion turbulente que ceux mis en œuvre pour calculer les cas de validation
Démonstration attendue	<i>L'utilisateur démontrera que sa démarche de calcul pour le cas d'étude est analogue à celle mise en œuvre pour les cas de validation. Si l'un des paramètres de calcul est modifié, par exemple la taille de maille, l'utilisateur devra démontrer que l'effet de ce changement sur le résultat reste limité.</i>

