

Effet du confinement sur le développement d'un panache léger turbulent au sein d'une cavité munie de deux événements

Y. WANG^a, A. SERGENT^b, G. BERNARD-MICHEL^c, P. LE QUERE^d et
E. SAIKALI^e

a. Laboratoire d'Informatique pour la Mécanique et les Sciences de l'Ingénieur, Orsay (LIMSI) – CNRS UPR3251, DEN/DANS/DM2S/STMF/LIEFT – Commissariat à l'Energie Atomique et aux Energies Alternatives (CEA) - Saclay yanshu.wang@cea.fr

b. LIMSI - CNRS, Orsay, UFR Ingénierie – Sorbonne Université UPMC Paris anne.sergent@limsi.fr

c. DEN/DANS/DM2S/STMF/LIEFT – CEA - Saclay gilles.bernard-michel@cea.fr

d. LIMSI - CNRS, Orsay, plq@limsi.fr

e. DEN/DANS/DM2S/STMF/LIEFT – CEA - Saclay elie.saikali@cea.fr

Résumé

Un panache forcé d'un mélange hélium - air se développant dans une cavité avec deux événements est modélisé numériquement par simulations numériques directes. La configuration géométrique est choisie de façon à ce qu'une distribution bi-couche du mélange hélium - air se forme dans la cavité, ce qui est une hypothèse couramment posée dans les modèles industriels théoriques. Nous réalisons une série de calcul pour différentes sections horizontales afin d'identifier une géométrie minimale pour laquelle le panache d'hélium et la couche de mélange homogène se situant en partie haute de la cavité ne sont pas influencés par les parois latérales. Les résultats sont analysés en terme de structure d'écoulements et de distribution d'hélium dans la cavité, mais aussi de débits massiques d'air neuf et d'hélium traversant les événements, ceux-ci n'étant pas imposés comme condition limite. Ceux-ci sont ensuite comparés aux modèles de ventilation développés par Linden et al. [1990].

Abstract

We present numerical results from direct numerical simulations (DNS) of an air-helium buoyant jet in a two-vented cavity. Geometrical configuration of the cavity is chosen to ensure establishment of a bi-layer distribution of the helium - air mixture, which is commonly assumed in relevant industrial models. A series of computations with different horizontal sizes of cavity is performed to determine the optimal cavity dimensions, for which the helium - air buoyant jet and the top mixture layer are not influenced by the end walls. Results are analysed in terms of flow structure and helium concentration distribution, but also of inlet mass flux of fresh air and of helium outlet flux, as fluxes are kept free through the vents. Comparison with the ventilation models proposed by [Linden et al., 1990] is drawn.

Mots clefs : panache ; mélange ; turbulence ; risque hydrogène ; écoulement semi-ouvert

Introduction

L'hydrogène est considéré comme l'une des solutions vertes et alternatives au réchauffement climatique, grâce au potentiel de réduction d'émission de CO₂ qu'elle représente. Dans des situations accidentelles, l'hydrogène s'échappe sous la forme d'un panache forcé qui entraîne l'air ambiant et, potentiellement génère un mélange inflammable dangereux [Cariteau and Tkatschenko, 2012].

Des modèles prédictifs ont été développés pour évaluer son utilisation potentielle dans des configurations spécifiques telles que des enceintes fortement confinées. Des modèles macroscopiques comme ceux proposés par Linden et al. [1990], Linden [1999] à partir du modèle de panache turbulent de Morton et al. [1956] sont utilisés pour prédire la distribution d'hydrogène dans les cavités ventilées. Ils reposent sur l'hypothèse de la formation d'une stratification de type bi-couche dans la cavité avec une accumulation de gaz léger dans la partie supérieure de la cavité formant une couche où le mélange est homogène. De plus, la détermination du coefficient d'entraînement α , qui est censé être constant dans le modèle de [Morton et al., 1956], joue un rôle important dans l'estimation de la concentration d'hydrogène en partie haute.

Dans des travaux récents, deux approches complémentaires ont été utilisées pour aborder le problème physique d'une fuite de gaz léger (ici de l'hélium He) dans une cavité à deux événements [Saikali et al., 2019, Bernard-Michel et al., 2019]. Un bon accord a été obtenu concernant la structure de l'écoulement et du champ de vitesse. Cependant, il a été démontré, grâce aux données numériques, que la configuration considérée ne conduit pas à la mise en place d'une distribution bi-couche du mélange air-hélium, pourtant à la base de la théorie de Linden et al. [1990] qui devient ainsi inadaptée.

Ces résultats préliminaires suggèrent que les effets du confinement modifient l'organisation générale de l'écoulement, ce qui peut entraîner localement une augmentation importante de la concentration d'hydrogène (ou He). Nous cherchons ici à aborder la question du confinement d'un panache forcé d'hélium dans une cavité ventilée, avec dans un premier temps, la recherche d'une configuration où le panache ne serait pas confiné. Après avoir présenté la configuration d'étude et justifié la modélisation numérique employée, nous présentons la distribution de He dans la cavité suivant la taille de celle-ci, puis nous comparons nos résultats aux modèles macroscopiques de la littérature pour le cas non confiné.

Configuration physique

On s'intéresse à l'injection d'un fluide léger dans une cavité ventilée par deux événements, ouvrant sur un milieu extérieur infini rempli d'air au repos. De l'hélium est injecté au centre de la paroi inférieure de la cavité. La géométrie considérée est présentée à la figure 1. Trois configurations géométriques sont étudiées, dont les dimensions sont listées dans le tableau 1. Le système est supposé à température et pression constantes ($T = 25^\circ C$, $P = 1\text{atm}$). On injecte un débit constant d'hélium ($Q_v = 15\text{L/min}$ dans les conditions normales de température et de pression). Cela correspond à un débit volumique d'hélium de $2.68 \cdot 10^{-4}\text{m}^3/\text{s}$ dans les conditions de l'étude. L'injection imposée est caractérisée par les nombres de Richardson ($R_{inj} = 0.05$) et de Reynolds d'injection ($Re_{inj} = 282$), avec $Ri_{inj} = g \frac{(\rho_{air} - \rho_{He})d_{inj}}{\rho_{He}u_{inj}^2}$ et $Re_{inj} = \frac{\rho_{He}u_{inj}d_{inj}}{\mu_{He}}$, où g est la gravité, ρ_{air} et ρ_{He} les masses volumiques de l'air pur et de l'hélium, d_{inj} le diamètre d'injection, et u_{inj} la vitesse débitante d'injection. Les propriétés physiques des deux fluides sont données dans le tableau 2. De plus, on estime le nombre de Richardson volumique ($Ri_v = g \frac{(\rho_{air} - \rho_{He})V_{box}^{1/3}}{\rho_{He}u_{inj}^2}$) avec V_{box} le volume de la cavité d'étude) entre 0.4 et 0.5. Ceci

Config.	Cavité d'étude			Domaine extérieur (cm^3) $L_x \times (L + 2L_y) \times (H + 2L_z)$	Nombre de cellules	Nombre de proc. MPI
	L (cm)	W (cm)	H (cm)			
A	5	5	20	$8 \times 11 \times 26$	$8.54 \cdot 10^6$	256
B	7	7	20	$8 \times 13 \times 26$	$11.17 \cdot 10^6$	256
C	10	10	20	$6 \times 14 \times 24$	$12.04 \cdot 10^6$	512

TABLE 1 – Paramètres géométriques et numériques.

Fluide	Masse volumique (kg/m^3)	Viscosité dynamique ($\times 10^5 kg/m/s$)	Masse molaire (g/mol)	nombre de Schmidt
Hélium	$\rho_{He} = 0.161$	$\mu_{He} = 1.918$	$M_{He} = 4.003$	$Sc_{He} = 1.7$
Air	$\rho_{air} = 1.168$	$\mu_{air} = 1.792$	$M_{air} = 28.97$	$Sc_{air} = 0.2$

TABLE 2 – Propriétés physiques des fluides.

nous permet d'anticiper la formation d'une couche homogène en mélange en haut de la cavité [Cariteau and Tkatschenko, 2012].

Modélisation numérique

Le ratio des masses volumiques des deux espèces formant le mélange est plutôt élevé ($\rho_{air}/\rho_{He} = 7.25$). Mais le nombre de Mach de l'écoulement étant très faible, on peut appliquer l'approximation Faible Mach aux équations de Navier-Stokes pour simplifier le système à résoudre.

Pour cela, nous utilisons le code de calcul TrioCFD basé sur la plateforme TRUST développée au CEA [France]. Il s'agit d'un code volumes-finis semi-implicite utilisant des schémas spatiaux centrés au second ordre, excepté pour les termes de transport de la fraction massique d'hélium (Y_1) pour lesquels un schéma QUICK est appliqué. L'avancée en temps est réalisée par un schéma Runge-Kutta d'ordre deux. Une méthode de projection assure l'incompressibilité. L'équation de Poisson résultante est résolue par une procédure itérative SSOR. Le code est parallélisé par décomposition de domaine en utilisant la bibliothèque MPI (*Message Passing Interface*).

Nos travaux précédents [Saikali et al., 2019, Bernard-Michel et al., 2019] ont montré la nécessité de discrétiser un large volume extérieur modélisant l'environnement extérieur rempli d'air au repos, et qui interagit avec la cavité au travers de deux événements. Le domaine de calcul complet est présenté à la figure 1. Trois types de conditions limites sont appliqués. L'hélium est injecté à flux constant ($\rho = \rho_{He}$; $Y_1 = 1$) à la base du tube d'injection. Une condition limite de Neumann homogène est imposée aux parois solides pour les variables scalaires (masse volumique du mélange ρ , fraction massique d'hélium Y_1 , pression). Sur les frontières ouvertes du domaine de calcul, on impose une valeur de la pression correspondant à l'équilibre hydrostatique du domaine extérieur. De plus, lorsque l'écoulement est sortant, on applique une condition limite de type Neumann homogène sur les variables scalaires et la vitesse, alors que lorsque l'écoulement est entrant, une condition de Dirichlet est appliquée sur les scalaires ($\rho = \rho_{air}$ et $Y_1 = 0$). A l'état initial, toute la cavité est remplie d'air pur au repos.

Le maillage utilisé est décrit dans le tableau 1. Il correspond à un maillage uniforme par bloc avec une taille de maille $\delta \leq 0.7$ mm dans chaque direction, au plus égale au tiers ou au quart de l'échelle de Kolmogorov suivant les configurations.

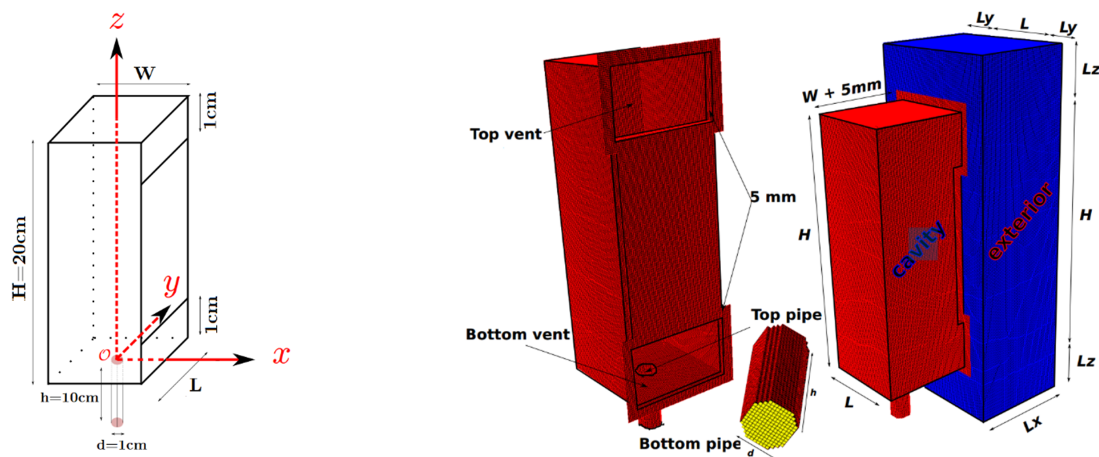


FIGURE 1 – Géométrie et domaine de calcul. Les couleurs marquent le type de condition limite : parois (rouge), vitesse imposée (jaune), pression imposée (bleu).

Résultats

Structuration bi-couche du mélange et hauteur de l'interface

La figure 2 présente la distribution moyennée en temps de la fraction volumique d'hélium (X_1) dans la cavité d'étude en fonction du confinement de celle-ci. On voit clairement un écoulement de type bi-couche s'établir lorsque la cavité est suffisamment grande (cavité C). La partie basse de la cavité correspond à un jet flottant d'un mélange air-hélium entouré d'air frais, tandis que la partie haute de la cavité est occupée par un mélange homogène remplissant tout le volume. Un champ instantané de X_1 montre le caractère fluctuant voire turbulent du jet flottant (figure C^*). Les configurations A et B mettent en évidence l'effet du confinement de la cavité avec une couche homogène qui remplit de plus en plus la cavité quand le confinement augmente et un jet de plus en plus incliné au fur et à mesure que l'évent du bas se rapproche de la zone d'injection.

La distribution verticale d'hélium est présentée pour la configuration C à la figure 3 le long de plusieurs lignes verticales éloignées de l'axe du jet flottant. On remarque une distribution d'hélium en définitive en trois couches. En haut, la couche homogène en X_1 , puis une zone stratifiée linéairement qui s'étend sur une grande partie de la section horizontale de la cavité (excepté à l'opposé des événements, peut-être par manque de convergence temporelle des calculs) et la zone basse d'injection d'hélium dans un volume d'air pur. A partir des profils verticaux de fraction volumique X_1 , on peut déterminer la hauteur de l'interface H_{in} de la couche de mélange homogène. On constate que cette hauteur varie beaucoup avec le confinement géométrique comme présenté au tableau 3. H_{in} n'est pas renseigné pour la configuration (A) car la répartition de X_1 n'est pas assez homogène dans la cavité du fait du confinement.

Le confinement modifie aussi largement le taux de ventilation de la cavité, ici estimé en termes de quantité d'air frais entrant dans la cavité par l'évent du bas (tableau 3). On voit ainsi qu'à panache injecté identique, une cavité de volume quatre fois plus grand peut entraîner un débit d'air frais moitié plus grand par l'évent du bas, le volume sortant par l'évent du haut étant d'autant augmenté.

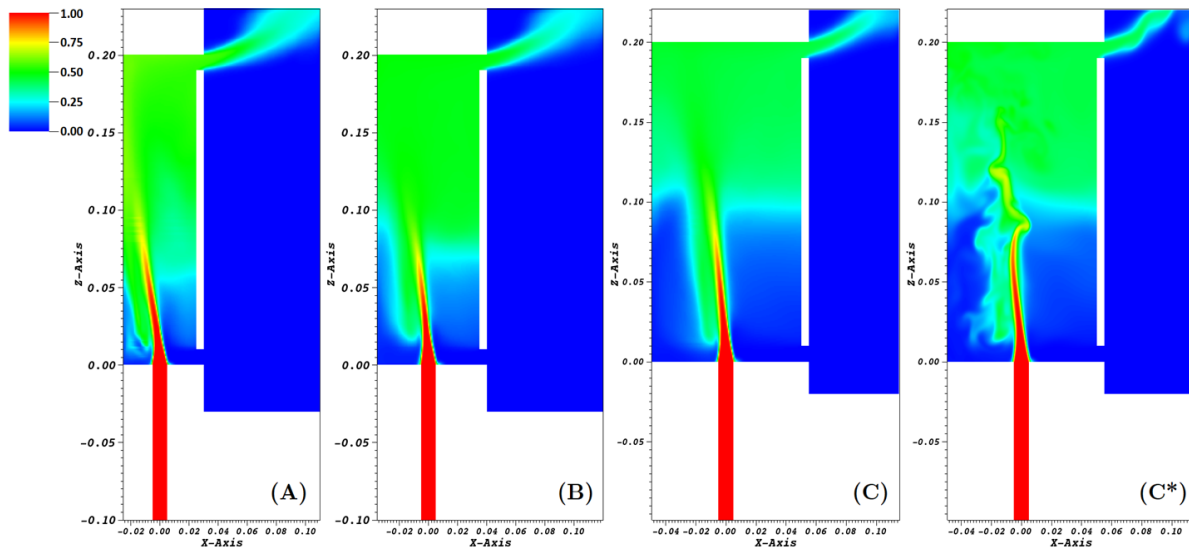


FIGURE 2 – Champs de fraction volumique d'hélium X_1 dans le plan vertical médian passant par les événements. Figures *A*, *B*, *C* : champs moyennés en temps ; Figure *C** : champ instantané à $t = 25s$.

Comparaison avec le modèle théorique de Linden [1999]

Nous cherchons maintenant à comparer nos résultats DNS à la modélisation théorique de ventilation par deux événements de [Linden et al., 1990, Linden, 1999]. La comparaison se base sur la hauteur moyenne de la couche homogène H_{in} , ainsi que sur les valeurs moyennées en temps de la fraction massique d'hélium $\langle X_1 \rangle_{HL}$ et de la masse volumique du mélange au sein de cette couche $\langle \rho_{HL} \rangle$. L'expression théorique de H_{in} ne dépend pas du débit injecté ni de la section traversée, mais seulement de l'aire des événements qui est modifiée avec le confinement de chacune des configurations. On prend un coefficient d'entraînement égal à 0.1, valeur en accord avec nos résultats DNS [Wang et al., 2019] et communément admise pour un panache [Cariteau and Tkatschenko, 2012]. Le coefficient de perte de charge des événements est fixé à 0.5. Dans le tableau 3, nous présentons nos résultats et ceux obtenus avec le modèle de Linden et al. [1990] pour deux modélisations prenant en compte ou non les effets non-Boussinesq de la variation de la masse volumique du mélange.

Tout d'abord, on remarque que la position verticale de la couche de mélange homogène baisse avec le confinement (figure 2). Ceci est en accord avec les valeurs de H_{in} obtenues par la modélisation de Linden et al. [1990], mais aussi issues de nos résultats DNS dans les configurations B et C. En revanche, la répartition de X_1 est trop peu uniforme dans la configuration A pour déterminer de manière représentative une hauteur de couche homogène. On remarque le bon accord entre les valeurs théorique et numérique de H_{in} pour la configuration la moins confinée (C). Le confinement joue aussi sur le mélange de la couche homogène supérieure. La quantité d'hélium contenue dans le mélange ($\langle X_1 \rangle_{HL}$) augmente avec le confinement, réduisant ainsi la masse volumique du mélange ($\langle \rho \rangle_{HL}$). Il y a donc moins d'hélium relativement à l'air dans le mélange supérieur lorsque le panache n'est pas confiné par la géométrie de la cavité. Ce comportement est bien approché par le modèle de [Linden et al., 1990]. Cependant, on remarque qu'il est nécessaire de prendre en compte les effets non-Boussinesq pour obtenir une bonne approximation du mélange, particulièrement pour la configuration C. En effet, l'approximation de Boussinesq conduit à une forte sur-estimation de la quantité d'hélium contenue dans la couche homogène, réduisant ainsi la masse volumique moyenne ($\langle \rho \rangle_{HL}$).

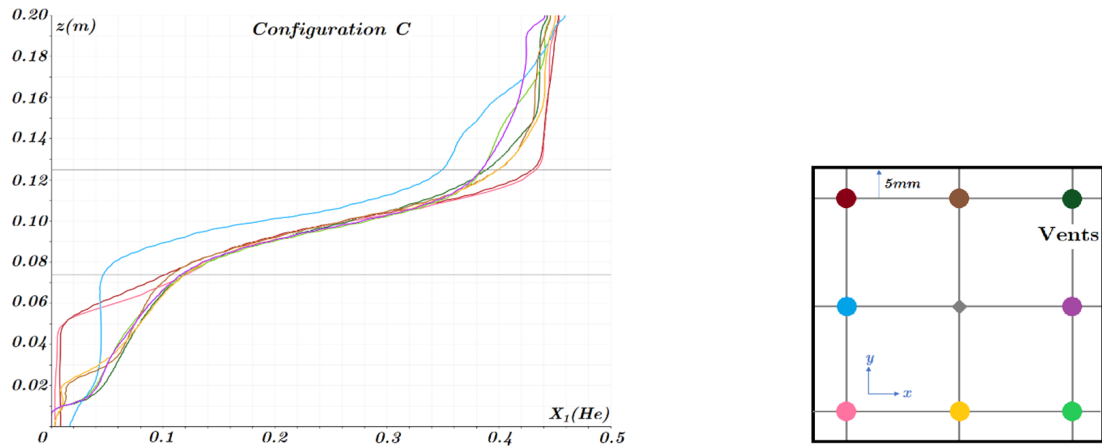


FIGURE 3 – Profils moyennés en temps de la fraction volumique d’hélium X_1 le long de lignes verticales au loin de l’axe du jet flottant pour la configuration C. Les positions des lignes verticales sont présentées sur la droite de la figure.

Configurations	A	B	C
DNS			
Débit d’air frais entrant par l’évent du bas Q_{bot} (m^3/s)	$2.20 \cdot 10^{-4}$	$3.05 \cdot 10^{-4}$	$3.70 \cdot 10^{-4}$
Débit de mélange sortant par l’évent du haut Q_{top} (m^3/s)	$4.93 \cdot 10^{-4}$	$5.81 \cdot 10^{-4}$	$6.46 \cdot 10^{-4}$
Hauteur de l’interface H_{in} (cm)	-	9.6	12.5
Fraction volumique moyenne $\langle X_1 \rangle_{HL}$	0.53	0.48	0.44
Densité moyenne $\langle \rho \rangle_{HL}$ (kg/m^3)	0.634	0.685	0.725
Linden et al. [1990]			
Hauteur de l’interface H_{in} (cm)	9.7	10.8	12.1
Densité moyenne $\langle \rho \rangle_{HL}$ (kg/m^3)	<i>Boussinesq approx.</i>	0.287	0.559
	<i>non-Boussinesq approx.</i>	0.602	0.663

TABLE 3 – Influence du confinement sur la couche supérieure de mélange homogène. Comparaison entre les résultats issus du modèle de [Linden et al., 1990, Linden, 1999] et nos résultats DNS suivant la configuration géométrique. La distribution de X_1 dans la configuration A obtenue par DNS n’est pas assez uniforme pour identifier une hauteur de couche homogène.

Conclusions

Des simulations numériques directes ont été réalisées pour évaluer l’influence du confinement sur la nature de l’écoulement et la distribution d’hélium au sein d’une cavité avec deux événements dans laquelle un panache forcé d’hélium est injecté. Nous montrons que dans une cavité fortement confinée, le panache est incliné par l’air entrant par l’évent du bas, bien que le débit traversant cet événement soit réduit, tandis que la distribution d’hélium est trop inhomogène pour voir un écoulement de type bi-couche s’installer. Au contraire, dans une cavité de plus grandes extensions horizontales, le panache forcé est moins incliné bien que le débit d’air frais traversant l’évent du bas est beaucoup plus important (ici +50%) et un écoulement de type tri-couche s’établit : i) la couche inférieure est plutôt remplie d’air frais, ii) la couche supérieure est homogène en mélange air-hélium, iii) la couche intermédiaire est stratifiée linéairement. De manière générale, on peut dire que plus le confinement est important, moins la cavité est ventilée d’air frais et plus elle est remplie en moyenne d’une quantité importante d’hélium.

La comparaison avec les modèles théoriques de ventilation avec deux événements de [Linden et al., 1990,

Linden, 1999] présente un très bon accord pour la grande cavité faiblement confinée, particulièrement lorsque les effets non-Boussinesq sont pris en compte.

Remerciements

Ces travaux ont bénéficié d'un accès aux moyens de calcul de l'IDRIS au travers de l'allocation de ressources 2a0326 attribuée par GENCI, et du support financier du LABEX LASIPS (ANR-10-LABX-0032-LaSIPS, programme "Investissements d'avenir") dans le cadre du projet HPLUME.

Références

- G. Bernard-Michel, E. Saikali, A Sergent, and C Tenaud. Comparisons of experimental measurements and large eddy simulations for a helium release in a two vents enclosure. *International Journal of Hydrogen Energy*, 44 :8935–8953, 2019.
- B. Cariteau and I. Tkatschenko. Experimental study of the concentration build-up regimes in an enclosure without ventilation. *International Journal of Hydrogen Energy*, 37(22) :17400 – 17408, 2012.
- Centre à l'Energie Atomique, CEA (France) Dir. Energie Nucléaire DEN TRUST - TrioCFD code version 1.7.4. (<http://www-trio-u.cea.fr>).
- P.F. Linden. The fluid mechanics of natural ventilation. *Annual review of fluid mechanics*, 31(1) : 201–238, 1999.
- P.F. Linden, G.F. Lane-Serff, and D.A. Smeed. Emptying filling boxes : the fluid mechanics of natural ventilation. *Journal of Fluid Mechanics*, 212 :309–335, 1990.
- B. R. Morton, G. I. Taylor, and J. S. Turner. Turbulent gravitational convection from maintained and instantaneous sources. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences*, 234(1196), 1956.
- E. Saikali, G. Bernard-Michel, A Sergent, C Tenaud, and R Salem. Highly resolved large eddy simulations of a binary mixture flow in a cavity with two vents : influence of the computational domain. *International Journal of Hydrogen Energy*, 44 :8856–8873, 2019.
- Y. Wang, A Sergent, G Bernard-Michel, P. Le Quéré, and E Saikali. Numerical assessment of confinement effect and flow structure in case of hydrogen release in a two-vented cavity. In *14th International Conference on Heat Transfer, Fluid Mechanics and Thermodynamics*, Wicklow, Ireland, 22-24 July 2019.