

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

SIMULATIONS NUMÉRIQUES
ET VISUALISATION D'INCENDIES SOUS-VENTILÉS
AVEC FDS V3.10

JEAN-PHILIPPE HARDY
DÉPARTEMENT DE GÉNIE MÉCANIQUE
ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

MÉMOIRE PRÉSENTÉ EN VUE DE L'OBTENTION DU DIPLÔME
DE MAÎTRISE ÈS SCIENCES APPLIQUÉES
(GÉNIE MÉCANIQUE)

AVRIL 2004



National Library
of Canada

Bibliothèque nationale
du Canada

Acquisitions and
Bibliographic Services

Acquisitions et
services bibliographiques

395 Wellington Street
Ottawa ON K1A 0N4
Canada

395, rue Wellington
Ottawa ON K1A 0N4
Canada

Your file Votre référence

ISBN: 0-612-91947-1

Our file Notre référence

ISBN: 0-612-91947-1

The author has granted a non-exclusive licence allowing the National Library of Canada to reproduce, loan, distribute or sell copies of this thesis in microform, paper or electronic formats.

L'auteur a accordé une licence non exclusive permettant à la Bibliothèque nationale du Canada de reproduire, prêter, distribuer ou vendre des copies de cette thèse sous la forme de microfiche/film, de reproduction sur papier ou sur format électronique.

The author retains ownership of the copyright in this thesis. Neither the thesis nor substantial extracts from it may be printed or otherwise reproduced without the author's permission.

L'auteur conserve la propriété du droit d'auteur qui protège cette thèse. Ni la thèse ni des extraits substantiels de celle-ci ne doivent être imprimés ou autrement reproduits sans son autorisation.

In compliance with the Canadian Privacy Act some supporting forms may have been removed from this dissertation.

Conformément à la loi canadienne sur la protection de la vie privée, quelques formulaires secondaires ont été enlevés de ce manuscrit.

While these forms may be included in the document page count, their removal does not represent any loss of content from the dissertation.

Bien que ces formulaires aient inclus dans la pagination, il n'y aura aucun contenu manquant.

Canada

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

Ce mémoire intitulé:

SIMULATIONS NUMÉRIQUES
ET VISUALISATION D'INCENDIES SOUS-VENTILÉS
AVEC FDS V3.10

présenté par: HARDY Jean-Philippe

en vue de l'obtention du diplôme de: Maîtrise ès sciences appliquées

a été dûment accepté par le jury d'examen constitué de:

M. TRÉPANIÉ Jean-Yves, Ph.D., président

M. REGGIO Marcelo, Ph.D., membre et directeur de recherche

M. OZELL Benoit, Ph.D., membre et codirecteur de recherche

M. HALLÉ Stéphane, Ph.D., membre

REMERCIEMENTS

J'aimerais tout particulièrement remercier mon directeur de maîtrise, M. Marcelo Reggio, sans qui je n'aurais sûrement jamais découvert le domaine fascinant qu'est la simulation d'incendies par ordinateurs. J'apprécie de plus la très grande latitude qui m'a été donnée dans le cadre de ce travail de recherche. J'aimerais aussi remercier tout le personnel du Centre de recherche en calcul appliqué pour les innombrables coups de main et un matériel informatique plus que nécessaire pour ce genre d'étude. J'aimerais plus particulièrement remercier M. Stéphane Hallé pour ses conseils et ses idées, M. Vincent Staub pour son travail sur les retours de flamme qui m'a en quelque sorte guidé vers ce mémoire et MM. Daniel Barrero et Juan Abanto pour leur aide inégalée dans le domaine informatique. Je remercie de plus M. Benoît Ozell, pour son aide avec la visualisation des résultats numériques et ses efforts constants pour améliorer l'aspect visuel des simulations. Mes derniers remerciements vont à M. Bruno Detuncq pour son aide inestimable dans le domaine de la chimie de la combustion et pour son précieux travail de programmation sur EES.

RÉSUMÉ

On recense au Canada et au Québec un nouvel incendie résidentiel à toutes les trente minutes environ et chaque année, ces incendies causent plus de onze milliards de dollars en dommages directs et indirects. Même si tous les incendies présentent un potentiel de destruction qu'on ne peut négliger, ceux impliquant des explosions sont sans doute les plus menaçants et les plus redoutés des services d'incendies. Il existe plusieurs sources d'explosions, qu'il s'agisse de contenants sous pression ou de substances chimiques explosives, mais parmi celles-ci on retrouve un type d'explosion moins connu mais aussi sournois, le retour de flamme ou backdraft. Cette explosion se produit lorsque l'on introduit de l'air dans un édifice ou une pièce peu ventilée où il y a eu combustion durant une certaine période et où il y a eu accumulation de produits de pyrolyse à cause du manque d'oxygène. Lorsque l'air pénètre dans l'édifice, lors de l'intervention des pompiers par exemple, l'oxygène qu'il contient se mélange aux produits de pyrolyse et crée une région inflammable. Si cette région est allumée par la présence d'une source de chaleur, l'expansion créée propulse le mélange inflammable vers l'extérieur où celui-ci se consumera en une large boule de feu.

La présente étude tente de reproduire ce phénomène à l'aide du logiciel de simulation d'incendies par ordinateurs FDS v3.10, développé par le National Institute of Standards and Technology aux États-Unis. Ce logiciel utilise une méthode de volumes finis pour résoudre les écoulements de fluides thermiquement induits, à l'aide d'une forme simplifiée des équations de Navier-Stokes appropriée pour les écoulements à faible nombre de Mach. Le modèle de combustion utilisé est basé sur le modèle de flammelette et emploie l'hypothèse que la combustion est régie par le mélange des espèces et que la réaction de combustion est infiniment rapide. La simulation d'une expérience de retour de flamme en conteneurs effectuée à l'université Lund (Suède) a toutefois permis d'identifier certaines lacunes lorsqu'on désire simuler des retours de flamme de ce type :

- La surproduction de dioxyde de carbone, qui est aussi reliée à la sous-production de monoxyde de carbone et de suie;
- L'absence du courant de gravité caractéristique des backdrafts.

Les simulations initiales de l'expérience ont été effectuées dans un conteneur hermétique et un conteneur avec fuites, afin de voir l'impact de ce paramètre sur les résultats numériques. Dans le but d'améliorer les simulations de retours de flamme avec FDS, deux modifications ont été apportées, basées sur les hypothèses suivantes :

- La modification de la production de dioxyde de carbone par le biais des paramètres réactionnels permettra d'obtenir des concentrations appropriées pour cette espèce.
- La présence d'un courant de gravité pourra être rétablie par l'arrêt complet de la combustion durant la période où le courant de gravité (courant d'air frais) progresse vers la source d'ignition.

La modification des paramètres réactionnels de la réaction de combustion du méthane a permis d'abaisser la concentration de dioxyde de carbone à une valeur plus acceptable de 7,5%, par rapport à la concentration initiale de 10%. Les valeurs obtenues pour les coefficients de la réaction de combustion du méthane en milieu sous-ventilé, bien qu'inapplicables aux autres carburants, permettent tout de même de simuler avec un peu plus de précision les concentrations des produits de combustion du méthane lorsque celui-ci brûle dans un milieu où l'oxygène est insuffisant pour soutenir une combustion complète.

La deuxième modification apportée à FDS consiste en l'implémentation d'un ensemble de sous-routines qui permettent d'arrêter toute combustion durant une période précise afin de permettre au courant de gravité d'avoir lieu. L'arrêt de la combustion est nécessaire, car la poussée qu'elle produit et la réaction chimique qui a lieu empêche l'air frais d'entrer dans le conteneur lors de son ouverture et d'engendrer un courant de gravité.

Les résultats obtenus démontrent que la méthode de suppression de la combustion permet en effet au courant de gravité d'avoir lieu. Ce phénomène essentiel à la présence de retours de flamme est donc restitué lors des simulations, ce qui permet de simuler avec beaucoup plus de précision les événements qui suivent l'ouverture du conteneur. Effectivement, les simulations effectuées avec la méthode de suppression de la combustion démontrent une amélioration de la durée et de l'intensité des retours de flamme, de l'historique de la concentration des espèces ainsi que de la taille de l'explosion engendrée. Ces améliorations sont toutefois dépendantes du choix approprié de la variable critique et de sa valeur critique.

Même si la modification des paramètres réactionnels et l'arrêt de la combustion durant le courant de gravité permettent d'améliorer les simulations de retours de flamme avec FDS, la simulation numérique de ce phénomène est toujours quelque peu problématique. Les techniques présentées dans ce mémoire permettent de contourner certains problèmes et d'approcher les résultats numériques et expérimentaux pour les conditions à l'étude, mais de profondes améliorations devront être effectuées dans les modèles utilisés avant que l'on puisse prétendre simuler les retours de flamme avec précision. L'intégration de concepts tels les plages d'inflammabilité, le rapport de mélange et l'ignition des mélanges gazeux par une source de chaleur pourrait constituer le prochain pas vers la simulation adéquate du phénomène de retour de flamme.

ABSTRACT

In Canada and Québec, there is a residential fire every thirty minutes approximately, and those fires are responsible for more than eleven billion dollars in damages every year. Even if all fires should not be considered equal, they all represent a threat for life that cannot be underestimated. However, of all types of fires, there are some that represent a greater danger than others. Thereby, the ones that are most feared by fire departments are the fires which result in an explosion. Many sources of explosions are present in residential housing, like aerosol cans, or explosive chemicals, but there is one type of explosion that is less frequent but also more sneaky, the backdraft. This type of explosion happens when there is a sudden inrush of air in a burning building where combustion has been taking place in shortage of air which caused an accumulation of pyrolysis products. When fresh air enters the building, usually when firefighters force entry, the oxygen mixes with unburned pyrolysate and creates a flammable region. If an ignition source is present to ignite the flammable mixture, the expansion created will push the gases outside of the building where they will burn in a large fireball.

The present study tries to replicate the backdraft phenomena with the fire simulation software FDS v3.10 developed by the NIST in the United States. This particular software uses a finite volumes method to solve an approximate form of the Navier-Stokes equations appropriate for low Mach number applications. The combustion model is based on the assumption that the combustion reaction is mixing-controlled, and is a form of “flame sheet” combustion model.

In order to evaluate the backdraft simulation abilities of FDS v3.10, an experiment conducted by D. Gojkovic of the Lund University in Sweden will be simulated. This experiment uses a standard naval container and natural gas to create controlled backdrafts. After combustion stops due to a lack of oxygen, the burner flow is kept on to simulate the production of pyrolysate. After a while an opening is made to allow fresh

air to enter the container. The fresh air mixes with the natural gas, and when this flammable mixture reaches the ignition source, it ignites and creates a backdraft. The preliminary simulations of this procedure will use either a sealed or a leaking container, in order to evaluate the impact of a small ventilation source on the numerical results.

Once the simulation capabilities of the software were analyzed, the following major deficiencies were identified:

- The over production of carbon dioxide, which is related to the under production of carbon monoxide and soot.
- The absence of the gravity current typical of backdraft situations.

Hence, to improve backdraft simulations with FDS v3.10, two modifications will be introduced into the software and tested, based on the two following hypotheses:

- Appropriate carbon dioxide concentrations will be obtained with proper modifications to the reaction parameters of the methane combustion reaction.
- The presence of the gravity current will be restored with the complete interruption of combustion during the period when the gravity current is moving towards the ignition source.

Based on the work of many researchers in the field of fire science, modifications to the reaction parameters of methane combustion effectively reduced the carbon dioxide concentration from 10 to 7.5%. The reaction coefficients obtained for under-ventilated combustion of methane, while inapplicable to other fuels, allow for a little more precision in the concentration of combustion products during simulations, when the simulation conditions are similar to the problem at hand (i.e. the burning of methane in a highly vitiated atmosphere).

The second modification made to FDS v3.10 consists of an ensemble of subroutines that allow the gravity current to exist by suspending combustion in the entire simulation domain during a precise period of time. The interruption of combustion is necessary

because the buoyancy created by combustion and the chemical reaction taking place when the container is opened prevent any fresh air from entering the compartment and creating a gravity current. The combustion restarts when the variable chosen by the end user reaches its critical value (also chosen) at the location of the backdraft ignition source.

The results obtained with the latter modification prove that the method used effectively allows for the gravity current to take place once the container is opened. Thus, this phenomenon, essential to the comprehension of the entire backdraft process, is restored to the simulations, and helps predicting with more accuracy the events following the opening of the backdraft container. Indeed, simulations which used the combustion interruption method showed improvements in the duration and intensity of the backdraft, as well as in the concentration of species and the size of the backdraft explosion. This method, when used in conjunction with a leaky container, gives the best results regarding the aspects mentioned previously. However, these improvements greatly depend on the appropriate choice for the critical variable and its critical value.

Even though the reaction parameters modifications and the interruption of combustion during the gravity current phase allow for more precise simulations of the backdraft phenomena in containers, the simulation of this particular fire event still represents a challenging task. The techniques presented here may solve some of the problems associated with under ventilated combustion simulation for the specific conditions of this study but deeper modifications will have to be included in future fire simulation software before simulation results can be entirely trusted. Such modifications should include the introduction of concepts such as flammability limits, equivalence ratios and the ignition of flammable mixtures with a heat source.

TABLE DES MATIÈRES

REMERCIEMENTS	iv
RÉSUMÉ	v
ABSTRACT	viii
TABLE DES MATIÈRES	xi
LISTE DES TABLEAUX.....	xiv
LISTE DES FIGURES	xv
LISTE DES ABBRÉVIATIONS ET SIGLES	xviii
LISTE DES ANNEXES	xx
INTRODUCTION	1
Backdraft : définition et scénario	2
Motivations derrière cette recherche.....	4
Méthodologie	6
CHAPITRE 1 REVUE HISTORIQUE ET LITTÉRAIRE	7
1.1 Bref historique de la simulation d'incendie	8
1.1.1 Premiers modèles	8
1.1.2 Modèles de champs.....	9
1.2 Revue littéraire.....	10
1.2.1 Études de cas.....	11
1.2.2 Études expérimentales	11
1.2.3 Études numériques	12
CHAPITRE 2 SIMULATIONS D'INCENDIES AVEC FDS V3.10.....	15
2.1 Concepts généraux de la MFAO et de FDS.....	15
2.2 Modèles utilisés par FDS v3.10	17
2.2.1 Méthodes LES et DNS.....	17

2.2.2	Modèle hydrodynamique	19
2.2.3	Modèle de combustion	21
2.2.4	Modèle d'extinction de flamme	24
2.2.5	Modèle de radiation	25
2.2.6	Méthode numérique	26
CHAPITRE 3 VISUALISATION DES SIMULATIONS NUMÉRIQUES		28
3.1	Smokeview	28
3.2	VU	30
CHAPITRE 4 MÉTHODOLOGIE		32
4.1	Instrumentation et méthode expérimentale	32
4.1.1	Conteneur	32
4.1.2	Brûleur et appareils de mesure	34
4.1.3	Méthode expérimentale	36
4.2	Simulation des expériences avec FDS v3.10	37
4.2.1	Modélisation géométrique et maillage	37
4.2.2	Conditions frontières	41
4.2.3	Réaction chimique	42
4.2.4	Quantités mesurées	42
CHAPITRE 5 CAPACITÉS ACTUELLES DE FDS V3.10		44
5.1	Température	44
5.2	Concentration des espèces	46
5.3	Résultats qualitatifs et visuels	47
5.3.1	Accumulation des produits de pyrolyse	48
5.3.2	Courant de gravité	49
5.3.3	Explosion	51
5.4	Dépendance des résultats à la taille du maillage	53
5.4.1	Température	54
5.4.2	Concentration des espèces	55
5.5	Analyse des capacités actuelles de FDS v3.10	56

CHAPITRE 6	MODIFICATIONS APPORTÉES ET RÉSULTATS	61
6.1	Modification des paramètres réactionnels	61
6.1.1	Considérations chimiques	61
6.1.2	Modification des paramètres réactionnels	65
6.1.3	Résultats de la modification des paramètres réactionnels.....	70
6.2	Suppression de la combustion durant le courant de gravité.....	72
6.2.1	Mécanismes associés aux retours de flamme.....	72
6.2.2	Méthode	74
6.2.3	Résultats de la méthode de suppression de la combustion	77
CHAPITRE 7	DISCUSSION	90
CONCLUSION		97
RÉFÉRENCES		99
ANNEXES		107

LISTE DES TABLEAUX

Tableau 4.1 : Caractéristiques de l'expérience choisie	37
Tableau 6.1 : Résumé des simulations avec suppression de la combustion	77

LISTE DES FIGURES

Figure 0.1 : Schéma du développement d'un retour de flamme.....	4
Figure 2.1 : Exemple de domaine de simulation et de volumes de contrôle	16
Figure 2.2 : Relations d'état pour le méthane	23
Figure 2.3 : Diagramme du modèle d'extinction de flamme	24
Figure 2.4 : Système de coordonnées utilisé pour la discrétisation angulaire	26
Figure 2.5 : Volume de contrôle et assignation des variables.....	27
Figure 3.1 : Iso-surface du dégagement de chaleur d'un incendie dans une salle d'ordinateurs	29
Figure 3.2 : Plan montrant la fraction massique de carburant dans une pièce.....	29
Figure 3.3 : Incendie dans une salle d'ordinateurs	31
Figure 3.4 : Iso-surfaces de températures (30 et 275 °C)	31
Figure 4.1 : Dimensions du conteneur utilisé	33
Figure 4.2 : Dimensions de l'ouverture	33
Figure 4.3 : Vue de plan du conteneur	35
Figure 4.4 : Évolution typique du « Fire Resolution Index » lors des simulations de retours de flamme	39
Figure 4.5 : Conteneur et domaine de simulation	40
Figure 5.1 : Comparaison des températures (sans fuites)	44
Figure 5.2 : Comparaison des températures (avec fuites).....	45
Figure 5.3 : Mesures expérimentales des concentrations.....	46
Figure 5.4 : Valeurs simulées des concentrations en O ₂ et CO ₂ (sans fuites).....	46
Figure 5.5 : Valeurs simulées des concentrations en O ₂ et CO ₂ (avec fuites)	47
Figure 5.6 : Valeurs simulées de la concentration en méthane (sans fuites)	48
Figure 5.7 : Valeurs simulées de la concentration en méthane (avec fuites).....	49
Figure 5.8 : Températures simulées entre 300 et 375 secondes (sans fuites)	50
Figure 5.9 : Iso surface du dégagement de chaleur à 325,1 secondes (sans fuites)	50
Figure 5.10 : Surface estimée de la flamme à 325,8 secondes (sans fuites)	51

Figure 5.11 : Surface estimée de la flamme à 327,8 secondes (avec fuites).....	51
Figure 5.12 : Comparaison des températures pour le maillage grossier (avec fuites)	54
Figure 5.13 : Comparaison des températures pour le maillage raffiné (avec fuites)	54
Figure 5.14 : Concentrations en O_2 et CO_2 pour le maillage grossier (avec fuites)	55
Figure 5.15 : Concentrations en O_2 et CO_2 pour le maillage raffiné (avec fuites)	55
Figure 5.16 : Débits au niveau des fuites (maillage raffiné).....	60
Figure 5.17 : Débits au niveau des fuites (maillage grossier).....	60
Figure 6.1 : Diagramme du cheminement de la réaction de combustion du méthane à basse température (<1500K)	62
Figure 6.2 : Produits majeurs de la combustion du propane dans l'air à 1 atm.....	64
Figure 6.3 : Photo du conteneur après l'allumage du retour de flamme.....	68
Figure 6.4 : Valeurs simulées des concentrations en O_2 et CO_2 avec modification des paramètres réactionnels (sans fuites)	70
Figure 6.5 : Valeurs simulées des concentrations en O_2 et CO_2 avec modification des paramètres réactionnels (avec fuites).....	71
Figure 6.6 : Diagramme d'inflammabilité ternaire méthane-oxygène-azote.....	72
Figure 6.7 : Comparaison des températures (simulation C-1)	78
Figure 6.8 : Comparaison des températures (simulation C-2)	79
Figure 6.9 : Comparaison des températures (simulation C-3)	79
Figure 6.10 : Comparaison des températures (simulation C-4)	80
Figure 6.11 : Valeurs simulées de la concentration en méthane (simulation C-1)	81
Figure 6.12 : Valeurs simulées de la concentration en méthane (simulation C-2)	81
Figure 6.13 : Valeurs simulées de la concentration en méthane (simulation C-3)	82
Figure 6.14 : Valeurs simulées de la concentration en méthane (simulation C-4)	82
Figure 6.15 : Valeurs simulées des températures entre 300 et 350 secondes (simulation C- 4)	83
Figure 6.16 : Coupe des valeurs de la fraction de mélange au centre du conteneur après 330 secondes (simulation C-4).....	85
Figure 6.17 : Surface estimée de la flamme à 331,2 secondes (simulation C-4).....	85

Figure 6.18 : Surface estimée de la flamme à 359,6 secondes (simulation C-1).....	86
Figure 6.19 : Surface estimée de la flamme à 358,2 secondes (simulation C-2).....	86
Figure 6.20 : Surface estimée de la flamme à 332,6 secondes (simulation C-3).....	87
Figure 6.21 : Surface estimée de la flamme à 333,0 secondes (simulation C-4).....	87
Figure 6.22 : Valeurs simulées des concentrations en O ₂ et CO ₂ (simulation C-4 avec paramètres réactionnels modifiés)	88
Figure 6.23 : Valeurs simulées des concentrations en O ₂ et CO ₂ (simulation C-2).....	89

LISTE DES ABBRÉVIATIONS ET SIGLES

c_p	Chaleur spécifique à pression constante
D_l	Coefficient de diffusion de l'espèce l
$\vec{f}$	Forces externes exercées sur le fluide (excepté la gravité)
$\vec{g}$	Accélération gravitationnelle
h	Enthalpie
h_l	Enthalpie de l'espèce l
ΔH_O	Dégagement de chaleur par unité massique d'oxygène consommé
I	Intensité de rayonnement
I_b	Intensité de rayonnement d'un corps noir
k	Conductivité thermique
$\dot{m}_l$	Taux de variation massique de l'espèce l par unité de volume
M	Masse molaire
M_l	Masse molaire de l'espèce l
p	Pression
p_0	Pression de base (background pressure)
$\tilde{p}$	Pression de perturbation
$\vec{q}_r$	Vecteur de flux de chaleur radiatif
$\dot{q}$	Taux de dégagement de chaleur par unité de volume
$\Re$	Constante des gaz parfaits
s	Taux massique de consommation d'O ₂ par unité de consommation de carburant
$\vec{s}$	Vecteur unitaire de la direction de l'intensité radiative
t	Temps
T	Température
$\vec{u}$	Vecteur vitesse
u, v, w	Vitesses selon les directions x, y et z

$\vec{x}$	Vecteur de position
Y_l	Fraction massique de l'espèce l
z	Hauteur
Z	Fraction de mélange
δt	Pas de temps
$\delta x, \delta y, \delta z$	Dimensions des cellules selon les directions x, y et z
Φ	Rapport de mélange
κ	Coefficient d'absorption
ν_l	Coefficient stoechiométrique de l'espèce l
ρ	Densité
ρ_∞	Densité de l'air ambiant
τ	Tenseur des contraintes visqueuses

LISTE DES ANNEXES

ANNEXE A	Fichiers d'entrée des simulations	107
A-1 :	Fichier d'entrée – conteneur sans fuites.....	107
A-2 :	Fichier d'entrée – conteneur avec fuites	109
A-3 :	Fichier d'entrée – conteneur avec fuites (maillage fin)	111
ANNEXE B	Paramètres utilisés par FDS lors des simulations.....	113
B-1 :	Propriétés de l'acier	113
B-2 :	Réaction de combustion du méthane	113
B-3	Réaction modifiée de combustion du méthane.....	113
ANNEXE C	Variables critiques compatibles avec le paramètre NOHR	114
C-1	Variables critiques compatibles avec le paramètre NOHR.....	115

INTRODUCTION

Depuis aussi longtemps que l'on puisse se rappeler, les êtres humains ont toujours eu certaines difficultés à maîtriser le feu. Une des principales manifestations de cette inaptitude sont les incendies, qui tuent en moyenne quatre-vingts personnes par année au Québec seulement [1]. Au Canada et au Québec, l'on recense un nouvel incendie à toutes les trente minutes environ [2] et ceux-ci causent plus de onze milliards de dollars en pertes directes et indirectes chaque année [3]. Même si chaque incendie possède un potentiel de destruction qu'on ne peut négliger, tous les incendies ne présentent pas les mêmes risques par rapport aux vies humaines et aux dommages structurels des bâtiments. L'incendie nocturne d'un entrepôt de solvants, bien qu'il présente de nombreux dangers pour les services d'incendies et pour la structure, ne met normalement pas la vie de citoyens en danger. D'un autre côté, un incendie déclaré dans la cuisine d'une maison unifamiliale n'offre habituellement pas les mêmes défis aux pompiers mais menace beaucoup plus sérieusement la vie des occupants.

Ainsi, de tous les types d'incendies, ceux impliquant une ou plusieurs explosions sont sans doute les plus redoutés par les services de lutte aux incendies. Les effets destructeurs de ce type d'incendie sont bien connus et même parfois répertoriés [4]. Évidemment, il existe plusieurs sources d'explosions durant les incendies, qu'il s'agisse de contenants sous pression ou de divers produits chimiques explosifs. Il existe de plus une source d'explosion plus rare, mais aussi plus subtile et plus sournoise, le «backdraft», aussi appelé «retour de flamme» (ces deux termes seront utilisés sans distinction). Ce phénomène, bien connu des services d'incendies, est subtil en ce sens qu'il ne nécessite pas de contenant ou d'espèces chimiques inhabituelles; et peut être qualifié de sournois car il ne se manifeste généralement que lorsque les pompiers entrent dans l'édifice où l'incendie fait rage.

Backdraft : définition et scénario

Un backdraft consiste en un événement transitoire résultant en une explosion qui se produit lorsque l'on introduit de l'air frais dans une pièce peu ou pas ventilée où il y a eu combustion durant une certaine période. Il existe quelques définitions de ce phénomène, la plus apte sans doute étant celle proposée par le National Fire Protection Association (NFPA), que l'on traduit de la façon suivante : «L'explosion ou la combustion rapide des gaz chauds se produisant lorsque de l'oxygène est introduit dans un édifice qui n'a pas été ventilé de façon appropriée et où il existe un manque d'oxygène dû au feu. » Il a souvent été mentionné qu'il aurait été préférable de remplacer les termes «gaz chauds» par «produits de pyrolyse» [5,6], les produits de pyrolyse étant les gaz combustibles qui sont éjectés de la surface d'une matière inflammable lorsque cette matière atteint une température suffisante. Il existe toutefois certains produits de combustion, comme le monoxyde de carbone, qui sont inflammables et qui pourraient donc produire des backdrafts. Malgré cela, il a été conclu lors d'expériences menées par Sutherland [7] que le combustible nécessaire au backdraft ne pouvait être du monoxyde de carbone, à cause de sa faible concentration lors des explosions. On en arrive donc à la conclusion que, dans les scénarios étudiés, ce sont des hydrocarbures issus de la pyrolyse, et non des produits de combustion, qui servent de carburant aux backdrafts. Une définition plus précise devrait donc inclure les termes «produits de pyrolyse», mais les opinions en ce sens divergent toujours.

Voici maintenant un scénario typique d'incendie menant à un retour de flamme. Considérons tout d'abord un feu à l'intérieur d'une pièce fermée où la circulation des gaz entre la pièce et l'extérieur est limitée aux fuites dans les interstices des portes, fenêtres, etc. Alors que le feu brûle, la limite entre la couche chaude près du plafond et la couche froide près du sol descend jusqu'au niveau des flammes. Lorsque les produits de combustion de la couche chaude entourent les flammes, le manque d'oxygène provoque une combustion incomplète et certains produits de pyrolyse demeurent imbrûlés. À ce stade, l'incendie est considéré comme étant sous-ventilé. Ces produits de pyrolyse

imbrûlés viennent donc s'ajouter aux produits de combustion et l'apport en oxygène à la flamme continue de diminuer. Alors que le manque d'oxygène provoque une augmentation de la production des produits de pyrolyse, l'atmosphère devient de plus en plus riche en carburant et de plus en plus pauvre en oxygène. Il importe à cet instant qu'une flamme ou une braise persiste dans la pièce afin de servir de source d'ignition au retour de flamme. Considérons maintenant qu'une nouvelle source de ventilation est alors créée par le fracassement d'une fenêtre ou l'ouverture d'une porte. Il se produit alors un échange au niveau de l'ouverture : les gaz chauds s'écoulent vers l'extérieur par le haut de l'ouverture et l'air froid de l'extérieur pénètre dans la pièce par la partie inférieure de l'ouverture. Ce phénomène, appelé courant de gravité («gravity current») est un élément essentiel aux backdrafts et a fait l'objet de plusieurs études [8,9,10,11,12,13]. À l'interface entre les écoulements entrant et sortant, l'air froid et les gaz chauds se mélangent, créant une région inflammable qui se propage depuis l'ouverture jusqu'à la source d'ignition. Une fois ce mélange inflammable allumé, la flamme turbulente produite progresse à rebours dans la zone inflammable vers la source de ventilation provoquant un mélange additionnel des gaz chauds et de l'oxygène contenu dans l'air. La déflagration produite à l'intérieur de la pièce crée une onde de pression qui permet d'expulser une partie des produits de pyrolyse à l'extérieur, et ces produits se consomment alors formant la boule de feu caractéristique aux backdrafts. Il apparaît donc qu'un backdraft consiste en une série d'événements : l'accumulation de produits de pyrolyse dans un environnement sous-ventilé, l'ouverture d'une source de ventilation, la propagation de l'air frais par un courant de gravité et le mélange des gaz qui s'en suit, l'ignition de ce mélange inflammable et finalement la propagation rapide de cette flamme vers l'extérieur de la pièce. La figure 0.1 illustre schématiquement les étapes du développement d'un retour de flamme, depuis la présence d'un environnement riche en carburant et pauvre en oxygène jusqu'à la détonation finale.

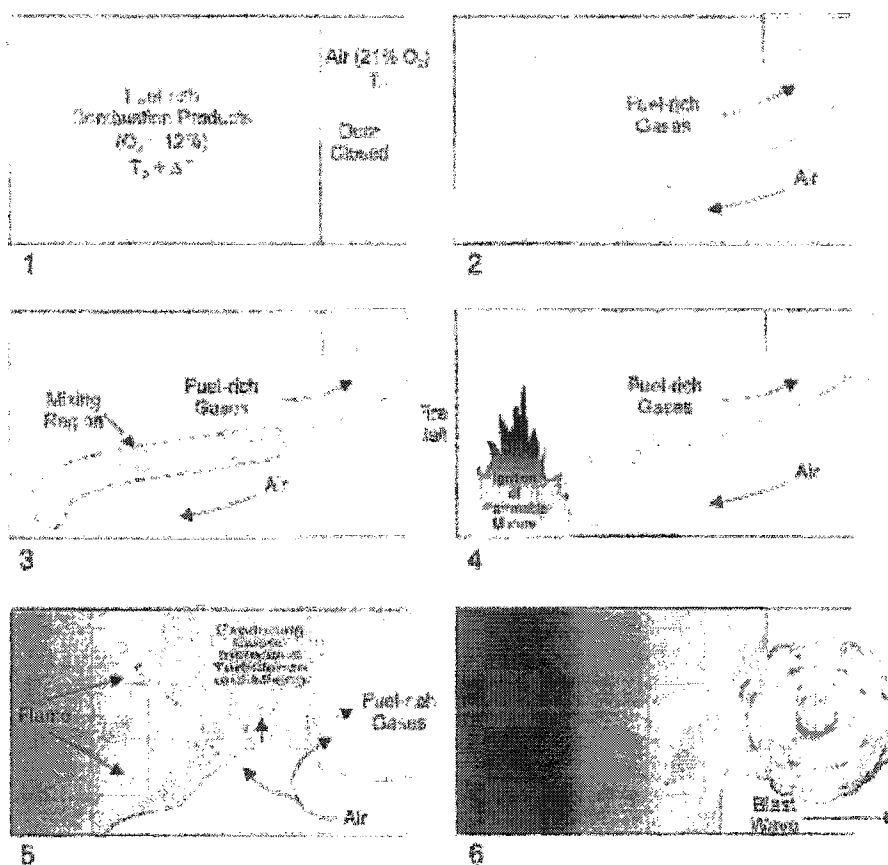


Figure 0.1 : Schéma du développement d'un retour de flamme

Motivations derrière cette recherche

Malgré qu'il n'y ait pas de banque de données nationale ou internationale répertoriant les incendies qui ont engendré un retour de flamme, il existe un bon nombre de rapports décrivant ce type d'événements [14,15,16]. Ces rapports nous permettent tout d'abord de constater que les cas de backdraft sont assez rares, un pompier y fera face peut-être seulement une ou deux fois au cours de sa carrière [17]. D'un autre côté, les conséquences des backdrafts sont aussi dramatiques que ceux-ci sont rares. Un important retour de flamme peut, comme le mentionne un pompier d'expérience, projeter un pompier de l'autre côté de la rue; les éclats de verre et de métal peuvent décapiter un pompier; les flammes accompagnant l'explosion peuvent causer de sérieuses brûlures et l'explosion peut causer l'effondrement des murs, partitions et rideaux d'aciers, écrasant

les pompiers sous eux [17]. Les édifices et les pompiers font donc face à de graves conséquences et même si les manuels d'entraînement des pompiers expliquent les signes précurseurs des backdrafts [6,15,18], ceux-ci ne sont généralement pas observés par les pompiers ou même ignorés lors de certains cas rapportés [15]. Dans ce contexte, la simulation numérique précise des retours de flamme offre une alternative pour acquérir une meilleure compréhension du phénomène et ainsi réduire leur impact en améliorant la formation des pompiers.

D'une manière générale, les retours de flamme sont aussi intéressants du fait qu'ils sont issus d'un type d'incendie très courant mais très mal compris et encore plus difficilement simulable numériquement : les incendies sous-ventilés. Au Canada, les incendies sous-ventilés représentent environ 23% de tous les incendies d'édifices à bureaux [19]. Une revue littéraire effectuée en 1975 par Croft [4] sur les incendies des soixante-dix dernières années impliquant des explosions comportait, parmi d'autres, la conclusion suivante : un grand nombre de pompiers furent tués lors d'explosions impliquant des feux couvant («smoldering fires») parce que les pompiers sont entrés dans l'édifice croyant que le feu avait été supprimé ou qu'il s'était éteint de lui-même à cause d'un manque d'oxygène.

Jusqu'à ce jour, aucun logiciel de simulation d'incendie n'a eu la prétention de prédire correctement les incendies sous-ventilés, principalement à cause des modèles de combustion existants. Il serait donc intéressant de pouvoir disposer d'un logiciel permettant de simuler de tels incendies, ce qui élargirait de façon significative le domaine d'application de la simulation d'incendie par ordinateurs. Les objectifs du présent travail consistent simplement à explorer différentes techniques et algorithmes permettant d'améliorer divers aspects de la simulation des backdrafts avec Fire Dynamics Simulator v3.10, un des logiciels de simulation d'incendie les plus avancés dont le code source est accessible gratuitement à l'ensemble de la communauté scientifique.

Méthodologie

Afin de tenter d'améliorer les techniques de simulation des retours de flamme et des incendies sous-ventilés en général, deux expériences de backdraft menées par Gojkovic [20] seront simulées à l'aide du logiciel Fire Dynamics Simulator (FDS) version 3.10 [33,34] développé par le National Institute for Standards and Technology (NIST) aux États-Unis. Les résultats (qualitatifs et quantitatifs) seront comparés de manière à juger si les résultats numériques se rapprochent ou non des résultats expérimentaux. Puisqu'il s'agit d'améliorer la représentation des backdrafts, une première série de simulations sera effectuée afin de voir quelles sont les capacités actuelles du logiciel en termes de représentativité des résultats expérimentaux et du comportement général des backdrafts. Ces simulations serviront de base de comparaison et permettront d'évaluer l'évolution de la qualité de la représentation des backdrafts.

Une fois les capacités évaluées et la validité des résultats analysée, les hypothèses suivantes seront étudiées :

- La modification de la production de dioxyde de carbone par le biais des paramètres réactionnels permettra d'obtenir des concentrations appropriées pour cette espèce.
- La présence d'un courant de gravité pourra être rétablie par l'arrêt complet de la combustion durant la période où le courant de gravité progresse vers la source d'ignition.

CHAPITRE 1

REVUE HISTORIQUE ET LITTÉRAIRE

Il n'est pas rare que l'usage du feu soit évoqué comme étant une des plus grandes réussites de la race humaine. Depuis que l'homme connaît le feu, il a cherché à le comprendre et à le maîtriser, plus souvent qu'autrement sans grand succès. Durant la préhistoire, le feu relevait presque du mythe et conférait à celui qui le maîtrisait un statut social proche du sorcier ou du chaman. La première théorie du feu apparût durant l'antiquité, lorsque Empédocle (IV^e siècle av. J.-C.) émit la théorie proposant que l'univers soit composé de quatre éléments fondamentaux : l'air, la terre, l'eau et le feu. Aristote renforça cette théorie en l'appuyant et en attribuant des caractéristiques aux éléments fondamentaux, ce qui lui permit d'expliquer plusieurs phénomènes physiques. Cette théorie d'Aristote fut très largement adoptée grâce à sa renommée inébranlable et il fallut ensuite attendre plus de 2000 ans pour voir apparaître une nouvelle théorie générale sur la combustion.

Au début du XVIII^e siècle, l'Allemand Georg Ernst Stahl proposa, pour expliquer la nature du feu, la théorie du phlogistique. Selon Stahl, le phlogistique était présent dans toutes les matières combustibles et s'en trouvait libéré par la combustion, à la condition qu'il y ait de l'air pour l'entraîner hors de la matière. Ce concept, qui plût beaucoup aux chimistes lors de son apparition, ne dura que quelques décennies, et mourut avec la naissance de la chimie dite moderne.

Après la découverte de l'oxygène par le Suédois C.W. Scheele et le Britannique J. Priestley vers 1784, ce fut Lavoisier qui, à la fin du 18^e siècle, établit les bases de la chimie moderne en formulant les tout premiers bilans réactionnels et en prouvant que la présence d'oxygène était nécessaire à la combustion. Il écarta la théorie du phlogistique en prouvant que celui-ci devait avoir un poids négatif, ce qui était déjà inacceptable à l'époque. Ce fut ensuite Faraday qui, au milieu du siècle suivant, établit les bases de la

dynamique du feu lorsqu'il présenta devant le «Royal Institution of Great Britain» une série de lectures intitulée «The chemical history of a candle». Cette série de six lectures portait entre autres sur l'effet capillaire, la radiation, les réactifs et les produits de combustion ainsi que sur la liquéfaction du carburant. Il fallut ensuite attendre les années'40 pour voir apparaître les premières équations relatives aux panaches de feu («fire plume») et ce ne fut que dix ans plus tard que Morton, Taylor et Turner [21] formulèrent la première équation qui combinait l'entraînement d'air chaud, la température et la vitesse du panache.

1.1 Bref historique de la simulation d'incendie

La science de la simulation d'incendies par ordinateurs est vieille d'à peine trente ans et son évolution est reliée de très près à celle de l'informatique. Différents types de modèles ont vu le jour, du plus simple modèle nodal où chaque pièce modélisée est représentée par un nœud à l'intérieur d'un réseau, jusqu'aux modèles de champs pouvant utiliser plusieurs millions de cellules pour représenter une seule pièce. Il existe de plus un autre type de modèle qui ne fait pas partie de la présente étude, servant à effectuer l'analyse des risques entourant les incendies dans un immeuble. Principalement utilisés pour analyser la conformité d'un immeuble aux codes et règlements en vigueur, ces modèles utilisent à la fois certains concepts issus des modèles zonaux, conjugués à des analyses statistiques ainsi qu'à des modèles d'évacuation des occupants. Parmi les modèles de ce type notons la présence de «FiRECAM», développé par le Conseil National de Recherche du Canada (CNRC). On retrouve aussi dans cette classe de modèle les logiciels «CRISP», «RISK-COST», «FRAME» et «RiskPro».

1.1.1 Premiers modèles

Depuis les développements apportés par Morton, Taylor et Turner, la compréhension du feu progressa rapidement et à peine quelques années plus tard, le Japonais Kawagoe [22] jeta les bases des modèles dits zonaux. Il constata en effet qu'au début d'un incendie dans une pièce, une couche de fumée assez nette était créée près du plafond alors que

l'air situé sous cette couche demeurait relativement froid et exempt de fumée. Au milieu des années'70, Edward Zukoski [23] développa parmi les premières équations de panaches de feu qui allaient être utilisées dans un modèle zonal. Les travaux de Quintiere [24,25] furent aussi précurseurs des modèles zonaux actuels. Il concentra ses efforts sur les variables à calculer et sur les algorithmes qui permettaient de les calculer. Ce fut donc à partir de ses travaux et de ceux de Zukoski que furent créés les premiers modèles zonaux. Parmi ceux-ci l'on retrouve le «Harvard Model» de Emmons, le «IITRI Model» de R. Pape et le modèle «ASET» de Cooper. Ce type de modèle a depuis progressé jusqu'à inclure plusieurs pièces inter reliées, la ventilation forcée et la prédiction de la concentration de diverses espèces chimiques.

1.1.2 Modèles de champs

Les modèles de champs (ou modèles CFD) représentent la suite logique dans l'évolution de la simulation d'incendies par ordinateurs. Les modèles utilisant la mécanique des fluides assistée par ordinateurs (MFAO, traduction de CFD «Computational Fluid Dynamics») divisent l'espace physique en milliers, voire millions d'éléments pour appliquer à chacun les lois de conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie. Lorsqu'on utilise la MFAO pour simuler la combustion, il faut ajouter à ces lois la conservation et la transformation des espèces chimiques. Malgré que ces modèles fournissent des détails sur l'évolution d'un incendie qui ne pourraient jamais être obtenus avec un modèle zonal, ces modèles nécessitent beaucoup plus de ressources et d'efforts que les modèles plus simples. Le seul coût des licences des logiciels commerciaux, qui peut aller jusqu'à plusieurs milliers voire dizaines de milliers de dollars par année, peut freiner les ardeurs des scientifiques les plus enthousiastes. De plus, les modèles de champs requièrent des ressources informatiques très importantes, ce qui limite souvent leur usage aux ordinateurs de pointe. Les utilisateurs des modèles de champs doivent de plus être très attentifs à la préparation des simulations car celles-ci peuvent être particulièrement sensibles aux variations des paramètres de ventilation, de combustion, au maillage, etc.. Ces modèles produisent de plus une grande quantité de données

numériques et certains efforts doivent être faits pour visualiser et interpréter correctement ces résultats.

Il existe plusieurs types de modèles de champs, variant dans leurs façons de traiter la turbulence, la combustion, la radiation, etc. Le premier modèle CFD développé, intitulé PHOENIX, apparût au début des années'80 après plusieurs années de recherche au CHAM (Concentration, Heat And Momentum Ltd.). Avec le temps, les capacités informatiques ont progressé et ont permis à ce modèle d'évoluer et à d'autres de faire leur apparition. Certains modèles actuels permettent même de résoudre la turbulence directement à partir des équations de Navier-Stokes, (méthode DNS) sans avoir recours à des simplifications ou à des moyennes, malgré que ceci demande des ressources informatiques considérables qui limitent grandement leur utilité. Il existe un nombre restreint de logiciels CFD permettant de simuler divers aspects relatifs aux incendies, validés à différents degrés, et démontrant divers niveaux de complexité. Parmi les modèles les plus récents et les plus complets, on retrouve STAR-CD, CFX, FLUENT, qui sont des logiciels CFD généraux ainsi que SMARTFIRE, SOLVENT, JASMINE, SOFIE, et FDS, qui sont des logiciels orientés spécifiquement vers la simulation d'incendies. Les modèles mathématiques utilisés et les capacités de la dernière version de FDS (FDS v3.10 au moment de la rédaction) feront l'objet d'un chapitre subséquent.

1.2 Revue littéraire

La science de la simulation d'incendies par ordinateurs étant relativement jeune, il n'existe pas une très grande quantité de publications spécifiques aux simulations de backdrafts et d'incendies en milieu sous-ventilé. Une quantité appréciable d'études expérimentales sur les retours de flamme et autres phénomènes reliés sont toutefois disponibles, ainsi que quelques expériences numériques. Il existe de plus certaines études de cas réels, comprenant une analyse des causes et des méthodes de combat des backdrafts.

1.2.1 Études de cas

Au cours des vingt-cinq dernières années, on compte quelques ouvrages décrivant les circonstances entourant un retour de flamme lors d'un incendie réel. Le travail de Croft [4] fut sans aucun doute un des travaux les plus complets répertoriant les incendies avec explosions au cours du XX^e siècle. L'auteur démontre entre autre que les backdrafts sont une cause importante de décès parmi les pompiers, et révèle certains des effets dévastateurs des retours de flamme. Plus récemment, V. Dunn, un ancien pompier de New York, rapportait dans un article les événements entourant un backdraft ayant blessé au moins deux pompiers [15]. Un second pompier de New York, T. Dunne, écrivit un article à propos des conséquences d'un backdraft survenu quarante-cinq minutes après l'arrivée des pompiers sur la scène de l'incendie [16]. Un ouvrage supplémentaire pourrait être inclus ici malgré qu'il ne rapporte pas de cas précis de retour de flamme. L'ouvrage de R. Chitty, «A Survey of Backdraft» [6], contient une grande variété d'informations sur les backdrafts. Parmi celles-ci on retrouve les signes précurseurs, les techniques de combat et les phénomènes physiques et chimiques reliés aux retours de flamme.

1.2.2 Études expérimentales

La première étude d'envergure sur les retours de flammes fut celle de C.M. Fleischmann de l'université de Californie à Berkeley en 1993. Son ouvrage, intitulé «Backdraft Phenomena» [5] explique la majorité des phénomènes reliés aux backdrafts, comme le courant de gravité et l'accumulation de produits de pyrolyse. L'ouvrage précurseur de Fleischmann utilise un conteneur pour créer des backdrafts contrôlés et illustre pour la première fois l'évolution de la température, des espèces chimiques et de la pression au cours d'un backdraft, en plus de fournir une analyse numérique et expérimentale approfondie du courant de gravité. Sont issus de cet ouvrage deux articles écrits par C.M. Fleischmann, P.J. Pagni et R.B. Williamson, soient «Preliminary Backdraft Experiments» [12] et «Quantitative Backdraft Experiments» [13]. Une étude similaire à celle de Fleischmann, fut réalisée en 1995 par I.B. Bolliger de l'université de Canterbury en

Nouvelle-Zélande [26]. La principale différence entre ces deux études réside dans les dimensions du conteneur utilisé pour effectuer les expériences. Contrairement à Fleischmann qui utilisa un conteneur de format réduit, Bolliger utilisa un conteneur dont les dimensions se rapprochaient beaucoup des dimensions d'une petite pièce normale. Une autre étude sur les backdrafts fut réalisée à l'université de Canterbury par B.J. Sutherland afin d'identifier un mécanisme pouvant expliquer les backdrafts [7]. Un aspect intéressant de cette étude réside dans le fait que les expériences furent menées avec du bois comme combustible et non avec du méthane comme lors des expériences de Fleischmann et Bolliger.

Deux ouvrages analysent la possibilité d'atténuer ou d'empêcher les backdrafts à l'aide de lances ordinaires ou à brume d'eau («water mist»). Le premier, réalisé par W.G. Weng et W.C. Fan en 2002, utilise un compartiment réduit et une variété de types et de grandeurs d'ouvertures pour étudier l'extinction des backdrafts à l'aide de brume d'eau [27]. La seconde étude fut conduite sur un navire de la marine américaine et démontra entre autres l'importance de la notion de région d'inflammabilité pour prédire la possibilité des retours de flamme [28].

Finalement, D. Gojkovic de l'université Lund en Suède réalisa en 2000 l'ouvrage intitulé «Initial Backdraft Experiments» [20], qui sert de base de comparaison pour la présente étude. Une série de treize expériences de retour de flamme alimentées au méthane furent menées dans un conteneur naval standard. Parmi les paramètres mesurés figurent la température à différents endroits, le ratio des différentes espèces chimiques et la pression.

1.2.3 Études numériques

Puisque aucun logiciel de simulation d'incendies n'a de fonctionnalité spécifique pour analyser les backdrafts ou les incendies sous-ventilés, très peu d'études ont été réalisées sur le sujet. Une des rares simulations numériques d'un backdraft disponible dans la littérature a été effectuée par R.W. Bukowski [14] avec le modèle zonal CFAST [29]

développé par le NIST. Le travail tente de répliquer les conditions qui ont mené à un backdraft d'une durée inhabituelle de six minutes et demie. Cette étude a été commandée par le service d'incendies de la ville de New York (FDNY) suite au décès de trois de leurs pompiers dans cet incident. L'étude avec CFAST démontre que des niveaux suffisants de combustibles non brûlés ont pu être atteints pour permettre un retour de flamme d'une telle durée.

Une autre étude, nous provenant de l'University of Science and Technology of China, entreprend, principalement à partir d'équations pour modèles zonaux, de formuler un modèle mathématique du phénomène de retour de flamme [30]. Les concepts de dynamique non linéaire et de théorie de la catastrophe sont mise de l'avant pour caractériser les backdrafts. Leurs travaux en viennent à relier la concentration en gaz combustibles de la couche de fumée chaude et la distance de propagation de la flamme à une quantité dépendante, la température de la couche de fumée chaude.

En Suède, D. Gojkovic de l'université Lund est responsable d'une étude numérique portant sur les diverses techniques d'attaque des retours de flamme [31]. Son ouvrage identifie à l'aide du logiciel SOFIE [32] les régions d'inflammabilité présentes dans un appartement de trois pièces soumis à différentes techniques d'extinction utilisées par les services d'incendies suédois. Cette étude analyse donc les effets des techniques de combat des incendies sur le courant de gravité et sur le processus de mélange des gaz chauds et de l'air frais qui en résulte.

Il existe plusieurs autres études portant sur les courants de gravité présents dans les incendies et dans les situations de backdraft. La majorité de celles-ci simulent le courant de gravité qui se produit lorsque l'on introduit de l'eau salée dans un réservoir rempli d'eau fraîche, situation tout à fait analogue avec le courant de gravité typique aux incendies. Certains d'entre eux présentent les modèles hydrodynamiques utilisés pour simuler le courant de gravité. Ces ouvrages [8,9,10,11] font tous appel à des simulations d'eau salée pour valider leurs résultats, ainsi que pour analyser la progression des

courants de gravité, le mélange qui s'y produit et l'influence de la géométrie de l'ouverture sur le courant de gravité.

CHAPITRE 2

SIMULATIONS D'INCENDIES AVEC FDS V3.10

Ce chapitre a pour but d'expliquer de manière générale le fonctionnement théorique du logiciel Fire Dynamics Simulator v3.10 développé par le NIST. Il ne s'agit pas d'une analyse exhaustive des capacités et limites du logiciel mais plutôt une mise en contexte par rapport aux modifications subséquentes qui seront faites au logiciel. Les détails sur les modèles utilisés et les procédures d'utilisation de FDS sont disponibles dans le manuel d'utilisation [33] et le guide de référence [34] de FDS.

2.1 Concepts généraux de la MFAO et de FDS

Le logiciel FDS fait partie des outils de simulation qui utilisent la MFAO pour modéliser les écoulements de fluide thermiquement induits. Tel que mentionné précédemment, les outils de MFAO divisent l'espace en une grande quantité de petits volumes de contrôle pour y appliquer les équations fondamentales de conservation de la masse, de la quantité de mouvement, des espèces et de l'énergie. L'on résout alors ces équations pour chaque volume de contrôle, en assumant que tout l'espace occupé par ce volume de contrôle possède les mêmes propriétés, variant seulement en fonction du temps. Par exemple, si l'on observe la figure 2.1, chaque petit cube représente un volume de contrôle à l'intérieur duquel les propriétés (température, densité, vitesse, etc.) sont constantes. Lors de la résolution des équations, les propriétés de chaque volume de contrôle seront mises à jour à chaque pas de temps, et l'on obtiendra donc l'évolution des propriétés dans le temps pour l'ensemble du domaine de simulation. Cette simplification se rapproche de plus en plus de la réalité lorsqu'on réduit la grosseur des volumes utilisés, d'où l'intérêt des usagers d'employer des volumes de contrôles aussi petits que possible considérant les ressources informatiques disponibles.

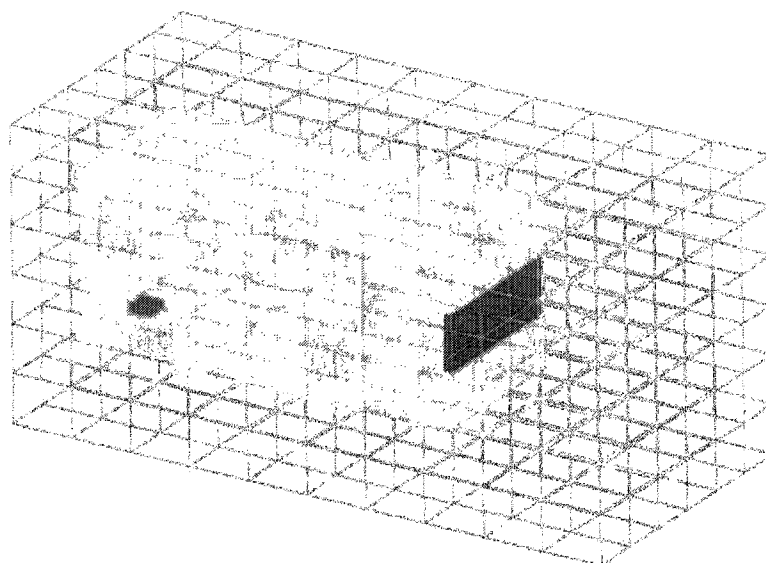


Figure 2.1 : Exemple de domaine de simulation et de volumes de contrôle

Avec FDS, la géométrie créée est obligatoirement rectilinéaire et orthogonale, tout comme le maillage (cf. figure 2.1), qui est composé de volumes de contrôle rectangulaires (parallélépipèdes rectangles). Ceci limite grandement la qualité de représentation des formes complexes, mais permet toutefois à FDS de résoudre les équations fondamentales beaucoup plus rapidement qu'un solveur utilisant des maillages complexes composés de tétraèdres, de pyramides et d'autres éléments non orthogonaux. Une fois la géométrie créée, les modèles de MFAO nécessitent que l'on prescrive d'autres paramètres telles que les conditions frontières, les conditions initiales et les propriétés des différentes surfaces. Dans FDS, il est donc nécessaire de prescrire de nombreux paramètres dont l'emplacement et l'intensité du feu initial, les propriétés des matériaux, les ouvertures vers l'extérieur, les conditions thermiques (flux de chaleur dégagé par une surface par exemple) et les conditions de vitesse (ventilation). Une fois ces conditions prescrites, le logiciel emploie ses différents modèles pour résoudre l'écoulement de fluide créé.

2.2 Modèles utilisés par FDS v3.10

La simulation d'écoulements de fluides thermiquement induits nécessite non seulement que l'on résolve les équations de conservation mais requiert de plus des modèles pour tenir compte de la combustion, de la radiation et de la suppression du feu par des agents externes. Les modèles n'étant pas modifiés dans cette étude, seuls les modèles hydrodynamiques, de combustion, d'extinction de flamme et de radiation seront révisés de manière globale. De plus, la méthode numérique utilisée pour résoudre les équations sera sommairement présentée.

2.2.1 Méthodes LES et DNS

Le logiciel FDS a été conçu de manière à pouvoir utiliser deux méthodes de résolution de la turbulence : la méthode LES («Large Eddy Simulation») [35,36] et la méthode DNS («Direct Numerical Simulation») [37,38]. La méthode DNS, telle que son nom l'indique, résout directement les termes dissipatifs (visqueux) alors que la méthode LES ne résout directement que la turbulence de grande échelle, modélisant les termes dissipatifs de plus petite échelle. La principale différence mathématique entre les deux méthodes réside dans l'expression de la viscosité, de la conductivité thermique et du coefficient de diffusion moléculaire. La méthode DNS approxime ces coefficients à partir de la théorie cinétique des gaz tandis que la méthode LES utilise le modèle de Smagorinsky [39] pour évaluer la viscosité, y reliant la conductivité thermique et la diffusivité moléculaire par les nombres de Prandtl, de Schmidt et du c_p . Les deux méthodes ont l'avantage indéniable de fournir une représentation spatiale et temporelle plus précise que celle obtenue par une méthode RANS («Reynolds Averaged Navier-Stokes»). Cette performance est toutefois tributaire d'une très grande exigence au point de vue informatique. En effet, les capacités informatiques actuelles et les contraintes de temps que l'on rencontre en industries limitent l'utilisation de la méthode DNS à des écoulements de petite taille et à de faibles nombres de Reynolds. La méthode LES, pour sa part, est envisageable pour la plupart des applications industrielles, malgré de long

temps de calcul. Il n'est en effet pas rare d'avoir à attendre quelques jours voire quelques semaines pour obtenir les résultats complets d'une simulation.

Le choix de l'une ou l'autre méthode dépend principalement de la résolution du maillage, des ressources informatiques disponibles et des objectifs poursuivis par la simulation. Si l'on désire simuler un phénomène de très petite échelle, il est alors possible d'avoir un maillage assez fin pour résoudre directement et de façon correcte la turbulence. Dans ce cas, l'utilisation de l'approche DNS s'avère être un choix judicieux. Or, s'il s'agit de simuler un incendie dans une maison, les capacités informatiques actuelles nous empêchent d'utiliser un maillage qui nous permettrait de résoudre directement les phénomènes de turbulence, de transport et de combustion. La méthode LES est alors toute indiquée. Comme le présent ouvrage ne traite que de phénomènes de moyenne ou grande échelle, seule la méthode LES fut employée.

Tel que mentionné précédemment, l'approche de la méthode LES consiste à résoudre directement les structures tourbillonnaires de grandes échelles, alors que les structures de petite échelle sont modélisées. Cette approche tire sa validité du fait que les structures tourbillonnaires de grandes échelles sont très différentes d'un écoulement à l'autre (forte influence de la géométrie) alors que les structures de petites échelles sont plus universelles et sont donc plus aptes à être modélisées. De plus, les structures de grandes échelles sont celles qui contiennent le plus d'énergie et qui sont responsables de la grande majorité du transport de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie dans l'écoulement, d'où l'importance de résoudre leur évolution avec précision.

Ainsi, lors de la résolution d'un écoulement turbulent à l'aide de l'approche LES, celui-ci est divisé en deux composantes : une composante de grande échelle dont l'évolution est résolue directement à partir des équations de Navier-Stokes, et une seconde composante constituée des structures de petites échelles. Ces petites échelles représentent la partie de l'écoulement qui ne peut être résolue par le maillage et qui doit donc être modélisée. Il

apparaît ainsi que la distinction entre les structures de grande et de petites échelles lors de la résolution numérique est directement reliée à la taille du maillage utilisé. Il est donc nécessaire d'avoir un maillage suffisamment fin pour capter l'ensemble des structures de grandes échelles, mais suffisamment grossier pour pouvoir résoudre l'écoulement avec les ressources informatiques disponibles. Le maillage utilisé pour la présente étude sera assujetti à cette analyse à la section 4.2.1.

2.2.2 Modèle hydrodynamique

Le modèle hydrodynamique utilisé par FDS implique une forme approximative des équations de Navier-Stokes modifiées pour les écoulements à basse vitesse thermiquement induits telles que développées par Rehm et Baum en 1978 [40]. Ces équations devront être résolues pour chaque volume de contrôle de volume Ω et de longueurs de côtés δx , δy et δz . Considérons maintenant les équations de conservation pour un mélange de gaz parfaits compressible :

Conservation de la masse :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \vec{u} = 0 \quad (1)$$

Conservation des espèces :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_l) + \nabla \cdot \rho Y_l \vec{u} = \nabla \cdot D_l \nabla Y_l + \dot{m}_l''' \quad (2)$$

Conservation de la quantité de mouvement :

$$\rho \left(\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + (\vec{u} \cdot \nabla) \vec{u} \right) + \nabla p = \rho \vec{g} + \vec{f} + \nabla \cdot \tau \quad (3)$$

Conservation de l'énergie :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h) + \nabla \cdot \rho h \vec{u} = \frac{Dp}{Dt} - \nabla \cdot \vec{q}_r + \nabla \cdot k \nabla T + \sum_l \nabla \cdot h_l \rho D_l \nabla Y_l \quad (4)$$

Ces équations utilisent la notation standard où ρ est la densité, $\vec{u}$ le vecteur vitesse, Y_l la fraction massique de l'espèce l , D_l le coefficient de diffusion de l'espèce l , $\dot{m}_l'''$ le taux de

variation massique de l'espèce l par unité de volume, p la pression, $\vec{f}$ les forces externes exercées sur le fluide, τ le tenseur des contraintes visqueuses, h l'enthalpie, $\vec{q}_r$ le vecteur de flux de chaleur radiatif, k la conductivité thermique et T la température.

On doit de plus ajouter à ces équations de conservation l'équation d'état des gaz parfaits appliquée à un mélange gazeux:

$$p = \rho \mathcal{R} T / M = \rho \mathcal{R} T \sum (Y_l / M_l) \quad (5)$$

où $\mathcal{R}$ est la constante des gaz parfaits et M_l est la masse molaire de l'espèce l .

C'est ici qu'apparaît la modification des équations de Rehm et Baum pour ne tenir compte que des écoulements à basse vitesse. La pression peut être décomposée en trois composantes : une pression de base, une composante hydrostatique et une perturbation induite par l'écoulement.

$$p = p_0 - \rho_\infty g z + \tilde{p} \quad (6)$$

où ρ_∞ est la densité de l'air ambiant, z est la hauteur et g est l'accélération gravitationnelle.

Dans la très grande majorité des scénarios d'incendies, la pression p_0 peut être considérée constante et les deux autres composantes sont relativement petites. Il est aussi normal d'assumer que pour un écoulement à faible vitesse, la densité et la température sont inversement proportionnelles. Il est donc possible d'approximer l'équation d'état en remplaçant p par p_0 ,

$$p_0 = \rho \mathcal{R} T / M = \rho \mathcal{R} T \sum (Y_l / M_l) \quad (7)$$

et on exécute la même substitution dans l'équation de l'énergie. Cette approximation, en éliminant les petites perturbations de pression, permet de ne pas tenir compte des ondes de pression voyageant à une vitesse de loin supérieure à ce que l'on attend d'un écoulement typique d'incendie. Cette technique d'approximation permet deux choses. Tout d'abord, comme il sera expliqué dans la section 2.2.6, elle permet d'augmenter le

pas de temps et deuxièmement, le nombre de variables dépendantes à résoudre dans le système est réduit de un, puisque la pression totale n'a plus à être calculée.

Il est à noter que l'équation de conservation de l'énergie n'est pas résolue numériquement comme telle mais les termes sources qu'elle contient seront utilisés dans l'expression de la divergence de l'écoulement. Comme le développement de cette expression sort du cadre de ce travail, celle-ci est donc présentée telle quelle et le lecteur est invité à consulter le guide de référence de FDS [34] pour plus de détails.

$$\nabla \cdot \vec{u} = \frac{1}{\rho c_p T} \left(\underbrace{\nabla \cdot k \nabla T}_1 + \underbrace{\nabla \cdot \sum_l \int c_{p,l} dT \rho D_l \nabla Y_l}_2 - \underbrace{\nabla \cdot \vec{q}_r}_3 + \underbrace{\dot{q}'''}_4 \right) + \underbrace{\left(\frac{1}{\rho c_p T} - \frac{1}{p_0} \right) \frac{dp_0}{dt}}_5 \quad (8)$$

On peut toutefois dire que cette expression possède cinq termes principaux. Le premier se rapporte à la conduction thermique, le deuxième à la diffusion des espèces, les troisième et quatrième se rapportent au transfert de chaleur par radiation et à la production de chaleur et le cinquième, habituellement nul, à la variation de pression.

2.2.3 Modèle de combustion

Il existe deux modèles de combustion dans FDS. Pour la méthode DNS, lorsque le maillage est assez fin pour résoudre la diffusion de l'oxygène et du carburant, il est possible d'utiliser une réaction à taux fixe (basé sur l'équation d'Arrhénius). Ce qui nous intéresse plutôt dans cette étude est le modèle qui doit être utilisé avec la méthode LES, c'est-à-dire le modèle de fraction de mélange. Ce modèle, issu du modèle de flammelette, est basé sur l'hypothèse que la combustion est régie par le mélange des espèces et que la réaction de combustion est infiniment rapide. Le scalaire adimensionnel Z dénote la fraction du mélange gazeux qui était à l'origine du carburant, et varie donc de $Z=0$ (air pur) jusqu'à $Z=1$ (carburant pur). Si l'on considère la réaction typique de combustion :



Il est possible de relier les taux massiques de consommation des réactifs à partir de leurs coefficients stoechiométriques et de leurs masses molaires :

$$s = \frac{\dot{m}_O'''}{\dot{m}_C'''} = \frac{\nu_O M_O}{\nu_C M_C} \quad (9)$$

La fraction de mélange Z est alors définie de la façon suivante :

$$Z = \frac{sY_C - (Y_O - Y_O^\infty)}{sY_C' + Y_O^\infty} \quad (10)$$

Où Y_C' correspond à la fraction de carburant dans le jet de carburant (habituellement égal à un) et où Y_O^∞ correspond à la fraction massique ambiante d'oxygène (environ 0,23).

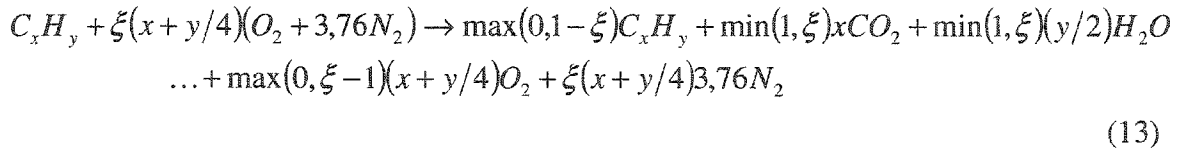
Puisque la réaction chimique de combustion est considérée infiniment rapide, le carburant et l'oxydant ne peuvent donc pas co-exister. Comme la consommation d'oxygène et de carburant sont reliés par la variable s , il est possible de définir une valeur de Z où l'oxygène et le carburant sont détruits au même rythme, c'est-à-dire où :

$$sY_C = Y_O \quad (11)$$

En remplaçant dans l'équation pour Z , ceci définit une surface de flamme où $Z = Z_f$:

$$Z_f = \frac{Y_O^\infty}{sY_C' + Y_O^\infty} \quad (12)$$

Les relations entre la valeur de la fraction de mélange Z et les fractions des différentes espèces (appelées relations d'état) sont obtenues en reliant la variable Z au paramètre de ventilation ξ de la réaction idéale de combustion d'un hydrocarbure :



Il en résulte un ensemble de relations d'états qui donnent la fraction massique de chaque espèce en fonction de la variable Z . Les relations d'état pour la réaction idéale de combustion du méthane sont illustrées à la figure 2.2.

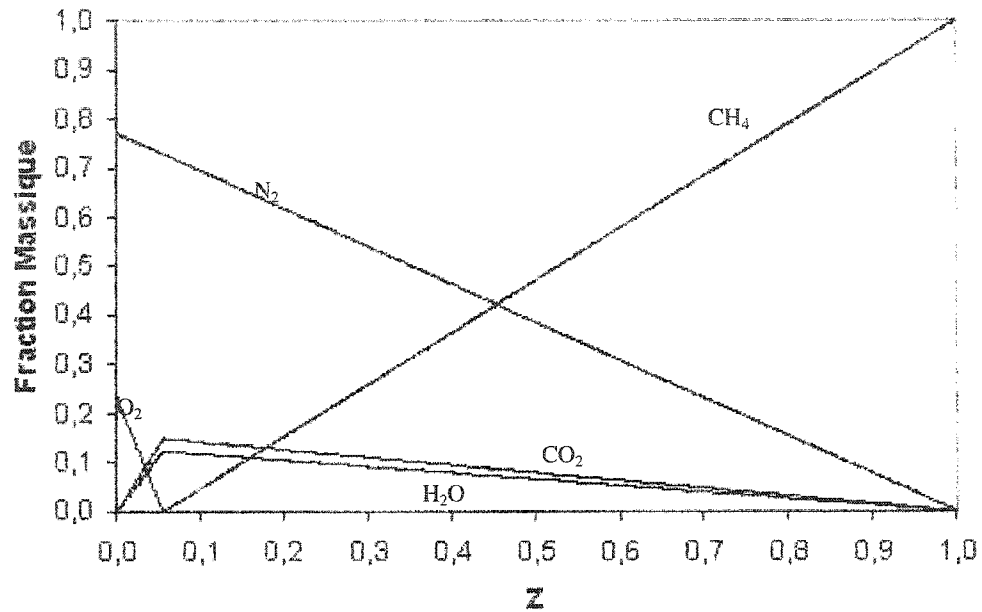


Figure 2.2 : Relations d'état pour le méthane

Il est à noter que la fraction de mélange satisfait la loi de conservation :

$$\rho \frac{DZ}{Dt} = \nabla \cdot \rho D \nabla Z \quad (14)$$

En ce qui concerne le dégagement de chaleur produit par la réaction de combustion, l'approche de calcul consiste simplement à relier le dégagement de chaleur à la consommation d'oxygène. En effet, si l'on part de l'équation de Huggett [41]:

$$\dot{q}''' = \Delta H_o \dot{m}_o''' \quad (15)$$

et de l'équation de conservation de l'oxygène :

$$\rho \frac{DY_o}{Dt} = \nabla \cdot \rho D \nabla Y_o + \dot{m}_o''' \quad (16)$$

il est possible de former une expression de la consommation d'oxygène par unité de surface de flamme :

$$-\dot{m}_o''' = \left. \frac{dY_o}{dZ} \right|_{Z=Z_f} \rho D \nabla Z \cdot \vec{n} \quad (17)$$

On remarque qu'il s'agit en fait de calculer comment varie la fraction massique d'oxygène au niveau de la surface de flamme pour en extraire la consommation

d'oxygène. Numériquement, le taux de dégagement de chaleur par unité de volume est calculé en localisant la surface de la flamme ($Z = Z_f$) et en calculant la consommation d'oxygène par unité de surface de la flamme. Le dégagement de chaleur associé à cette consommation d'oxygène est ensuite réparti dans les cellules coupées par la flamme.

2.2.4 Modèle d'extinction de flamme

Un modèle d'extinction de flamme a été implémenté à FDS de manière à évaluer si le milieu environnant la flamme est approprié pour soutenir la combustion. Ce modèle détermine si la combustion a lieu ou non en fonction de la concentration d'oxygène et de la température, indépendamment de la réaction de combustion. La figure 2.3 illustre la limite entre les régions propres à la combustion et celles qui ne le sont pas.

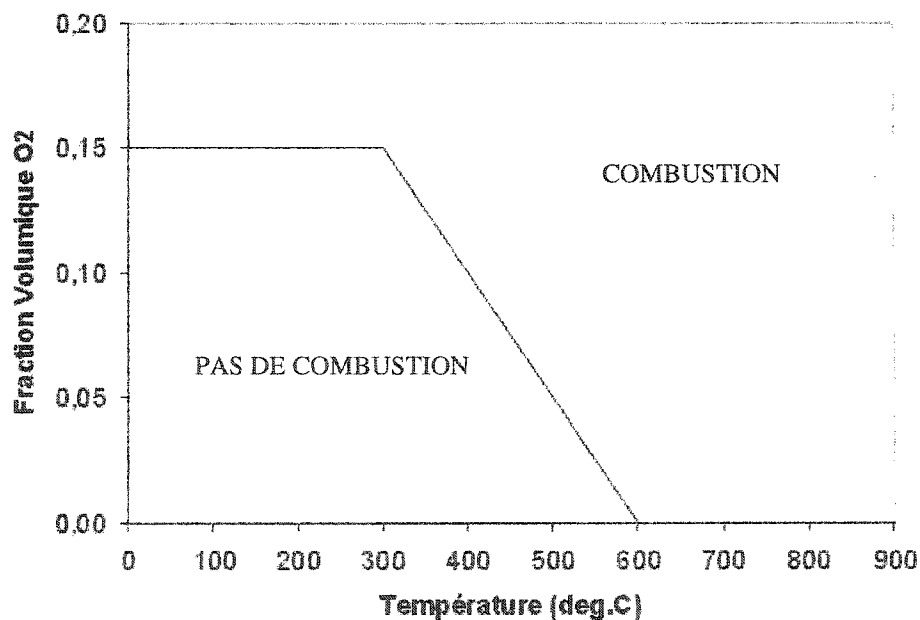


Figure 2.3 : Diagramme du modèle d'extinction de flamme

2.2.5 Modèle de radiation

Afin de résoudre le transport radiatif dans les gaz, l'équation de transfert radiatif pour milieux non diffusants est utilisée en divisant le spectre de radiation en six bandes spécifiques :

$$\vec{s} \cdot \nabla I_n(\vec{x}, \vec{s}) = \kappa_n(\vec{x}) (I_{b,n}(\vec{x}) - I(\vec{x}, \vec{s})), \quad n = 1 \dots 6 \quad (18)$$

Où I_n correspond à l'intensité totale sur la bande n et κ_n est le coefficient d'absorption moyen de la bande n . Le terme source $I_{b,n}$ est calculé comme une fraction de la radiation d'un corps noir [42] :

$$I_{b,n} = F_n(\lambda_{\min}, \lambda_{\max}) \sigma T^4 / \pi \quad (19)$$

La discrétisation de l'équation de transfert radiatif est obtenue en intégrant l'équation (18) sur une cellule du maillage V_{ijk} et sur un angle de contrôle $\delta\Omega^l$:

$$\int_{\Omega^l V_{ijk}} \vec{s} \cdot \nabla I(\mathbf{x}, \mathbf{s}) dV d\Omega = \int_{\Omega^l V_{ijk}} \kappa(\mathbf{x}) [I_b(\mathbf{x}) - I(\mathbf{x}, \mathbf{s})] dV d\Omega \quad (20)$$

À l'aide du théorème de la divergence, l'intégrale volumique du côté gauche de l'équation (20) est remplacée par une intégrale de surface appliquée aux faces de la cellule du maillage. De plus, si l'on considère que l'intensité de radiation $I(\mathbf{x}, \mathbf{s})$ est constante sur chaque face d'une cellule, l'on peut approximer l'intégrale de surface par une sommation sur les six surfaces composant chaque cellule. Finalement, si l'on assume que l'intensité $I(\mathbf{x}, \mathbf{s})$ est constante à l'intérieur du volume V_{ijk} et de l'angle $\delta\Omega^l$, l'équation (20) devient :

$$\sum_{m=1}^6 A_m I_m^l \int_{\Omega^l} (\mathbf{s} \cdot \mathbf{n}_m) d\Omega = \kappa_{ijk} [I_{b,ijk} - I_{ijk}^l] V_{ijk} \delta\Omega^l \quad (21)$$

où A_m est l'aire de la face m , I_m^l est l'intensité radiative à la face m et dans la direction l , $\mathbf{s}$ est le vecteur unitaire dans la direction de l'angle de contrôle, $\mathbf{n}_m$ est le vecteur unitaire normal à la face m , $I_{b,ijk}$ est l'intensité de radiation d'un corps noir dans la cellule ijk , et finalement I_{ijk}^l est l'intensité radiative dans la direction l .

Les angles de contrôle $\delta\Omega^l$ sont obtenus à l'aide du système de coordonnées illustré à la figure 2.4. L'angle polaire θ est divisé en un nombre pair de bandes, et chaque bande divisée selon θ est de nouveau divisée en bandes selon l'angle azimutal Φ .

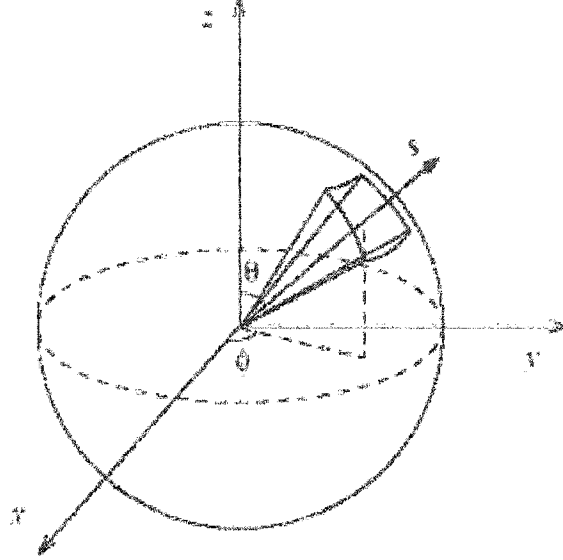


Figure 2.4 : Système de coordonnées utilisé pour la discrétisation angulaire

Finalement, le terme de perte par radiation dans l'équation de conservation d'énergie (terme utilisé dans l'expression de la divergence) est évalué en calculant la différence entre ce qui est absorbé et ce qui est émis :

$$-\nabla \cdot \vec{q}_r(\vec{x}) = \kappa(\vec{x}) \left(\int_{\Omega} I(\vec{x}, \vec{s}) d\Omega - 4\pi I_b(\vec{x}) \right) \quad (22)$$

2.2.6 Méthode numérique

La méthode numérique employée par FDS est une méthode de volumes finis discrétisée en espace selon un schéma centré de deuxième ordre et discrétisée temporellement à l'aide d'un schéma de prédiction-correction explicite de second ordre. Comme il s'agit d'un schéma explicite, le pas de temps est limité par la condition CFL (Courant-Friedrichs-Levy) :

$$\Delta t < \min \left(\frac{\Delta x}{u}, \frac{\Delta y}{v}, \frac{\Delta z}{w} \right) \quad (23)$$

Tel que mentionné à la section 2.2.2, FDS utilise des équations modifiées pour ne pas tenir compte des ondes de pression voyageant à grande vitesse. En observant la condition CFL on remarque que la filtration de ces ondes permet d'avoir des vitesses u , v et w beaucoup plus petites et donc un pas de temps beaucoup plus grand. Ceci accélère donc la simulation d'un scénario d'incendie.

Comme il s'agit de volumes finis, les quantités scalaires (densité, température, etc.) sont assignées au centre des cellules alors que les quantités vectorielles sont assignées au centre des faces qui sont normales à la direction du vecteur. Comme l'indique la figure 2.5, la vitesse u (selon l'axe des x) est assignée aux faces dont la normale est parallèle à l'axe des x , et il en est ainsi pour toutes les autres quantités vectorielles.

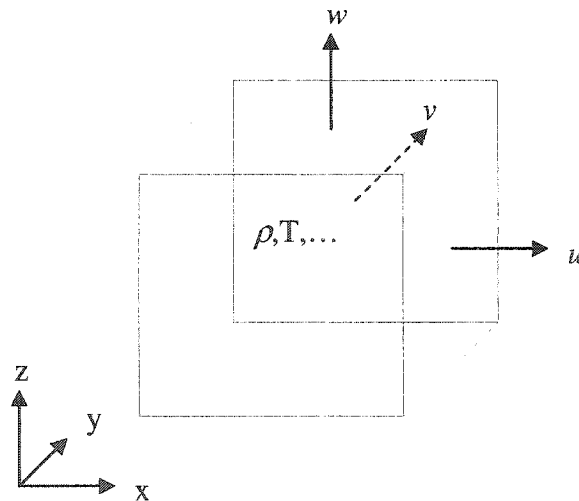


Figure 2.5 : Volume de contrôle et assignation des variables

CHAPITRE 3

VISUALISATION DES SIMULATIONS NUMÉRIQUES

Afin de visualiser les résultats obtenus pour les simulations effectuées avec FDS, deux logiciels de visualisation seront utilisés. Smokeview, tout comme FDS, fut développé par le NIST et constitue le logiciel de visualisation officiel compagnon de FDS. L'autre logiciel utilisé, VU, est un logiciel de visualisation scientifique configurable développé au Centre de Recherche en Calcul Appliqué (CERCA) [43] par différents chercheurs pour une grande variété de domaines d'applications.

3.1 Smokeview

Le logiciel Smokeview permet de visualiser les résultats de simulations par FDS de diverses façons. Les techniques de visualisation peuvent se diviser en deux catégories : les animations et les images statiques. Parmi les animations on retrouve les iso-surfaces et les iso-contours animées, le mouvement de particules et les champs de vecteurs animés. Les images statiques quant à elles peuvent afficher tout ce qui est animé de façon statique en plus d'iso-surfaces d'une foule de variables telles que la fraction volumique des composantes, la vitesse selon chaque direction, la viscosité, la pression, etc. Davantage d'informations sur les capacités de Smokeview sont disponibles dans le guide de l'utilisateur de Smokeview 3 [44]. Voici quelques exemples d'images générées par Smokeview 3.



Figure 3.1 : Iso-surface du dégagement de chaleur d'un incendie dans une salle d'ordinateurs

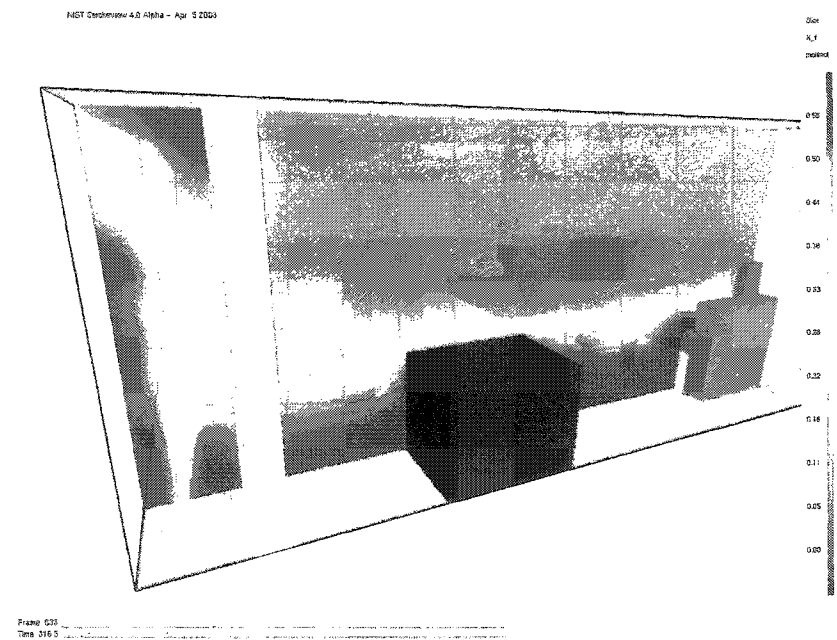


Figure 3.2 : Plan montrant la fraction massique de carburant dans une pièce

3.2 VU

Contrairement à Smokeview, le logiciel VU n'a pas été conçu spécifiquement pour l'utilisation avec FDS. Afin de pouvoir visualiser les résultats de FDS avec VU, certaines modifications ont dû être apportées à FDS. La technique utilisée pour transférer l'information de FDS à VU consiste à modifier les fichiers Plot3D générés par FDS et de créer un fichier de type VU pour faire appel à ces fichiers de données Plot3D. Cette technique, bien que simple, possède sa part d'inconvénients :

- **Ressources informatiques** : Un fichier de données de type Plot3D doit être généré à chaque scène que l'on désire visualiser. Les fichiers Plot3D étant relativement lourds, ceci peut devenir problématique lorsque le maillage possède une grande quantité d'éléments ou lorsqu'on désire visualiser un grand nombre de scènes.
- **Scènes statiques** : Les données sauvegardées dans les fichiers Plot3D sont les valeurs des variables à un instant donné et sont donc des images statiques. Les animations doivent être effectuées en affichant une séquence d'images statiques, ce qui peut nécessiter une grande quantité de mémoire vive considérant la taille des fichiers Plot3D.

L'utilisation de VU pour visualiser les résultats d'une simulation possède tout de même quelques avantages de taille:

- **Nombre de variables** : Les modifications apportées à FDS permettent de spécifier un plus grand nombre de variables à conserver dans les fichiers Plot3D. Il est donc possible de conserver plus de cinq variables, ancienne limite imposée par FDS.
- **Visualisation réaliste** : VU permet d'afficher les scènes de façon plus réaliste que Smokeview en faisant varier la couleur du feu selon une variable quelconque ainsi qu'en permettant l'affichage de la fumée.

Voici donc quelques exemples d'images générées par VU :

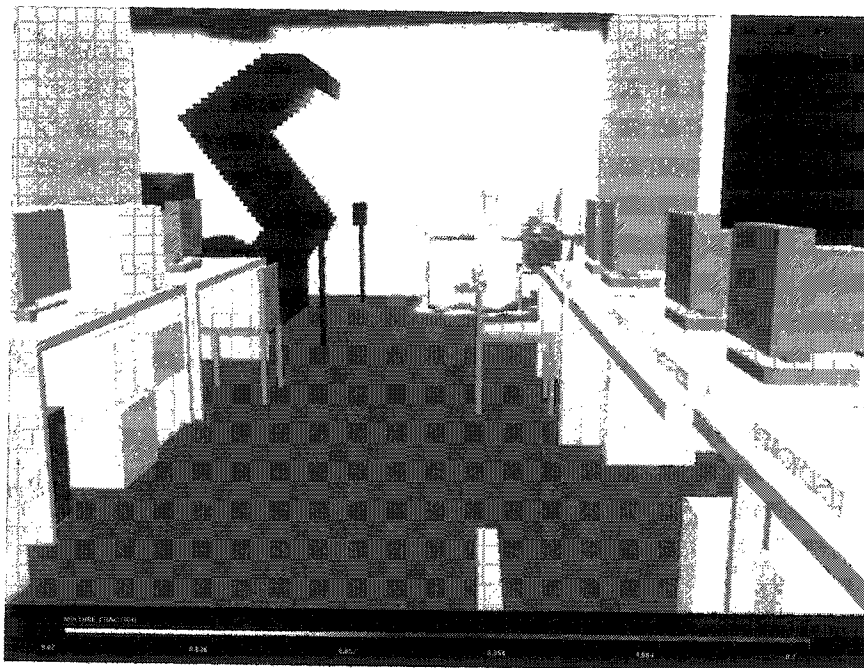


Figure 3.3 : Incendie dans une salle d'ordinateurs

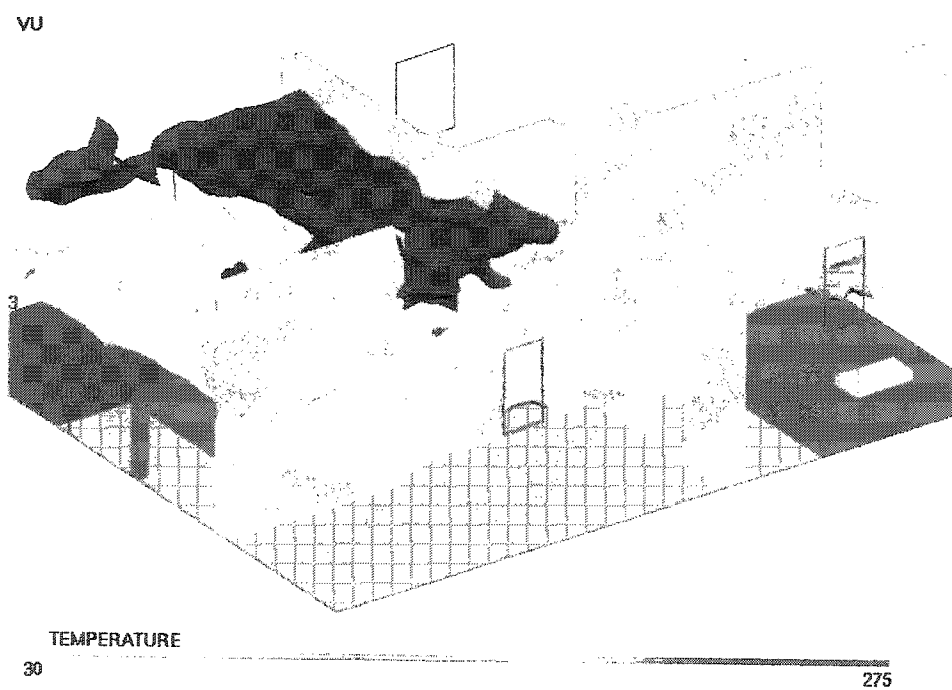


Figure 3.4 : Iso-surfaces de températures (30 et 275 °C)

CHAPITRE 4

MÉTHODOLOGIE

Afin d'évaluer et d'améliorer les capacités de représentation des backdrafts avec FDS, une série de simulations numériques seront comparées avec certains résultats expérimentaux de retour de flamme. Les expériences simulées sont issues des travaux de Daniel Gojkovic, membre du «Department of Fire Safety Engineering» de l'université Lund en Suède. Dans son étude [20], Gojkovic rapporte les résultats d'une série de treize expériences de retour de flamme menées dans un conteneur naval standard. Ce chapitre présente la méthode expérimentale et l'instrumentation utilisée dans ces expériences ainsi que la façon dont elles seront simulées avec FDS.

4.1 Instrumentation et méthode expérimentale

4.1.1 Conteneur

Basé sur les expériences de Bolliger [26], les expériences ont été menées dans un conteneur naval en acier de 5,5 x 2,2 x 2,2 mètres modifié pour permettre de réaliser les expériences ainsi que pour assurer un niveau de sécurité acceptable.

Un panneau limiteur de pression, installé à une des extrémités du conteneur (cf. figure 4.1), vise à empêcher tout dommage structurel important. Posé à l'aide d'attaches de plastique de résistance connue, ce panneau empêche toute augmentation excessive de la pression en cédant lorsque celle-ci excède une certaine valeur. Des efforts ont été faits afin de sceller le mieux possible le conteneur afin que les gaz chauds et les produits de pyrolyse demeurent à l'intérieur. Le panneau limiteur de pression engendre toutefois des fuites le long de son pourtour, ce qui en soi empêche la pression de s'accroître à l'intérieur du conteneur.

Les murs du conteneur ont été isolés avec de l'isolant en fibre de verre et le plancher fut recouvert de béton. Afin de voir à l'intérieur, une vitre résistante au feu fut installée sur un des côtés du conteneur (cf. figure 4.1).

Les retours de flamme étant déclenchés par un apport soudain d'air frais, une ouverture doit être faite pour contrôler le moment où cet air frais pénètre dans le conteneur. Le type d'ouverture utilisé par Gojkovic consiste en une ouverture qui couvre toute la largeur du conteneur sur 0,8 mètre de haut (cf. figure 4.2). Cette ouverture, située à l'opposé du panneau limiteur de pression et à la mi-hauteur du conteneur, est déclenchée lorsque l'opérateur tire sur un fil de métal fixé à une trappe couvrant l'ouverture.

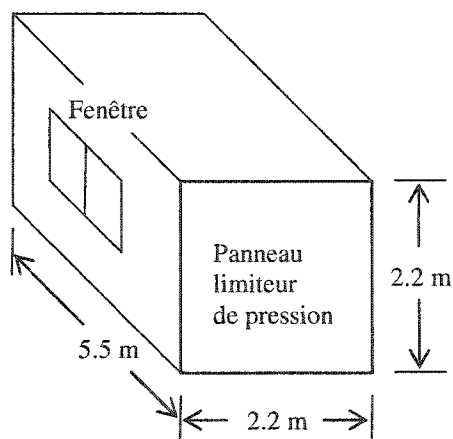


Figure 4.1 : Dimensions du conteneur utilisé

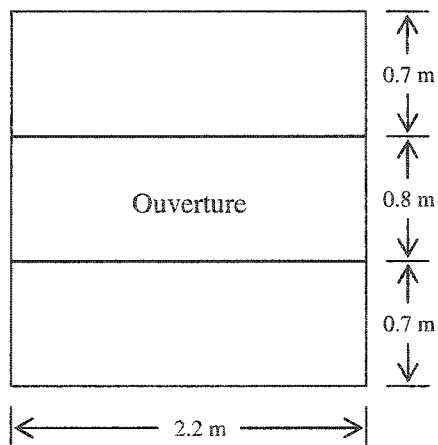


Figure 4.2 : Dimensions de l'ouverture

4.1.2 Brûleur et appareils de mesure

Afin de simuler ce qui se produit dans un cas de backdraft réel, un brûleur au gaz naturel mesurant 0,3 x 0,3 mètre est installé dans le conteneur du côté du panneau limiteur de pression (cf. figure 4.3). Bien que le gaz naturel ne soit pas généralement associé à la présence de backdrafts, celui-ci possède des propriétés semblables aux produits de pyrolyse, telles qu'une densité plus faible que l'air et une région d'inflammabilité restreinte. L'utilisation du gaz naturel permet de plus de contrôler le taux de production de gaz imbrûlés avec une relativement bonne précision, alors qu'il aurait été très difficile de contrôler le taux de pyrolyse d'un carburant solide.

Deux sources d'allumage sont présentes dans le conteneur. Le brûleur est serti d'un allumeur à étincelle alors qu'un fil de métal chauffé électriquement sert de source d'allumage au retour de flamme. Ce fil, mesurant un mètre de long, est suspendu au dessus du brûleur, près du panneau limiteur de pression.

Les appareils de mesures utilisés lors des expérimentations sont les suivants : deux arbres de cinq thermocouples chacun, un capteur de pression piézorésistif situé dans le conteneur, un capteur de pression du réservoir de méthane, une balance pour mesurer le poids du réservoir de méthane ainsi qu'un appareil de mesure (Dräger Multiwarn II) de concentration des gaz (méthane, oxygène et dioxyde de carbone). Malheureusement, certains appareils de mesure n'ont pas fourni de mesures fiables et certains autres résultats sont tout simplement absents du rapport. L'auteur du rapport ne justifie pas l'absence de certains résultats mais évoque la présence d'une double échelle de temps pour expliquer le manque de fiabilité des résultats. En effet, le phénomène de retour de flamme est caractérisé par une longue échelle de temps pour la combustion initiale et l'accumulation de produits de pyrolyse, et par une courte échelle de temps pour l'introduction d'air frais et la déflagration comme telle. Ceci a pour conséquences que seules les mesures suivantes seront utilisées pour fin de comparaison avec les résultats numériques : les températures d'un seul des deux arbres de thermocouples, la

concentration en oxygène et en dioxyde de carbone ainsi que la masse du réservoir de méthane en fonction du temps. L'emplacement de l'arbre de thermocouples utilisé (TCT2) est illustré à la figure 4.3. L'arbre TCT2 est composé de cinq thermocouples nus (0,25 mm de diamètre et type K) espacés verticalement de 40 cm dont le plus haut est situé à 20 cm du plafond du conteneur. Malheureusement, l'emplacement de l'appareil de mesure de concentration des gaz n'étant pas indiqué dans le rapport, la « sonde numérique » utilisée pour mesurer les concentrations lors des simulations sera située en plein centre du conteneur, à mi-hauteur.

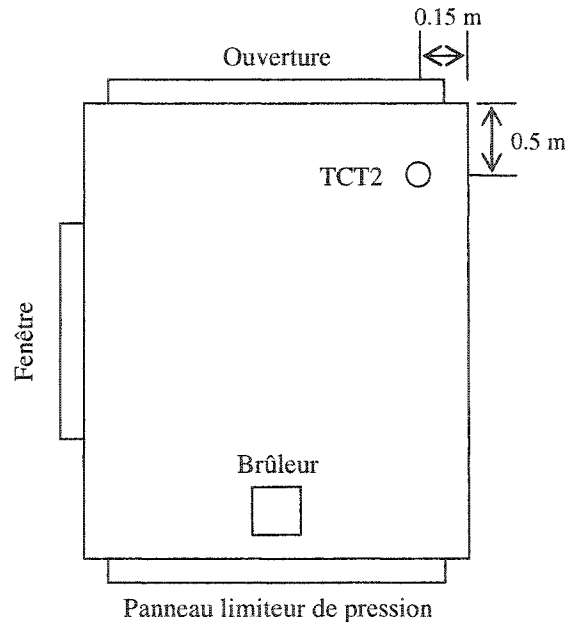


Figure 4.3 : Vue de plan du conteneur

4.1.3 Méthode expérimentale

De façon à reproduire l'évolution typique d'un backdraft et l'explosion qui s'en suit, les expériences ont été accomplies selon la procédure suivante. Tout d'abord, toutes les ouvertures sont fermées de manière à obtenir un compartiment le plus étanche à l'air possible. Afin de prévenir toute surpression durant l'allumage du brûleur, un petit trou est ouvert et sera refermé dès que la flamme produite par le brûleur sera stable. La bougie d'allumage du brûleur est ensuite activée et l'on commence à acheminer le gaz naturel vers le brûleur. Une flamme d'environ deux mètres de haut (≈ 600 kW) est produite et cesse de brûler après environ une minute, lorsque l'oxygène contenu dans le conteneur est insuffisant pour maintenir la combustion. Afin de simuler l'accumulation des produits de pyrolyse dans le conteneur, l'apport en gaz naturel du brûleur est maintenu jusqu'à ce que la concentration en combustible soit jugée satisfaisante. À ce moment, l'ouverture est créée et l'air frais commence à pénétrer dans le conteneur. Le fil métallique situé au-dessus du brûleur est alors chauffé électriquement afin de servir de source d'allumage au backdraft. L'emplacement de ce fil d'allumage est important car il a des conséquences directes sur le délai avant l'allumage ainsi que sur l'intensité et la dynamique du retour de flamme. En effet, plus la source d'allumage est élevée et loin de la source d'air frais, plus le délai avant l'allumage sera long. Conséquemment, plus le délai est long plus le backdraft sera de faible intensité et de faible durée, car une plus grande quantité de carburant imbrûlé aura eu le temps de sortir de l'enceinte.

Par la suite, si tout se déroule comme prévu, l'air entrant dans le conteneur se mélange au gaz naturel et forme une région inflammable qui progresse de l'ouverture vers la source d'allumage. Une fois cette source atteinte, le mélange prend feu, cause une expansion des gaz et propulse une partie des gaz imbrûlés vers l'extérieur du conteneur où ceux-ci s'enflamment en une boule de feu.

4.2 Simulation des expériences avec FDS v3.10

Pour des raisons de temps de calcul, il n'est évidemment pas possible de simuler les treize expériences de retour de flamme effectuées par Gojkovic dans le cadre de ce travail. Un choix a donc été fait de simuler seulement une de ces expériences. Voici un tableau résumant les principales caractéristiques de l'expérience choisie :

Tableau 4.1 : Caractéristiques de l'expérience choisie

	Dégagement de chaleur du brûleur (kW)	Durée de l'apport en méthane (sec)	Temps à l'ouverture (sec)
Expérience 13	642*	318	325**

* Basé sur les mesures du poids du réservoir de méthane

** Approximation basée sur le graphique de la température en fonction du temps

Le choix de cette expérience est dû à deux raisons principales : la présence d'un backdraft (ce n'est pas le cas pour toutes les expériences) et la quantité de résultats disponibles. Plusieurs simulations seront effectuées pour cette expérience : deux simulations sans modifications au logiciel (avec et sans fuites au niveau du panneau limiteur de pression) ainsi qu'une série additionnelle de simulations avec les modifications faites au logiciel. Une simulation supplémentaire sera réalisée afin de vérifier la dépendance des résultats au maillage utilisé.

4.2.1 Modélisation géométrique et maillage

La simulation des retours de flamme débute par la modélisation géométrique du conteneur, du brûleur, de l'ouverture et des fuites (s'il y a lieu). Seules les lignes directrices de la modélisation seront mentionnées ici, les détails sont contenus dans les fichiers d'entrée (.data) présentés en annexe A.

Il y aura deux maillages utilisés pour les simulations. Un maillage « grossier » utilisé pour la majorité des simulations consiste en des volumes cubiques de 10 cm de côté. Un maillage raffiné sera aussi utilisé afin d'analyser la dépendance des résultats à la taille du maillage. Celui-ci est composé de volumes de 5 cm de côté. Comme FDS modifie toutes

les dimensions pour qu'elles concordent avec les frontières des éléments du maillage, toutes les dimensions seront des multiples de 10 cm (aucune modification ne sera nécessaire). La durée des simulations est d'environ trente heures pour le maillage de 10 cm et d'environ 20 jours pour le maillage de 5 cm. Cet accroissement considérable du temps de calcul est dû à deux facteurs. Premièrement, le nombre de cellules est augmenté d'un facteur 2^3 , car il y a deux fois plus de cellules par dimension, pour les trois dimensions. Deuxièmement, le critère CFL (cf. section 2.2.6) implique qu'une diminution de la grosseur des cellules du maillage d'un facteur 2 entraîne une diminution du pas de temps d'un même facteur et donc un plus long temps de calcul. Ainsi, le temps de calcul pour le maillage raffiné est de $(30 \text{ heures} \times 2^3 \times 2) = 480 \text{ heures} = 20 \text{ jours}$. Toutes les simulations ont été effectuées sur des stations de travail SGI Octane munis d'un processeur SGI IP27 de 250 MHz.

Tel que mentionné à la section 2.2.1, la résolution du maillage utilisé lors d'une simulation LES dicte à quelle échelle spatiale se fera la distinction entre les structures de grandes et de petites échelles. Il est donc important de savoir quelles échelles spatiales doivent être résolues afin d'être en mesure de prédire correctement l'écoulement étudié. Pour un panache de feu, l'échelle spatiale caractéristique est reliée au dégagement de chaleur par l'équation suivante [45]:

$$D^* = \left(\frac{\dot{Q}}{\rho_\infty T_\infty c_p \sqrt{g}} \right)^{2/5} \quad (24)$$

Les simulations de panaches de feu menées avec FDS ont démontrées qu'avec une résolution minimale égale à $0,1D^*$, les panaches simulés démontrent une excellente correspondance avec les corrélations de panaches de feu développées par McCaffrey [45]. Cette correspondance est excellente tant au niveau des profils de vitesses et de températures le long de l'axe central du panache qu'au niveau des profils radiaux à différentes hauteurs pour ces mêmes quantités [46].

Dans le cas présent, le panache de feu présent dans le conteneur possède une échelle spatiale caractéristique $D^* \approx 0,8$ mètre. Ceci nous indique donc qu'une résolution d'environ $(0,1D^*) = 0,08$ m serait appropriée pour le cas à l'étude, ce qui est légèrement inférieur à ce qui sera effectivement utilisé lors des simulations numériques.

D'une façon similaire, FDS calcule, lors de la résolution de l'écoulement, un indice de résolution de l'écoulement, appelé « Fire Resolution Index » (FRI). Cet indice varie entre 0 et 1 où la valeur de 1 correspond à un écoulement correctement résolu. Cet indice est calculé de la façon suivante [33]:

$$FRI = \min \left(1 ; 0,6 * \left[\frac{Z_{max}}{\tanh(13 * \dot{m}_{fuel,max})} \right]^{0,8} * \frac{D^*}{[(\delta x_{min} * \delta y_{min} * \delta z_{min})^{1/3}]^{1/5}} \right) \quad (25)$$

où Z_{max} correspond à la valeur maximale de la fraction de mélange dans le domaine, $\dot{m}_{fuel,max}$ correspond au débit maximal de carburant par unité de surface sur les surfaces qui en éjectent et finalement, $(\delta x_{min} * \delta y_{min} * \delta z_{min})^{1/3}$ correspond à la dimension caractéristique du maillage. Le graphique suivant illustre l'évolution typique du FRI lors des simulations de retours de flammes effectuées avec le maillage de 10 cm de côté.

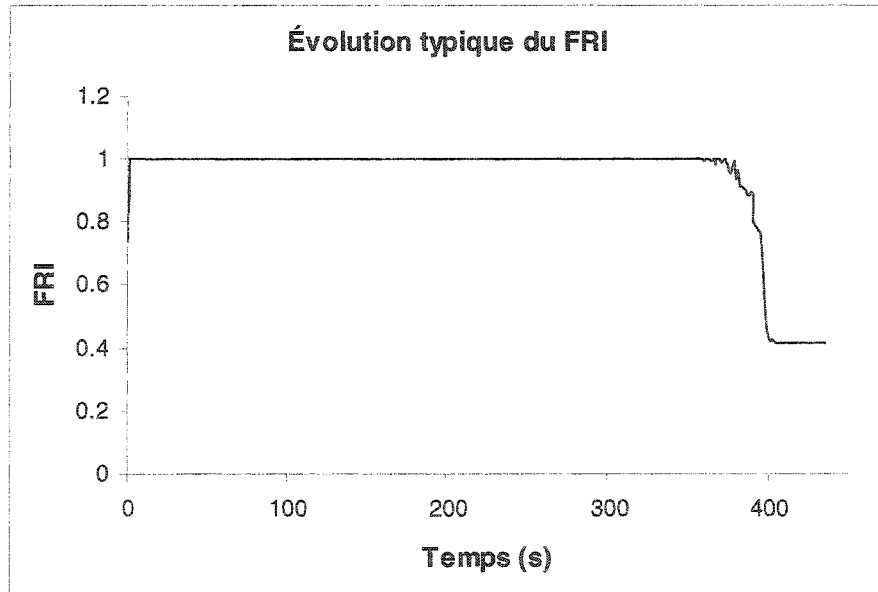


Figure 4.4 : Évolution typique du « Fire Resolution Index » lors des simulations de retours de flamme

Il apparaît, à partir de cette figure, qu'une résolution de 10 cm soit suffisante pour résoudre de façon correcte les différentes structures présentes dans l'écoulement étudié. En effet, le FRI vaut l'unité durant presque toute la simulation, à l'exception des périodes initiales et finales. Ceci s'explique assez simplement par le fait que durant ces périodes, le dégagement de chaleur n'est pas à sa valeur nominale de 642 kW. En effet, durant la première seconde, le dégagement de chaleur croît graduellement jusqu'à l'obtention de sa valeur nominale, ce qui entraîne une diminution de la valeur de D^* et du même coup du FRI. D'une façon similaire, durant les derniers instants de la simulation (entre 380 et 450 secondes), le FRI chute dramatiquement à cause de la baisse rapide du dégagement de chaleur dans le domaine. Effectivement, durant cette période, seule une faible quantité de méthane imbrûlé continue à se consumer, ce qui entraîne encore une fois une diminution du FRI. Il est important ici de noter que cette période finale n'est d'aucune importance dans l'analyse du phénomène étudié, et que cette diminution du FRI n'interfère donc aucunement avec la validité des résultats présentés dans ce travail.

La figure 4.5 fournit une image du domaine de simulation ainsi que du conteneur comme tel. Le côté du conteneur est invisible de manière à montrer l'intérieur. Le conteneur est modélisé par des panneaux d'acier de 10 cm d'épais et est construit de manière à ce que l'intérieur du conteneur mesure 5,5 x 2,2 x 2,2 mètres. Les propriétés de l'acier telles qu'utilisées par FDS sont présentées en annexe B-1.

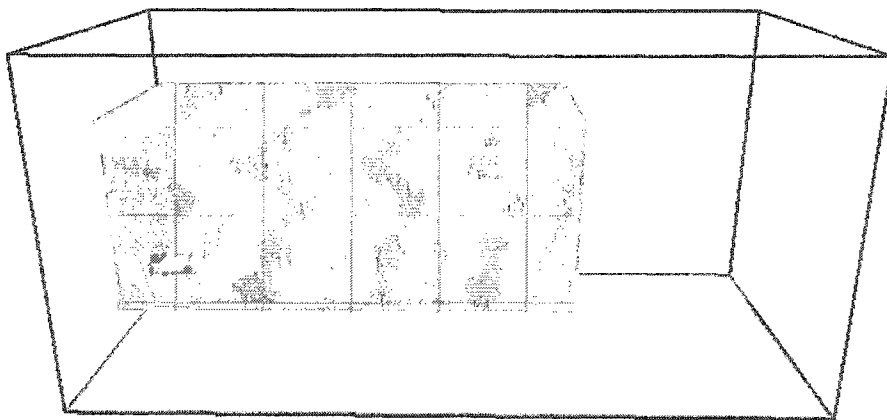


Figure 4.5 : Conteneur et domaine de simulation

Le brûleur est situé sur le plancher à 10 cm du fond du conteneur et mesure 0,3 x 0,3 mètre. Afin de modéliser l'apport d'air frais, le côté du conteneur où se trouve l'ouverture est divisé en trois selon les dimensions de la figure 4.2. L'ouverture est créée en retirant le panneau d'acier correspondant à l'ouverture (panneau central) au moment indiqué dans la dernière colonne du tableau 4.1.

Les fuites le long du panneau limiteur de pression sont sans doute l'aspect le plus difficile à modéliser correctement. En effet, les fuites se produisent normalement le long de fines craques larges d'à peine quelques millimètres. Puisque le maillage est composé de cellules de 10 cm, il n'est pas possible de reproduire avec fidélité ces espaces fins où se produisent les fuites. Ces espaces ont donc été modélisés avec quatre petites ouvertures carrées de 10 cm de côté disposées le long du pourtour du panneau limiteur de pression. On peut apercevoir ces trous dans la figure 4.5. Ceci ne permet probablement pas d'obtenir un débit de fuite réellement similaire au débit expérimental mais empêche du moins l'augmentation de la pression à l'intérieur du conteneur.

4.2.2 Conditions frontières

Afin de prescrire le dégagement de chaleur du brûleur et de simuler le fait que le conteneur est à l'extérieur, les conditions frontières suivantes ont été appliquées (les paramètres se rapportent aux fichiers d'entrée de FDS, annexe A):

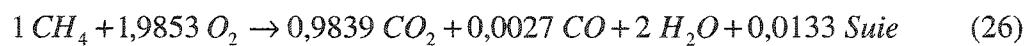
Au niveau de la surface supérieure du brûleur : le dégagement de chaleur par unité de surface (paramètre HRRPUA) est spécifié de manière à concorder avec le dégagement de chaleur total indiqué dans le tableau 4.1. Par exemple, l'expérience 13 nécessite un dégagement de chaleur par unité de surface de $642 \text{ kW} / (0,3 \times 0,3) \text{ m}^2 = 7133.3 \text{ kW/m}^2$. Afin de simuler l'accumulation des produits de pyrolyse, le brûleur n'est enlevé qu'après la durée de l'apport de méthane spécifiée dans le tableau 4.1. Puisqu'à un certain moment la quantité d'oxygène devient insuffisante pour soutenir la combustion, le brûleur continue tout de même d'envoyer du méthane imbrûlé dans le conteneur. Ceci permet de répliquer de façon assez précise les conditions expérimentales où

l'alimentation en gaz naturel du brûleur était maintenue de manière à simuler le dégagement des produits de pyrolyse.

Au niveau des frontières du domaine de simulation : les frontières du domaine (excepté la frontière représentant le sol) sont modélisées comme étant des frontières ouvertes à l'atmosphère à l'aide des paramètres du type `XBAR0='OPEN'`. FDS traite donc les limites du domaine comme des surfaces donnant sur l'extérieur où la matière est libre d'aller et venir.

4.2.3 Réaction chimique

Puisque le gaz naturel fut utilisé comme carburant lors des expériences, la combustion sera simulée à partir de la réaction de combustion imparfaite du méthane. Les paramètres de la réaction tels que présents dans la base de données de FDS sont présentés en annexe B-2, et donnent la réaction suivante :



La réaction précédente est obtenue en appliquant la corrélation de Faeth qui relie la production de monoxyde de carbone à la production de suie. La consommation d'oxygène et la production de dioxyde de carbone sont ensuite modifiées pour tenir compte de la production de suie et de monoxyde de carbone.

4.2.4 Quantités mesurées

Différentes quantités ou variables ont été saisies à l'aide de « sondes numériques » lors des simulations de retour de flamme de manière à les comparer aux résultats expérimentaux. Afin de pouvoir comparer les résultats numériques saisis aux données cueillies par les appareils de mesures installés dans le conteneur lors des expériences de Gojkovic, les quantités suivantes ont été mesurées (ces informations se retrouvent dans les fichiers d'entrée de FDS, Annexe A) :

La température : l'arbre de thermocouples TCT2 est installé à la position indiquée dans la figure 4.3. Cet arbre comprend donc cinq thermocouples distants de 40 cm dont le plus élevé se trouve à 20 cm du plafond.

Les concentrations : puisque l'emplacement de l'appareil de mesure de la concentration des gaz n'est pas mentionné dans le rapport de Gojkovic, les concentration des différentes espèces (oxygène, dioxyde de carbone et méthane) seront mesurées au centre du conteneur.

CHAPITRE 5

CAPACITÉS ACTUELLES DE FDS V3.10

Ce chapitre présente les résultats des différentes simulations de retours de flamme réalisées avec FDS sans qu'aucunes modifications au logiciel n'aient été effectuées. Les résultats expérimentaux des expériences de Gojkovic seront aussi présentés conjointement de manière à juger de la similitude entre les résultats numériques et expérimentaux.

5.1 Température

Les résultats de températures découlant des mesures de l'arbre de thermocouples TCT2 sont présentés aux figures 5.1 et 5.2. Les lignes pleines noires représentent les résultats expérimentaux et les lignes de couleur représentent les résultats numériques. Le thermocouple situé à l'extrémité inférieure de l'arbre fournit les lectures de température les plus basses et vice-versa.

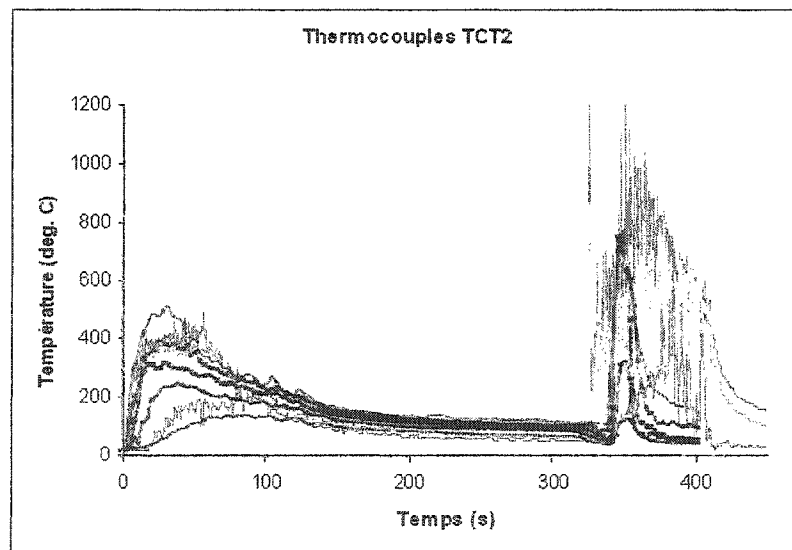


Figure 5.1 : Comparaison des températures (sans fuites)

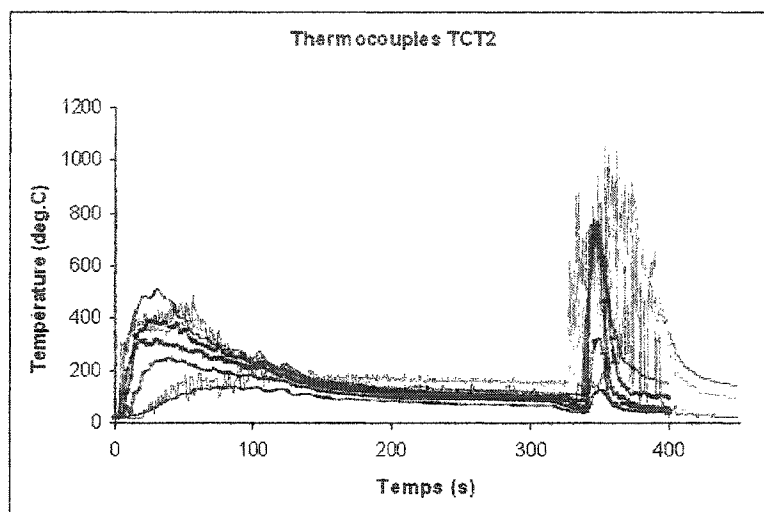


Figure 5.2 : Comparaison des températures (avec fuites)

5.2 Concentration des espèces

Les résultats des mesures de la concentration du dioxyde de carbone et de l'oxygène en fonction du temps sont présentés sur les figures 5.3 à 5.5. Vu la discordance entre les résultats expérimentaux et numériques de la concentration en dioxyde de carbone, les graphiques de concentration seront présentés sans être superposés.

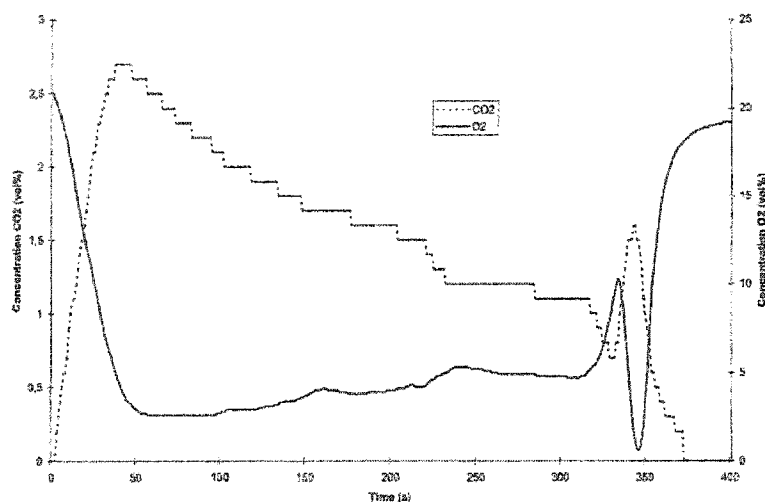


Figure 5.3 : Mesures expérimentales des concentrations

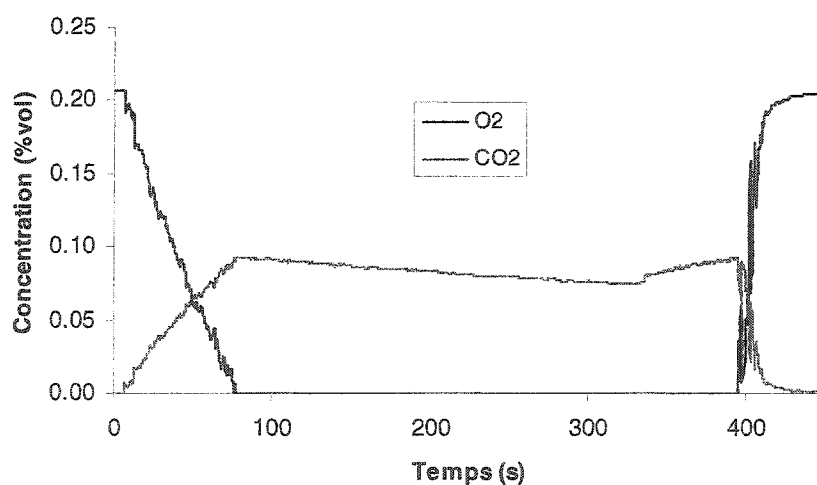


Figure 5.4 : Valeurs simulées des concentrations en O_2 et CO_2 (sans fuites)

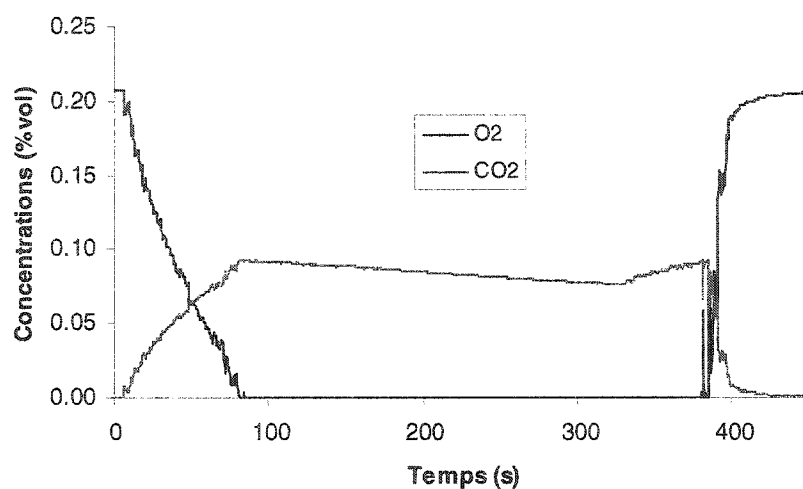


Figure 5.5 : Valeurs simulées des concentrations en O_2 et CO_2 (avec fuites)

5.3 Résultats qualitatifs et visuels

Puisque les retours de flamme sont entre autres caractérisés par une accumulation des produits de pyrolyse, un courant de gravité et une relativement forte explosion, il serait intéressant de voir jusqu'à quel point FDS permet de reproduire ces phénomènes.

5.3.1 Accumulation des produits de pyrolyse

Les résultats de simulations relatifs à la concentration en méthane durant les simulations de l'expérience No.13 sont illustrés sur les figures 5.6 et 5.7 (les concentrations expérimentales n'étant pas disponibles, les graphiques suivants ne servent qu'à illustrer l'accumulation de produits de pyrolyse dans le conteneur) :

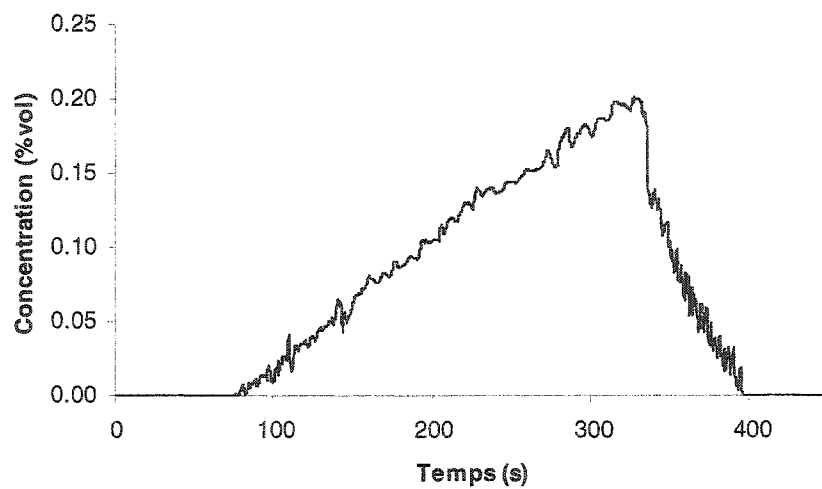


Figure 5.6 : Valeurs simulées de la concentration en méthane (sans fuites)

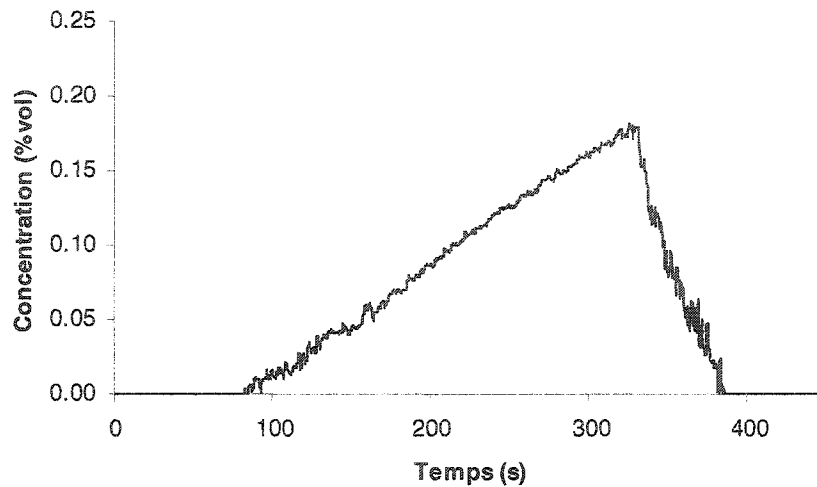


Figure 5.7 : Valeurs simulées de la concentration en méthane (avec fuites)

5.3.2 Courant de gravité

Il est possible, à partir des différents graphiques qui précèdent, de constater que le courant de gravité habituellement associé aux backdrafts n'est pas présent lors des simulations. En effet, si l'on garde en tête que l'ouverture est créée après 325 secondes (cf. tableau 4.1), on constate tout d'abord que la concentration en oxygène à ce moment demeure nulle, alors qu'en réalité celle-ci devrait augmenter avec l'apport d'air frais comme l'indique la figure 5.3. Si l'on observe le graphique de la température des cinq thermocouples autour de 325 secondes (cf. figure 5.8), on constate de plus que la chute de température présente dans les résultats expérimentaux n'apparaît pas lors des simulations. Ce qui se produit est donc un backdraft qui s'allume au moment exact où il y a un apport en air frais, comme si la source d'ignition du backdraft se trouvait dans l'ouverture du conteneur, d'où l'augmentation immédiate de la température à 325 secondes (cf figure 5.9). Or, cet allumage instantané du retour de flamme, par la poussée ascensionnelle et par la réaction chimique qui se produit, empêche l'air frais de pénétrer dans le conteneur et de se mélanger au carburant qui s'y trouve, d'où l'absence totale de courant de gravité.

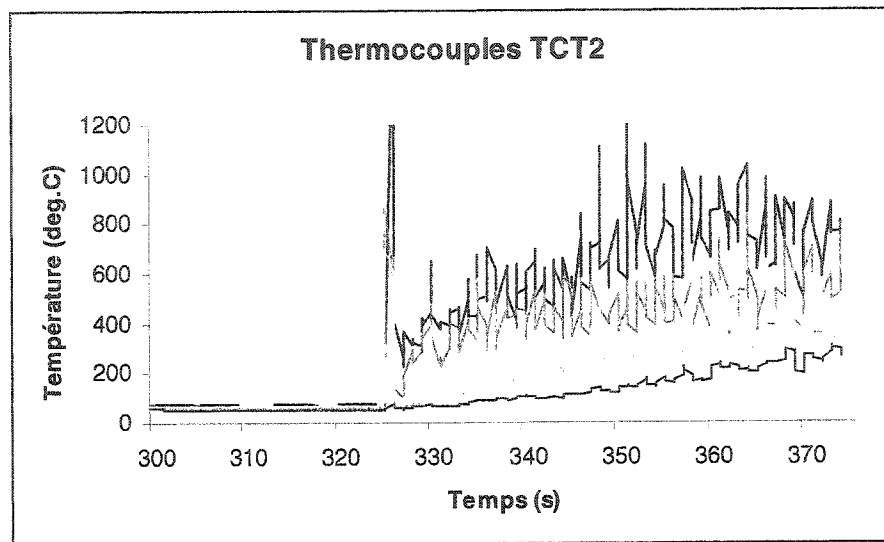


Figure 5.8 : Températures simulées entre 300 et 375 secondes (sans fuites)

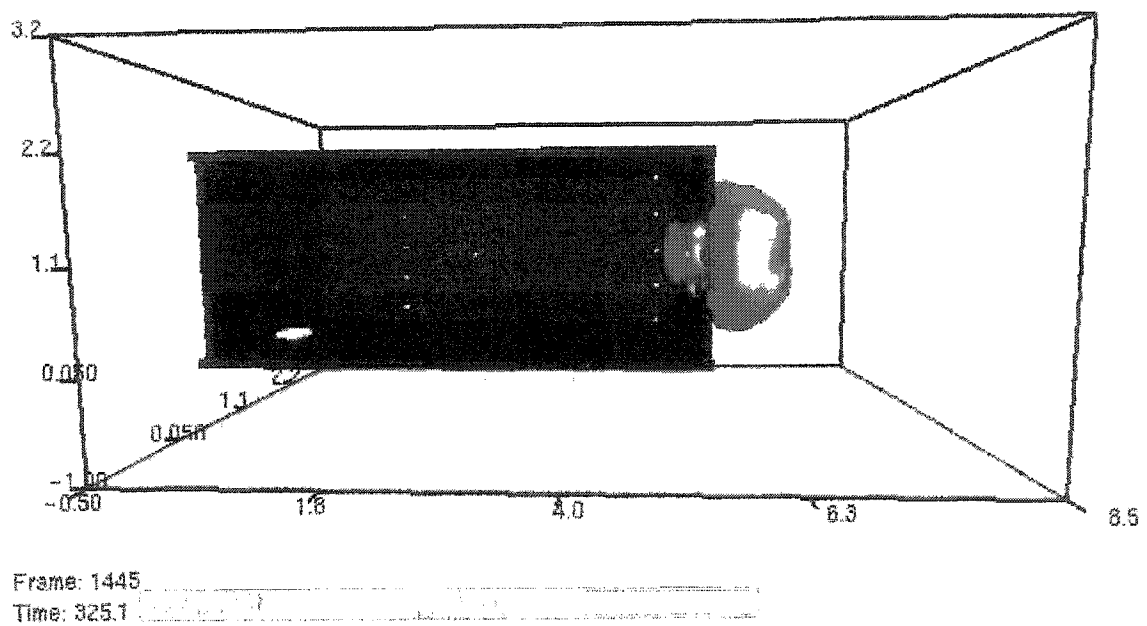


Figure 5.9 : Iso surface du dégagement de chaleur à 325,1 secondes (sans fuites)

5.3.3 Explosion

Les visualisations des explosions maximales engendrées par le backdraft pour les cas avec et sans fuites dans Smokeview sont reproduites sur les figures 5.10 et 5.11 :

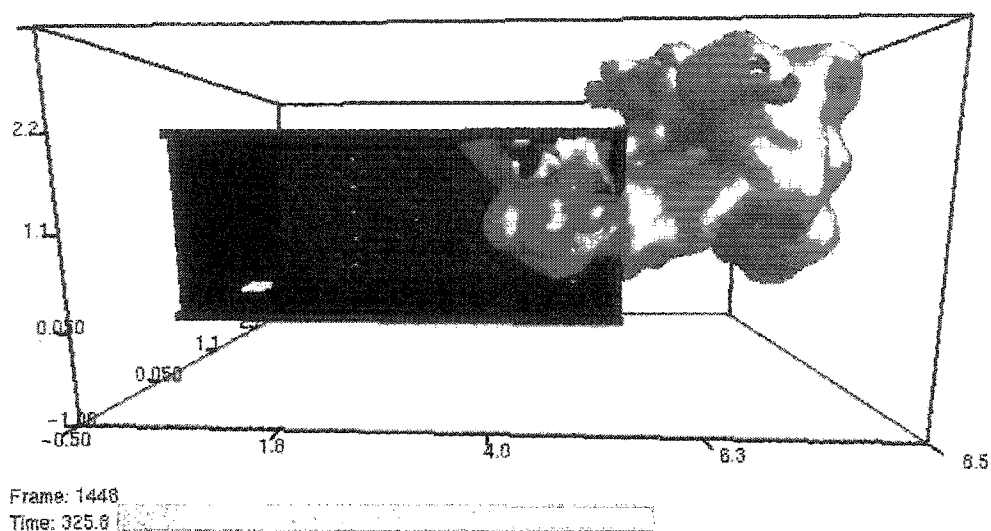


Figure 5.10 : Surface estimée de la flamme à 325,8 secondes (sans fuites)

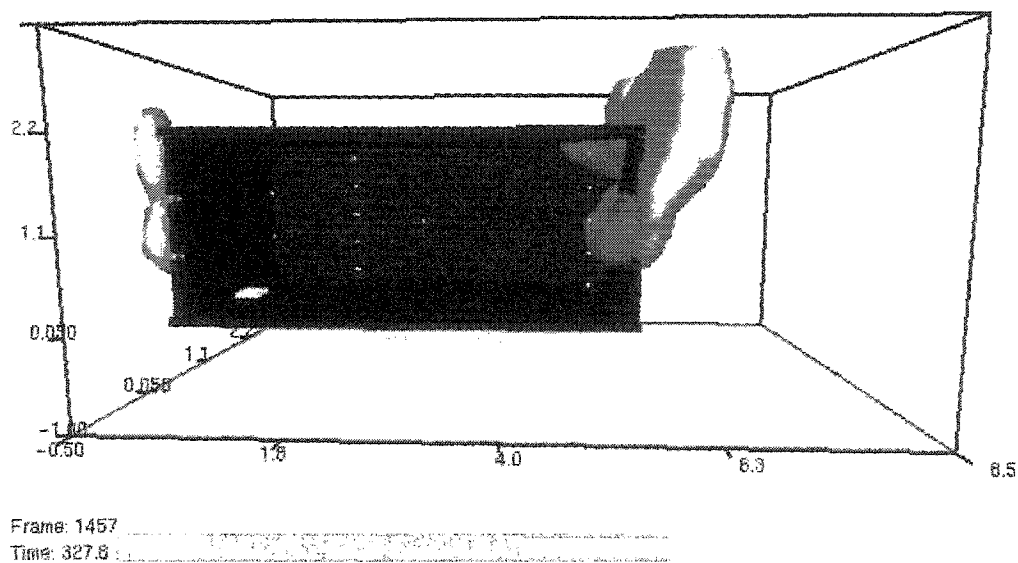


Figure 5.11 : Surface estimée de la flamme à 327,8 secondes (avec fuites)

On constate à la vue de ces deux visualisations que l'explosion du conteneur sans fuites est considérablement plus forte que celle du conteneur avec fuites. De façon quantitative, la boule de feu est d'environ 3 mètres de long pour le cas sans fuites et d'environ 1 mètre pour le cas avec fuites et dans les deux cas la boule de feu remplit la largeur entière de l'ouverture. Deux principaux facteurs expliquent cette forte disparité entre les deux résultats. Tout d'abord, les fuites permettent à une partie du méthane imbrûlé de sortir du conteneur avant son ouverture, et ces pertes en carburant contribuent à faire diminuer l'intensité de l'explosion. De plus, comme on peut observer à la figure 5.11, lors de l'ouverture une certaine quantité de méthane se consume à l'arrière du conteneur par les trous servant à simuler les fuites. Ces minis retours de flamme consomment une partie du méthane de l'enceinte et réduisent du même coup l'intensité de l'explosion. La raison principale est toutefois reliée à l'accumulation de pression dans le conteneur sans fuites, pression engendrée par un ajout continu de carburant et par la combustion initiale. Ainsi, au moment de l'ouverture, une partie du méthane imbrûlé est éjecté du conteneur à cause de cette pression et s'enflamme lors de son contact avec l'air ambiant, d'où la présence d'une très grande boule de feu. Malgré qu'il n'y ait pas d'augmentation de pression dans les essais expérimentaux, ceci n'est pas nécessairement mauvais en terme de représentabilité de l'explosion puisque, dans ces essais réels, l'expansion créée par la combustion des gaz à l'intérieur du conteneur durant le courant de gravité expulse de manière similaire les gaz imbrûlés vers l'extérieur (cf. section 4.1.3). Malheureusement, aucune donnée relative à la taille de l'explosion n'est disponible pour les expériences simulées et il est donc difficile de juger de la qualité des explosions obtenues.

5.4 Dépendance des résultats à la taille du maillage

Tel que mentionné dans la section 4.2, une simulation supplémentaire de l'expérience No.13 a été effectuée de manière à vérifier l'indépendance des résultats à la finesse du maillage utilisé. Ainsi, afin de juger de cette indépendance, la simulation du backdraft dans un conteneur avec fuites a été réalisée à nouveau avec des volumes de contrôle cubiques de 5 cm de côté, soit la moitié de la dimension initiale. Cette simulation utilise donc $2^3=8$ fois plus de cellules et a nécessité plus de vingt jours de calcul (cf. section 4.2.1). Les résultats de la simulation avec le maillage grossier suivis de ceux obtenus avec le maillage plus fin sont présentés sur les figures 5.12 à 5.15.

5.4.1 Température

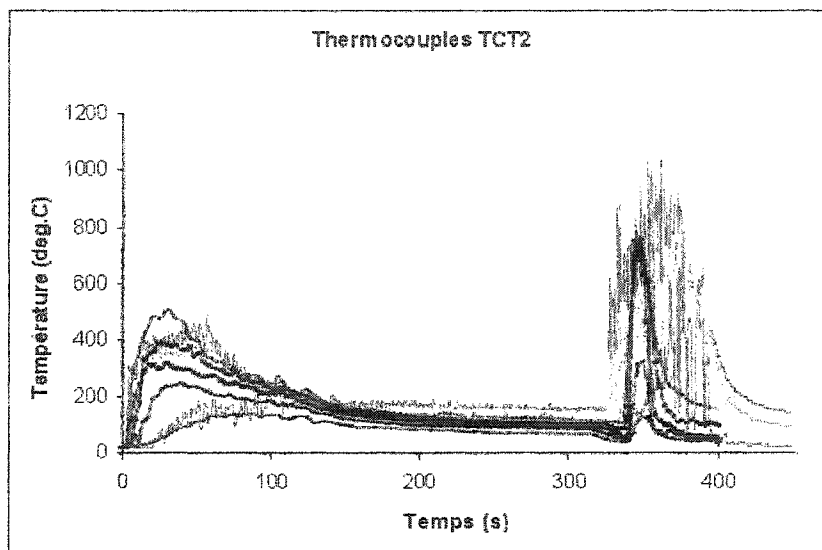


Figure 5.12 : Comparaison des températures pour le maillage grossier (avec fuites)

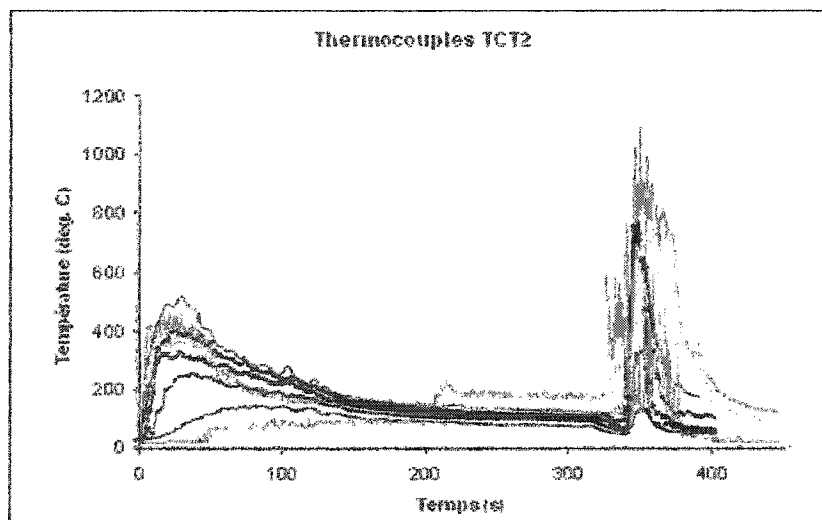


Figure 5.13 : Comparaison des températures pour le maillage raffiné (avec fuites)

5.4.2 Concentration des espèces

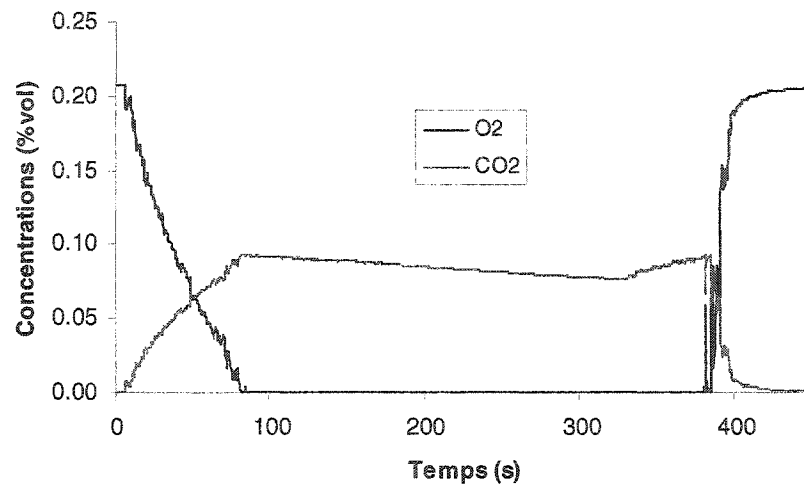


Figure 5.14 : Concentrations en O_2 et CO_2 pour le maillage grossier (avec fuites)

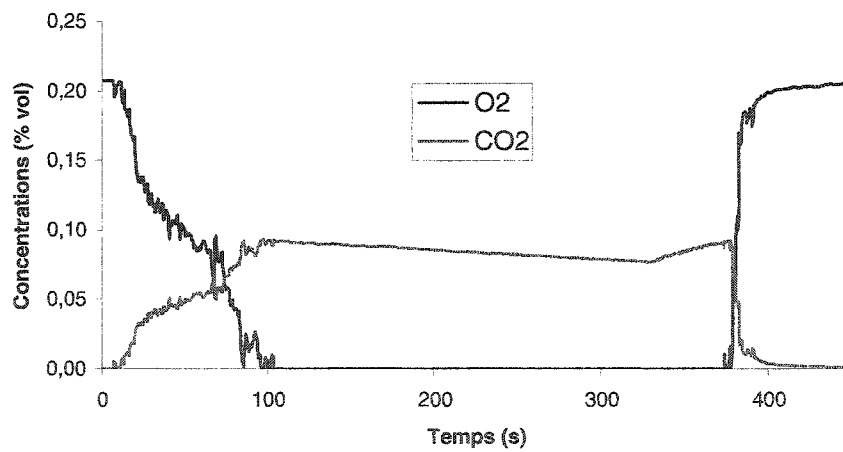


Figure 5.15 : Concentrations en O_2 et CO_2 pour le maillage raffiné (avec fuites)

5.5 Analyse des capacités actuelles de FDS v3.10

Tel que prévu, les résultats préliminaires nous indiquent qu'en dépit de certains aspects positifs, la simulation des backdrafts avec FDS v3.10 n'est pas tout à fait au point pour les conditions de backdraft qui sont à l'étude.

Si l'on observe les profils de températures (cf. figures 5.1 et 5.2), on remarque que les résultats expérimentaux et numériques sont globalement similaires, mais comportent certaines différences marquées. La première différence majeure réside dans l'absence d'une chute de température au moment de l'ouverture du conteneur, ce qui indique l'absence du courant de gravité (cf. section 5.3.2). La deuxième grande différence se rapporte à la durée et à l'intensité du retour de flamme. On constate en effet que les retours de flamme simulés sont d'une durée beaucoup plus longue que les retours de flamme expérimentaux, et les températures maximales obtenues sont supérieures d'environ 25%. Ceci pourrait être causé par plusieurs facteurs. Tout d'abord, il est possible que la quantité de méthane imbrûlé présente dans le conteneur au moment de l'ouverture soit trop grande. Ceci est d'autant plus probable lorsque le conteneur est étanche puisque tout le méthane injecté y demeure jusqu'à l'ouverture. C'est d'ailleurs ce qui semble se produire puisque la simulation avec fuites nous donne un backdraft légèrement plus court que la simulation sans fuites. Une deuxième explication réside dans l'absence de courant de gravité. En effet, puisque le backdraft est allumé à l'instant même où l'ouverture est créée, aucun mélange des réactifs ne se produit dans le conteneur et du même coup aucune déflagration ne s'y produit. Ceci ne permet pas l'expulsion subite d'un mélange inflammable vers l'extérieur du conteneur, et on se retrouve donc avec une certaine quantité de méthane qui brûle au fur et à mesure qu'il se mélange avec l'air au niveau de l'ouverture.

En ce qui concerne les valeurs des concentrations en oxygène et en dioxyde de carbone, les différences entre résultats expérimentaux et résultats numériques sont plus marquées.

On constate en effet que la concentration en CO_2 est environ quatre fois supérieure aux résultats expérimentaux et que la concentration en O_2 est beaucoup plus faible que celle enregistrée lors des expériences. La faible concentration en oxygène s'explique assez simplement par une des hypothèses utilisées par le modèle de combustion. En effet, ce modèle fonctionne avec l'hypothèse que le carburant et l'oxygène ne peuvent pas co-exister. Ceci implique donc que tout l'oxygène doit être consommé avant que l'accumulation de carburant ne débute, ce que l'on peut aisément constater avec les figures 5.4 à 5.7. Pour ce qui est de la concentration en dioxyde de carbone, il est plus difficile de cerner la raison derrière les disparités entre résultats numériques et expérimentaux. Encore une fois, plusieurs facteurs pourraient être en cause. Premièrement, alors que les simulations ont été effectuées avec du méthane comme carburant, le gaz naturel que l'on retrouve sur le marché n'est pas exclusivement composé de méthane. En plus d'autres hydrocarbures tels le propane, l'éthane, le butane et le pentane, on y retrouve certains composés comme l'azote, l'hélium, l'oxygène, le sulfure d'hydrogène et le soufre, dont la majeure partie provient des additifs (mercaptan) donnant l'odeur caractéristique du gaz naturel. Or, aucun de ces composés ne produit de dioxyde de carbone lors de la combustion, ce qui pourrait expliquer une partie du CO_2 en excès. Toutefois, ceci ne pourrait qu'expliquer partiellement les valeurs obtenues car les concentrations de ces composés sont très faibles, sauf pour l'azote qui peut compter pour 1 à 5% de la composition du gaz naturel. De plus, le gaz naturel peut contenir jusqu'à 1% de CO_2 , ce qui limite d'autant plus l'impact de la présence des autres composés sur les concentrations en dioxyde de carbone.

Une autre raison pouvant expliquer l'excès de CO_2 produit réside dans les conditions où se produit la réaction de combustion. En effet, durant une bonne partie de la période où la flamme subsiste (0-90 secondes) la combustion se produit dans un milieu où l'oxygène n'est pas suffisant pour soutenir une combustion complète. Or, la combustion incomplète du méthane engendre la production de monoxyde de carbone et de suie, qui du même coup réduisent la production de dioxyde de carbone. Les simulations préliminaires ayant

été effectuées avec la réaction indiquée à la section 4.2.3, seulement 0,0027 moles de CO et 0,0133 moles de suie sont produites par la combustion d'une mole de CH_4 et la réduction associée de la production de CO_2 est de seulement 0,0161 moles par mole de CH_4 brûlé. On peut en réalité s'attendre à une production beaucoup plus importante de suie et de monoxyde de carbone dans les conditions de sous-ventilation à l'étude, d'où une production réduite de CO_2 .

Au niveau de l'indépendance des résultats à la taille du maillage utilisé, on constate à partir des figures 5.12 à 5.15 que les différences, bien que présentes, ne sont pas très marquées. Du point de vue de l'historique des températures, on observe une hausse anormale de la température qui débute à environ 210 secondes et qui dure jusqu'au retour de flamme. Cette anomalie est causée par une augmentation du dégagement de chaleur qui semble être liée à l'introduction d'une certaine quantité d'oxygène dans le conteneur par le biais des fuites. En effet, alors que la flamme était quasi-absente entre 90 et 200 secondes environ à cause du manque d'oxygène, celle-ci augmente subitement puis continue de brûler avec une intensité diminuée. Comme la combustion est guidée par le mélange du carburant et de l'oxygène, il apparaît évident que ce saut dans l'intensité de la flamme provient d'un apport en oxygène. Il n'est toutefois pas évident d'analyser comment la finesse du maillage influence la diffusion de l'oxygène au travers des fuites jusqu'au brûleur.

Si on observe les graphiques du débit au niveau des fuites pour les deux maillages (cf. figures 5.16 et 5.17), on s'aperçoit que la fluctuation des débits est plus forte pour le maillage raffiné et l'on constate que les écoulements dans les fuites sont de sens opposé. L'écoulement des fuites situées dans la partie inférieure se dirige vers l'intérieur du conteneur alors que l'écoulement des fuites supérieures se dirige vers l'extérieur du conteneur. La soudaine hausse du dégagement de chaleur pourrait donc possiblement s'expliquer par une meilleure diffusion de l'oxygène qui entre par les fuites au niveau inférieur du conteneur et qui se rend jusqu'au brûleur. Ceci n'est toutefois qu'une

hypothèse et des travaux supplémentaires devraient être effectués afin de cerner les raisons exactes de cet accroissement de température. Par exemple, il pourrait être intéressant de réduire la largeur des fuites à 5cm tout en conservant la même surface totale de fuites et d'observer l'impact de cette modification sur le profil de température. Malheureusement, en considération du temps de calcul considérable nécessaire pour effectuer ces simulations, celles-ci ne peuvent faire partie du présent ouvrage. On peut toutefois conclure que la réduction de moitié de la taille du maillage a un impact relativement faible sur la tendance générale de l'historique des températures, et il apparaît de plus que cette réduction améliore légèrement la qualité des résultats, surtout en ce qui concerne la durée de l'explosion. En effet, la simulation effectuée avec un maillage réduit nous donne une explosion légèrement plus courte (cf. figures 5.12 et 5.13).

Du côté de la concentration des espèces, les seules différences dignes de mention sont la présence de fortes oscillations dans les mesures durant la période initiale où la flamme est présente et la durée accrue de la période avant que l'oxygène ne soit épuisé. Les oscillations dans la concentration des espèces sont sans doute causées par la meilleure résolution de l'écoulement et des vortex à l'intérieur du conteneur, ce qui pourrait entraîner de plus grandes fluctuations dans les mesures de concentrations. La hausse du temps nécessaire pour atteindre l'épuisement des stocks d'oxygène, pour sa part, est sûrement reliée au plus grand apport d'oxygène par les fuites, tel que mentionné précédemment. Malgré ces différences pointues, la tendance générale de la variation des concentrations et des températures est tout de même conservée, ce qui nous permet de croire que le maillage initial est suffisamment concentré, du moins pour saisir les aspects généraux du phénomène en cause.

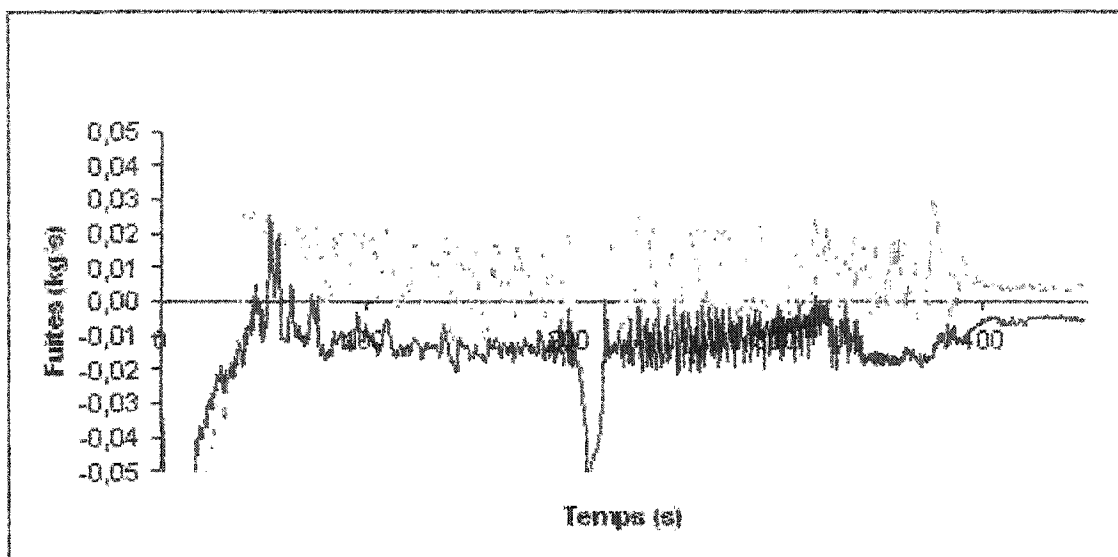


Figure 5.16 : Débits au niveau des fuites (maillage raffiné)

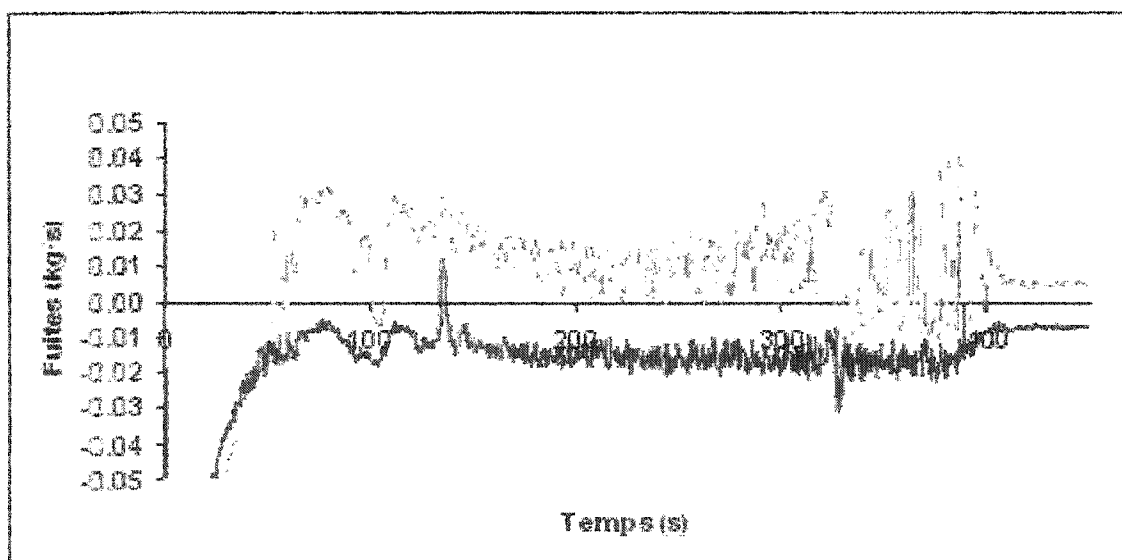


Figure 5.17 : Débits au niveau des fuites (maillage grossier)

CHAPITRE 6

MODIFICATIONS APPORTÉES ET RÉSULTATS

Une fois les résultats préliminaires analysés, deux modifications seront faites dans le but d'améliorer la simulation des retours de flamme avec FDS v3.10. La première modification vise à améliorer la concentration en dioxyde de carbone tout au long de la simulation et la deuxième vise à permettre au courant de gravité de se produire lorsque l'ouverture est créée.

6.1 Modification des paramètres réactionnels

La première modification envisagée consiste à modifier les paramètres de la réaction de combustion du méthane pour mieux tenir compte des conditions dans lesquelles cette réaction se produit.

6.1.1 Considérations chimiques

Le problème relié à la production excessive de dioxyde de carbone lors de la combustion dans le conteneur est très complexe car il s'agit en fait d'un problème d'équilibre chimique transitoire impliquant un grand nombre de mécanismes réactionnels distincts. La formation de CO₂ et de CO dans les incendies sous-ventilés est encore de nos jours un sujet de recherche actif. En effet, à ce jour, plus de 275 réactions élémentaires du mécanisme de combustion du méthane ont été identifiées [47], dont au moins 57 font appel au CO₂ ou au CO.

Toutefois, si l'on fait appel au diagramme de cheminement de la réaction de combustion du méthane à basse température (cf. figure 6.1) [47], on constate que la formation du dioxyde de carbone est principalement issue de l'oxydation du monoxyde de carbone par l'entremise de la réaction suivante :



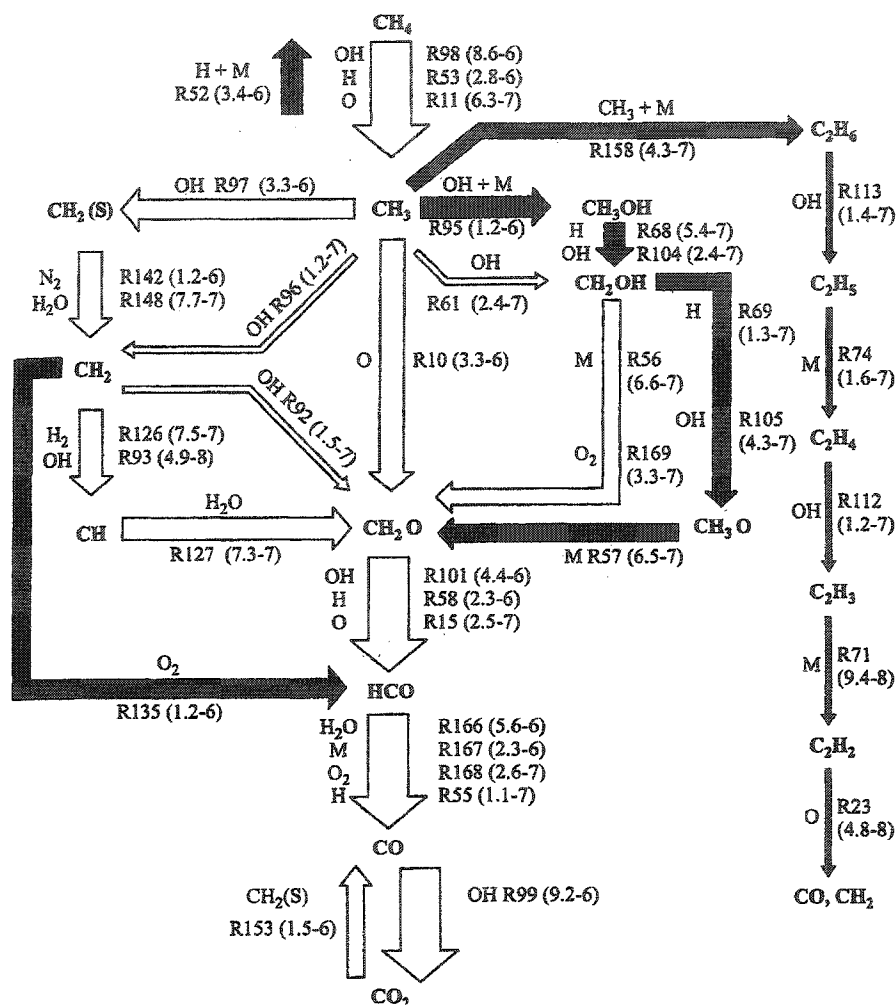


Figure 6.1 : Diagramme du cheminement de la réaction de combustion du méthane à basse température (<1500K)

La réaction (24) constitue l'étape clé dans l'oxydation du monoxyde de carbone, mais fait toutefois partie d'un mécanisme global d'oxydation du monoxyde de carbone (assumant que l'eau est la principale espèce du milieu contenant de l'hydrogène). Si l'on simplifie la réaction de combustion du méthane, celle-ci peut se diviser en deux étapes. La première étape est la décomposition de la molécule d'hydrocarbure en molécules de monoxyde de carbone et autres espèces, alors que la deuxième constitue l'étape d'oxydation du monoxyde de carbone. Cette deuxième étape peut être modélisée par le mécanisme réactionnel suivant :



De ces quatre étapes, la réaction (27) est la plus importante grâce à sa grande vitesse permise par l'implication du radical hydroxyle (OH). On constate de plus que la présence de ce radical OH est issue des réactions (29) et (30), qui toutes deux dépendent de la présence d'oxygène dans le milieu. Il apparaît donc à partir de ces mécanismes que la formation de CO₂ lors de la combustion d'un hydrocarbure est fortement tributaire de la présence d'oxygène dans le système.

D'un point de vue plus global, il est largement reconnu que la production de monoxyde de carbone est favorisée par la combustion d'un mélange riche en carburant. Or, la production additionnelle de CO doit au moins partiellement résulter en une diminution de la production de CO₂, comme l'indique la figure 6.2 qui illustre la proportion des différents produits de la combustion du propane dans l'air en fonction du rapport de mélange Φ [47].

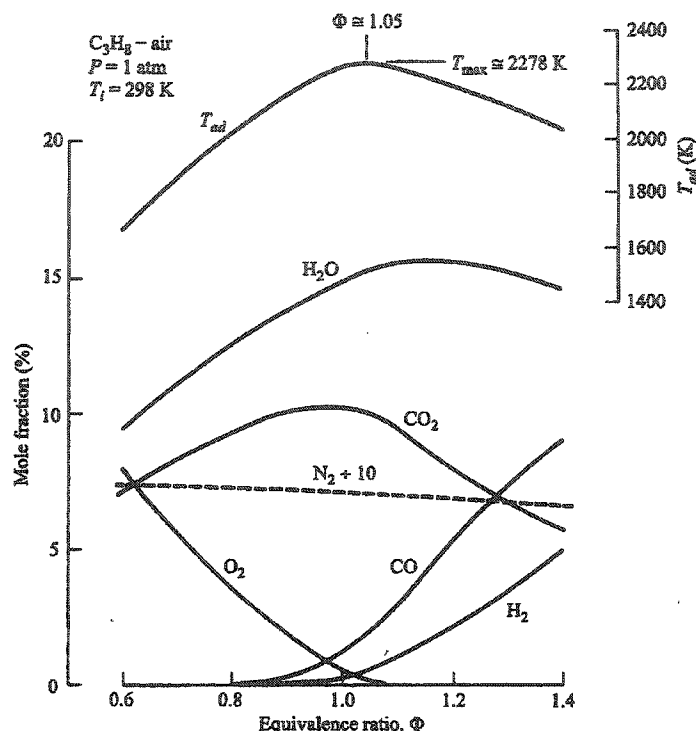


Figure 6.2 : Produits majeurs de la combustion du propane dans l'air à 1 atm

On remarque qu'entre des valeurs de Φ variant de 1.0 à 1.4, la production de monoxyde de carbone augmente d'un facteur 8 environ et la production en dioxyde de carbone diminue d'environ 50%. Puisque dans le cas qui nous intéresse le rapport de mélange Φ passe d'une valeur proche de l'unité au moment initial (flamme de diffusion pure) jusqu'à une valeur très élevée juste avant l'extinction de la flamme par manque d'oxygène, la production de CO_2 et de CO est donc extrêmement variable. Il n'est donc pas surprenant que la production de CO_2 soit surestimée puisque les paramètres réactionnels utilisés par FDS tout au long de la simulation sont représentatifs de la réaction stoechiométrique ($\Phi=1$).

Il apparaît donc que le problème de surproduction de dioxyde de carbone est relié à l'utilisation du logiciel en dehors de sa plage de validité, car FDS ne permet pas à ce point-ci de faire varier les paramètres réactionnels en fonction de la composition du milieu. Une modification de FDS permettant cette variation des paramètres réactionnels

impliquerait plusieurs choses : le calcul du rapport de mélange dans la zone entourant la flamme, l'élaboration de relations d'états (cf section 2.2.3) pour divers rapports de mélange ou une technique d'extrapolation des relations d'états pour des conditions non stœchiométriques, ainsi qu'une méthode permettant de relier le rapport de mélange et les relations d'états qui y sont associées à la fraction de mélange Z . Tout ceci demanderait des modifications profondes au logiciel, et peut-être même l'élaboration d'un nouveau modèle de combustion permettant de tenir compte de la variation du rapport de mélange durant la simulation. Ces modifications dépassant largement le cadre de ce travail, seuls les paramètres réactionnels de la réaction de combustion du méthane seront modifiés de manière à rapprocher les résultats expérimentaux quant à la concentration en CO_2 . De plus, puisque la concentration trop faible en oxygène est aussi due au modèle de combustion utilisé (cf. section 5.5), aucune modification ne sera faite pour rapprocher les valeurs obtenues des valeurs expérimentales.

6.1.2 Modification des paramètres réactionnels

Tel que mentionné dans la section 5.5, les concentrations de CO_2 maximales atteintes sont de presque 10% alors que les valeurs expérimentales sont d'environ 2,7%. Il semble toutefois que les valeurs expérimentales obtenues soient du moins légèrement erronées. En effet, si l'on se rapporte aux travaux effectués par W.M. Pitts dans les années '90 [48,49], une concentration en CO_2 de seulement 2,7%, même pour un incendie sous-ventilé, semble être trop faible. Les travaux en question font la synthèse sur un ensemble d'expériences menées afin de caractériser la production de monoxyde de carbone dans les incendies en enceintes. Un fait intéressant à noter dans cette étude est l'absence, dans tous les cas étudiés sans exception, d'une concentration en CO_2 inférieure à 6%, et ce même pour les incendies fortement sous-ventilés.

Des résultats très significatifs pour la présente étude se retrouvent dans ces travaux sous la forme d'une expérience similaire à celle que nous tentons de reproduire numériquement ici. Une série d'expériences a été menée au NIST dans une enceinte de

format réduit (0,98 x 1,46 x 0,98 mètres) avec du gaz naturel comme carburant. Les dégagements de chaleur étudiés varient de 10 à 670 kW, ce qui est tout à fait analogue aux conditions de la présente étude. Pour une flamme de 500 kW (ce qui correspond dans ce cas-ci à un rapport de mélange Φ d'environ 3.0), les concentrations en CO_2 obtenues sont de l'ordre de 7 à 8%. Il faut néanmoins apporter un bémol à ces résultats car la température de la couche chaude, qui influence la formation de CO et de CO_2 , est de l'ordre de 1000 K alors que dans le cas qui nous intéresse, elle est plutôt de 500 K. Ces résultats (ainsi que d'autres qui seront discutés ultérieurement) indiquent bien malgré tout que des concentrations en dioxyde de carbone de 3% semblent être particulièrement basses. Dans cette optique, les modifications qui seront faites aux paramètres réactionnels de la réaction de combustion du méthane ne viseront pas à atteindre les valeurs expérimentales obtenues par Gojkovic mais viseront plutôt à abaisser les concentrations en CO_2 à des valeurs plus acceptables par rapport aux éléments contenus dans la littérature.

Plusieurs aspects seront considérés quant à la modification de la réaction de combustion du méthane. Premièrement, la production de monoxyde de carbone sera évaluée en fonction des conditions de combustion, ce qui aura un impact direct sur la production de CO_2 . De la même manière, la production de suie sera modifiée et finalement les nouveaux coefficients stoechiométriques seront calculés pour obtenir une concentration de dioxyde de carbone acceptable.

En ce qui concerne la formation de monoxyde de carbone, les résultats issus des travaux de Mulholland [50], de Cetegen [51], de Toner [52], de Morehart[53], de Santoro[54,55] ainsi que les travaux en enceintes réduites du NIST[56] seront utilisés comme base de prédiction des concentrations en CO.

Les travaux initiaux de Mulholland stipulent que le facteur de production de CO (y_{CO}) doit être égal à 0,3 gramme de CO/gramme de carburant consommé pour les incendies

sous-ventilés. Cette valeur correspond bien avec celles obtenues par Santoro pour la combustion du méthane. Celui-ci obtient, pour des rapports de mélange de l'ordre de 2.0, un facteur de production de CO égal à 0,29 $\text{g}_{\text{CO}}/\text{g}_{\text{CH}_4}$. Du côté de Cetegen, Toner et Morehart, on s'intéresse plutôt aux concentrations de CO atteintes. Cetegen, qui utilise du gaz naturel comme carburant, constate que la concentration en monoxyde de carbone augmente subitement pour $0,5 < \Phi < 1,6$ et demeure relativement constante à environ 2,4% vol pour des valeurs de rapport de mélange supérieurs. Ces résultats sont corroborés par les travaux de Toner, qui utilise lui aussi du gaz naturel mais pour qui le plateau de la concentration en CO est situé à une valeur de 1,9% vol. Les travaux de Morehart, pour leur part, font état d'une corrélation entre la température des produits et la concentration en CO. Il constate en effet que même si les variations des concentrations en monoxyde de carbone sont bien dépendantes du rapport de mélange, les valeurs absolues de ces concentrations diminuent lorsque la température des produits de combustion diminue. Il est conclu dans l'étude de W.M. Pitts qu'à des températures inférieures à 500 K, les réactions sont très lentes et les concentrations sont donc pratiquement indépendantes de la température. Puisque les températures enregistrées dans le conteneur durant la période de combustion sont de cet ordre de grandeur, les valeurs obtenues par Morehart devraient être de bonnes valeurs étalon pour la formation de monoxyde de carbone. Il est d'ailleurs mentionné que pour des températures inférieures à 700 K, le rapport de mélange peut être utilisé pour définir les concentrations des produits de combustion, particulièrement s'il existe peu ou pas de mélange entre la couche chaude et la couche froide.

Ainsi, avec ces données, des valeurs cibles de 2% vol de CO seront utilisées, ce qui correspond dans notre cas à un facteur de production de CO égal à 0,34 environ. Cette valeur correspond bien aux résultats de Santoro et al. qui ont noté un facteur de production de monoxyde de carbone plafonnant à 0,37 et une augmentation d'un facteur 100 du y_{CO} mesurée en conditions de sous-ventilation pour le méthane.

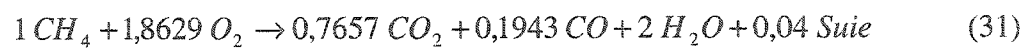
Pour effectuer les modifications relatives à la production de suie lors de la combustion sous-ventilée du méthane, il existe des résultats intéressants dans les travaux de Santoro et al., dans les travaux de Shaddix et Smyth [57] ainsi que dans ceux de Shaddix, Everest et Smyth [58]. Ces derniers [57,58] indiquent que la fraction volumique de suie observée augmente d'un facteur 5 lorsque la flamme est oscillante par rapport à une flamme stable. D'un autre côté, Santoro et al. ont mesuré un facteur de production de suie plafonnant à $0,01 \text{ g}_{\text{suie}}/\text{g}_{\text{CH}_4}$ en conditions sous-ventilées, ce qui correspond à la valeur déjà imposée dans FDS pour la combustion du méthane. Ce facteur de production de suie résulte en une concentration volumique d'environ 0,1%, ce qui semble plutôt faible lorsqu'on observe les photos prises par Gojkovic lors de ses expériences de retours de flammes (cf. figure 6.3). En effet, ces photos, malgré leur mauvaise qualité, démontrent la présence d'une épaisse fumée dans le conteneur avant son ouverture, ainsi que l'expulsion de cette fumée lors de l'ignition du backdraft. Un choix a donc été fait d'augmenter le facteur de production de suie à une valeur permettant une hausse d'un facteur 3 de la concentration en suie. On passe donc d'un facteur de production de suie $y_{\text{suie}}=0,01$ à un nouveau facteur $y_{\text{suie}}=0,03$.



Figure 6.3 : Photo du conteneur après l'allumage du retour de flamme

Une fois ces nouveaux paramètres introduits dans l'équation de combustion du méthane, la concentration en dioxyde de carbone chute jusqu'à une valeur plus réaliste d'environ 7,6%. Voici donc la nouvelle réaction de combustion du méthane telle qu'elle sera

utilisée par FDS (les paramètres d'entrée de FDS pour cette nouvelle réaction sont présentés à l'annexe B-3) :



6.1.3 Résultats de la modification des paramètres réactionnels

Une fois les modifications effectuées, deux nouvelles simulations (avec et sans fuites) ont été réalisées. Les nouveaux résultats de la concentration des espèces en fonction du temps pour les deux cas sont présentés sur les figures 6.4 et 6.5 :

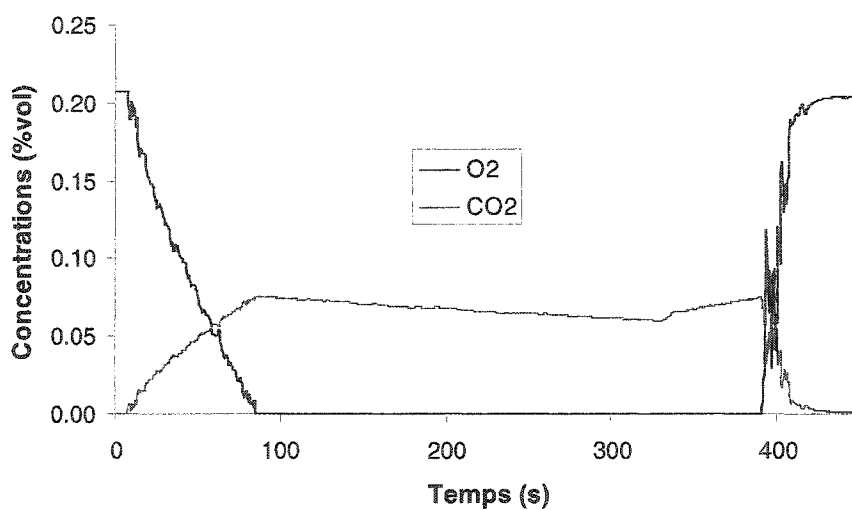


Figure 6.4 : Valeurs simulées des concentrations en O_2 et CO_2 avec modification des paramètres réactionnels (sans fuites)

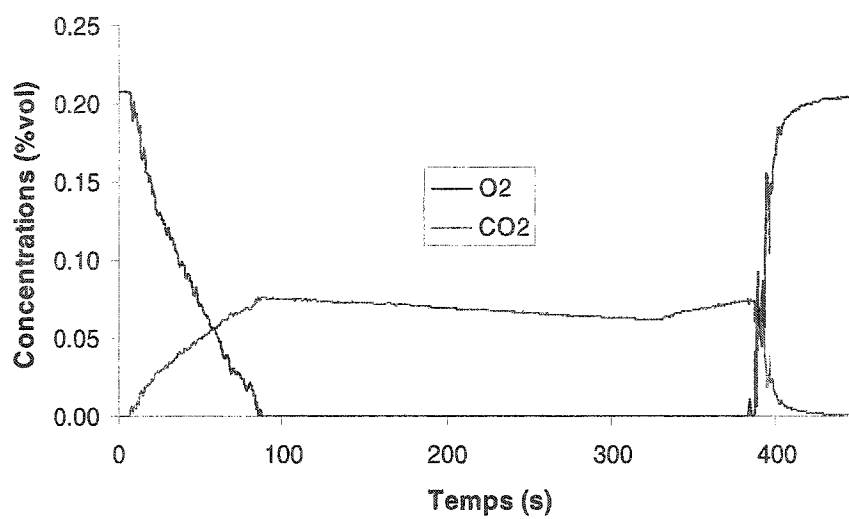


Figure 6.5 : Valeurs simulées des concentrations en O₂ et CO₂ avec modification des paramètres réactionnels (avec fuites)

6.2 Suppression de la combustion durant le courant de gravité

Tel que mentionné dans le chapitre précédent, un des problèmes majeurs constaté lors de la simulation de retours de flamme est l'absence d'un courant de gravité au moment de l'ouverture du conteneur à l'air ambiant. Les conséquences de ce problème sont nombreuses et affectent autant l'historique des températures et l'explosion que l'historique de la concentration des espèces.

6.2.1 Mécanismes associés aux retours de flamme

De façon générale, il est largement reconnu que la présence d'un retour de flamme dépend fortement de la concentration en hydrocarbures imbrûlés et de la zone d'inflammabilité de l'hydrocarbure en question lorsque mélangé à l'air [27,28]. En effet, ceci s'explique assez aisément si l'on observe le diagramme ternaire d'inflammabilité méthane-oxygène-azote :

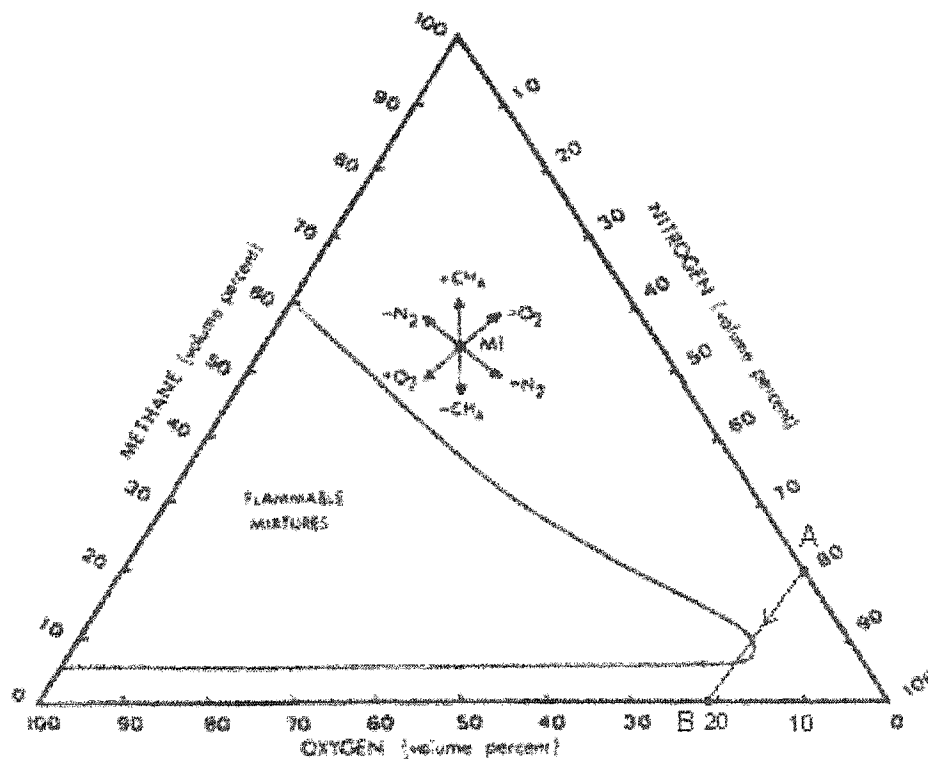


Figure 6.6 : Diagramme d'inflammabilité ternaire méthane-oxygène-azote

Si l'on considère que les produits de combustion peuvent être approximatés par de l'azote, tout juste avant que l'ouverture soit créée, le mélange présent dans le conteneur doit se situer sur l'axe où la concentration en oxygène est nulle (lors des simulations la concentration en oxygène devient effectivement nulle). Dans cette étude, le mélange à l'intérieur du conteneur se situe au point A, car la concentration en méthane au moment de l'ouverture est d'environ 20% (cf. figures 5.6 et 5.7). L'air ambiant, pour sa part, se situe sur l'axe où la concentration en méthane est nulle et où la concentration en oxygène est de 23% massique, c'est-à-dire au point B. Comme nous sommes en présence de deux milieux relativement homogènes qui se mélangent l'un à l'autre (air frais et mélange méthane + produits de combustion), le mélange résultant progresse du point initial A vers le point B au fur et à mesure que le mélange s'effectue. Cette progression se produit par l'entremise du courant de gravité qui provoque le mélange des deux milieux. Comme le mélange doit obligatoirement se situer dans l'enveloppe d'inflammabilité pour brûler, la présence d'un backdraft est conditionnelle au passage du mélange au travers de la zone d'inflammabilité. Par exemple, dans notre cas, la ligne reliant les points A et B passe nettement au travers de cette zone et il y aura donc présence d'un backdraft si ce mélange inflammable est allumé, ce qui constitue une autre condition pour la création d'un retour de flamme.

Ainsi, il apparaît que le courant de gravité est essentiellement responsable de deux choses. Tout d'abord, il permet le mélange des deux milieux présents de la façon décrite dans le paragraphe précédent. Deuxièmement, le courant de gravité permet au mélange inflammable créé de progresser vers la source d'ignition sans laquelle aucun retour de flamme ne serait possible. On se retrouve donc avec une condition double pour la présence d'un retour de flamme. Non seulement le mélange résultant du courant de gravité doit être dans la zone d'inflammabilité, mais il doit de plus l'être lorsqu'il arrive aux environs de la source d'ignition. C'est donc dans cette optique que fut créée la méthode de suppression de la combustion présentée dans la section suivante.

6.2.2 Méthode

Afin de permettre au courant de gravité de se produire lorsque le conteneur est ouvert, il faut retarder la combustion jusqu'à ce que le courant ait rempli ses deux fonctions mentionnées plus tôt, c'est-à-dire mélanger le carburant et l'oxygène contenu dans l'air frais et apporter ce mélange combustible jusqu'à la source d'ignition. L'arrêt de la combustion est nécessaire car c'est cette combustion qui empêche l'air frais de pénétrer dans le conteneur par la poussée ascensionnelle qu'elle produit et par la réaction chimique qui l'engendre.

Pour ce faire, différents modules de FDS ont été modifiés de manière à introduire un nouveau paramètre facultatif qui apparaîtra dans les fichiers d'entrée de FDS. Ce nouveau paramètre, appelé NOHR (pour «NO Heat Release») est composé de cinq éléments obligatoires, ainsi que de quatre éléments facultatifs. Voici la description de l'usage de chacun :

- XYZ : Coordonnées de la source d'ignition du backdraft
- TSTOP : Instant où la combustion est stoppée en secondes
- QUANTITY : Variable critique dont l'atteinte d'une certaine valeur au point XYZ permet le retour de la combustion
- NOHR_QUANTITIES : Variante de QUANTITY permettant de prescrire jusqu'à trois variables critiques (facultatif)
- ACTIVATION_VALUE : Valeur de la variable QUANTITY qui, lorsqu'elle est atteinte, permet à la combustion de recommencer
- ACTIVATION_VALUES : Valeurs des variables NOHR_QUANTITIES, qui, lorsqu'elles sont toutes atteintes, permettent à la combustion de recommencer (facultatif)
- DIRECTION : Entier égal à 1 ou -1 indiquant si la valeur ACTIVATION_VALUE est une limite inférieure ou supérieure

- DIRECTIONS : Entiers égaux à 1 ou -1 indiquant pour chaque ACTIVATION_VALUES si la valeur est une limite inférieure ou supérieure (facultatif)
- T_REACTIVATION : Instant où la combustion recommence indépendamment de la valeur de la variable (ou des variables) spécifiée(s) (facultatif)

La méthode d'utilisation est la suivante (afin d'alléger le texte une seule variable critique sera considérée. Le principe est le même pour la deuxième ou troisième variable). Tout d'abord, l'utilisateur doit spécifier l'emplacement de la source d'ignition du backdraft. Dans le cas qui nous intéresse, cette source est située au dessus du brûleur, près du panneau limiteur de pression (cf. section 4.1.2).

Dans un deuxième temps, il faut spécifier à quel moment arrêter la combustion. Il y a ici deux possibilités : soit l'on spécifie l'instant où l'ouverture est créée, soit l'on spécifie l'instant où la flamme s'éteint par manque d'oxygène. La deuxième méthode doit être utilisée prudemment car si la variable critique est la fraction de carburant, l'accumulation de carburant (produits de pyrolyse) dans le milieu risque de provoquer le retour à la combustion avant même que l'ouverture ne soit créée. Il est donc préférable d'utiliser la première méthode afin que les seules variations dans la variable critique proviennent de l'effet du courant de gravité.

Ensuite, il faut spécifier quelle variable critique va permettre le retour de la combustion (cf. Annexe C-1 pour la liste des variables utilisables). Il s'agit ici de déterminer quelle variable caractérise le mieux les conditions d'inflammabilité produites par le courant de gravité. Les variables à considérer sont évidemment celles qui varient durant le courant de gravité. Ainsi, les variables telles que la fraction de carburant et la fraction d'oxygène sont des possibilités évidentes mais d'autres variables pourraient aussi être utilisées comme la température ou la fraction de mélange.

Il faut ensuite indiquer quel seuil cette variable doit atteindre afin que la combustion recommence. Si par exemple la variable critique choisie est la fraction de carburant, il serait possible que l'on désire que la combustion recommence lorsque la fraction de carburant passe sous le seuil de 14%, ce qui représente la limite d'inflammabilité supérieure du méthane dans l'air. Cette valeur (ACTIVATION_VALUE) est couplée à un élément directionnel (DIRECTION) qui indique si le seuil est un seuil inférieur ou supérieur. Dans l'exemple précédent, la direction serait égale à -1 pour indiquer que la fraction de carburant doit être *inférieure* à 14% pour que la combustion recommence. Si l'on désire que la combustion reprenne lorsque le taux d'oxygène *dépasse* 5% par exemple, l'élément direction associé à la fraction d'oxygène devrait être égal à +1.

Finalement, il est possible de faire recommencer la combustion sans que les variables critiques aient atteint leur seuil, à l'aide de l'élément T_REACTIVATION. Cet élément est surtout utile lorsque le temps avant l'allumage du retour de flamme est connu, et l'on peut ainsi spécifier ce moment manuellement en fournissant une valeur inatteignable pour la variable critique. Par exemple, si l'on connaît grâce à des résultats expérimentaux le temps avant l'ignition du backdraft, on pourrait spécifier comme variable critique la température et comme seuil 10000 degrés Kelvin afin que cette valeur ne soit jamais atteinte et que la combustion soit réactivée au moment indiqué par l'élément T_REACTIVATION.

Voici donc deux exemples de spécification du paramètre NOHR tels qu'on pourrait les retrouver dans un fichier d'entrée de FDS :

```
&NOHR XYZ=0.50,1.10,1.0, TSTOP=325.0, QUANTITY=`fuel`,
ACTIVATION_VALUE=0.14, DIRECTION=-1, T_REACTIVATION=335. /
```

```
&NOHR XYZ=0.50,1.10,1.0, TSTOP=325.0, NOHR_QUANTITIES=`fuel`, `oxygen`,
`TEMPERATURE`, ACTIVATION_VALUES=0.14,0.05,35, DIRECTIONS=-1,1,-1
T_REACTIVATION=350. /
```

6.2.3 Résultats de la méthode de suppression de la combustion

Afin de vérifier les possibilités de la méthode présentée, quatre nouvelles simulations ont été réalisées dont les caractéristiques sont résumées dans le tableau 6.1.

Tableau 6.1 : Résumé des simulations avec suppression de la combustion

Simulation	FUITES		VARIABLE CRITIQUE	
	Avec fuites	Sans fuites	Oxygène	Méthane
C-1		X	X	
C-2	X		X	
C-3		X		X
C-4	X			X

Pour les deux simulations effectuées avec l'oxygène comme variable critique, le paramètre NOHR suivant a été ajouté aux fichiers d'entrée de base (Annexes A-1 et A-2) :

```
&NOHR XYZ=0.25,1.10,1.00, TSTOP=325., QUANTITY='oxygen',  
ACTIVATION_VALUE=0.12, DIRECTION=1 /
```

Lorsque le méthane est la variable critique considérée, le paramètre NOHR suivant a été ajouté aux mêmes fichiers d'entrée :

```
&NOHR XYZ=0.25,1.10,1.00, TSTOP=325., QUANTITY='fuel',  
ACTIVATION_VALUE=0.11, DIRECTION=-1 /
```

Les seuils pour les variables critiques ont été obtenus à partir du diagramme d'inflammabilité ternaire méthane-oxygène-azote (cf. figure 6.4) au point d'intersection de la ligne B-A et de l'enveloppe d'inflammabilité. Ce point d'intersection nous donne une concentration volumique d'environ 12% pour l'oxygène et d'environ 11% pour le méthane. Il est intéressant de noter que cette fraction volumique de méthane ne correspond pas à la limite d'inflammabilité supérieure du méthane dans l'air. En effet, puisque l'oxygène et le méthane sont dilués dans une substance inerte représentée par

l'azote et qu'il y a donc plus d'azote que ce que l'on retrouve dans l'air, la plage d'inflammabilité s'en trouve réduite.

Températures

Les nouveaux profils de température obtenus pour les quatre simulations effectuées avec la méthode de suppression de la combustion sont présentés sur les figures 6.7 à 6.10.

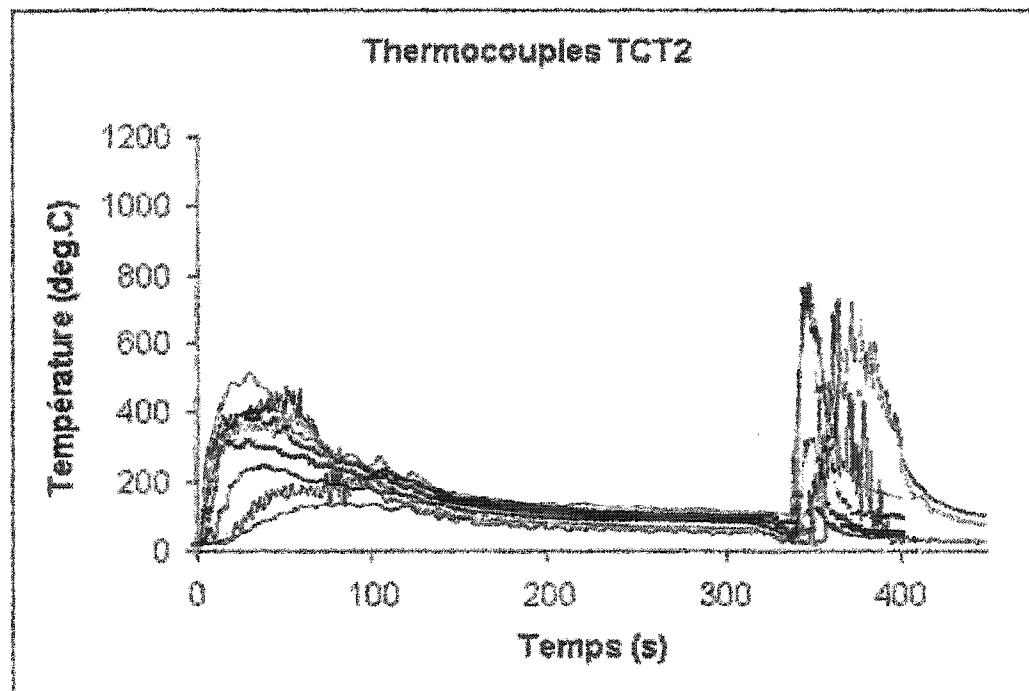


Figure 6.7 : Comparaison des températures (simulation C-1)

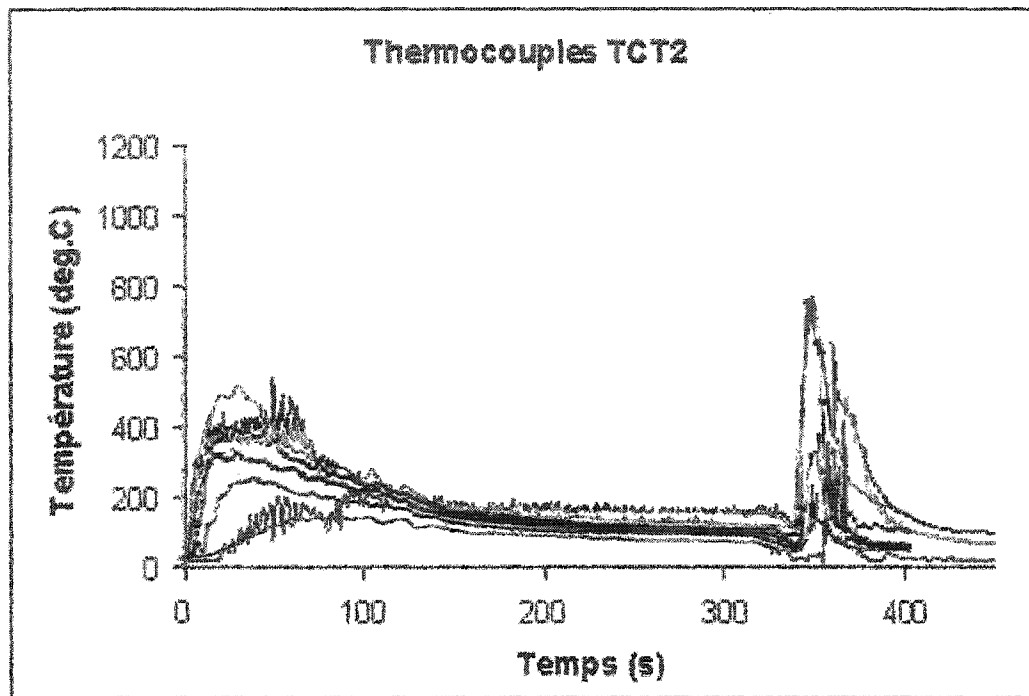


Figure 6.8 : Comparaison des températures (simulation C-2)

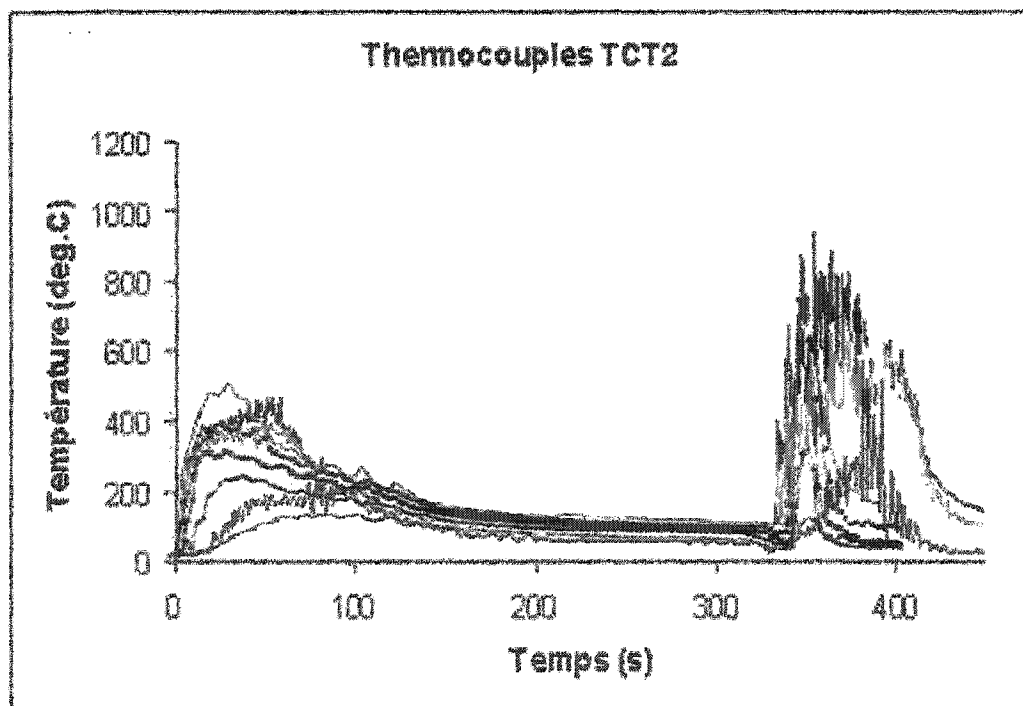


Figure 6.9 : Comparaison des températures (simulation C-3)

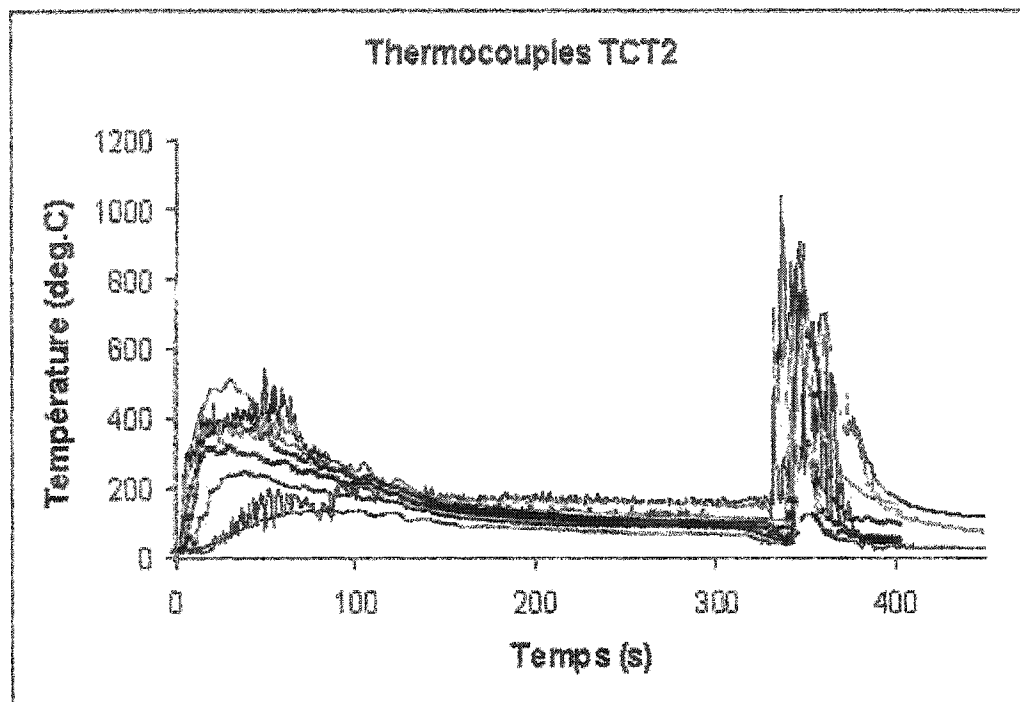


Figure 6.10 : Comparaison des températures (simulation C-4)

Accumulation des produits de pyrolyse

Les concentrations en méthane en fonction du temps pour les quatre simulations sont illustrées sur les figures 6.11 à 6.14. Même si le taux de production du méthane est inchangé par rapport aux simulations préliminaires, la présence d'un courant de gravité devrait engendrer certaines modifications au niveau de l'historique de la concentration en méthane durant la période où ce courant progresse vers la source d'allumage.

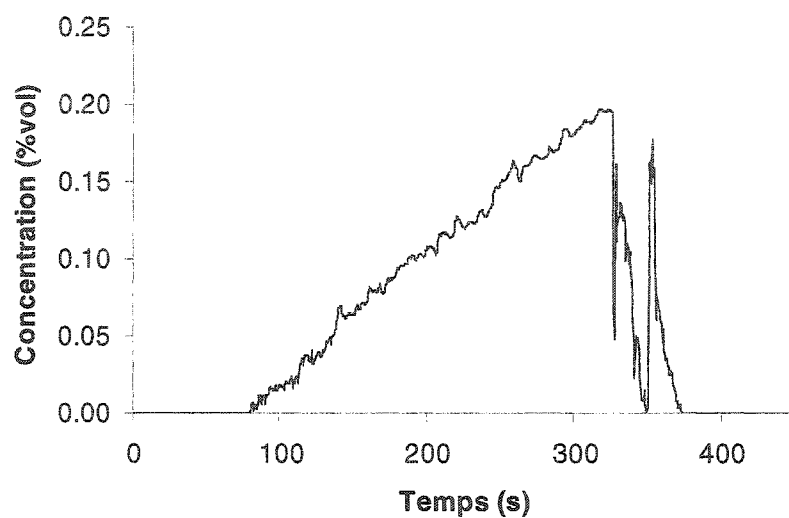


Figure 6.11 : Valeurs simulées de la concentration en méthane (simulation C-1)

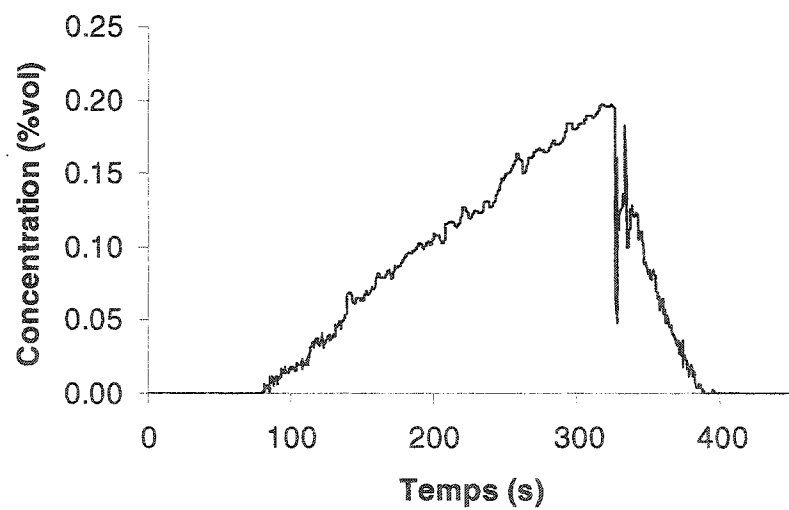


Figure 6.12 : Valeurs simulées de la concentration en méthane (simulation C-2)

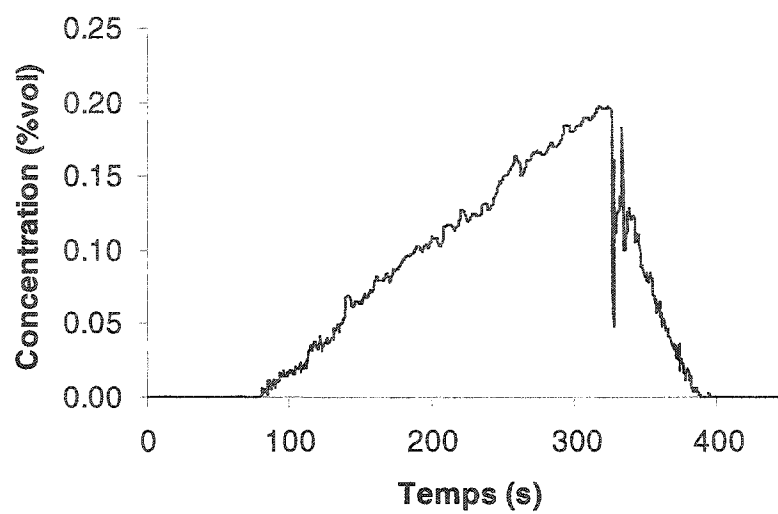


Figure 6.13 : Valeurs simulées de la concentration en méthane (simulation C-3)

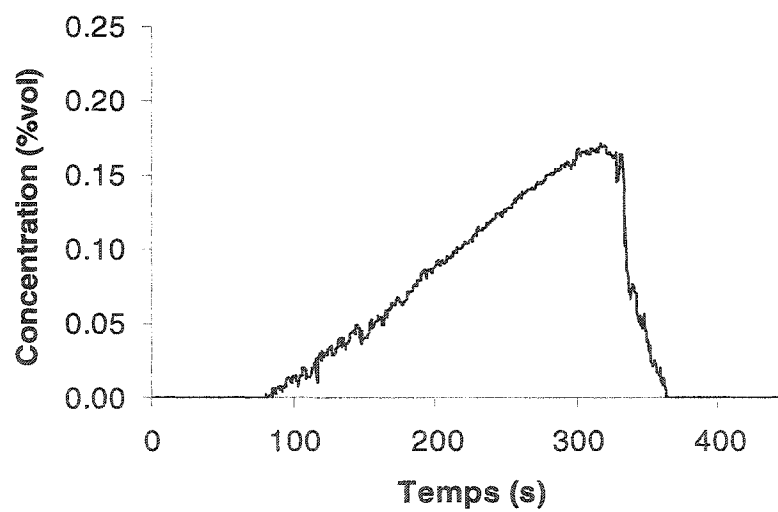


Figure 6.14 : Valeurs simulées de la concentration en méthane (simulation C-4)

Courant de gravité

Puisque le but de la méthode de suppression de la combustion est de permettre au courant de gravité de se produire, il serait intéressant de vérifier si ce courant est bien présent. La figure 6.15 nous donne un aperçu du délai avant l'ignition du backdraft et du léger refroidissement qui se produit au niveau des thermocouples inférieurs lors de la progression du courant de gravité. En effet, par opposition aux données de la figure 5.8, on remarque que l'augmentation de la température (et donc la combustion) ne débute pas à 325 secondes (moment de l'ouverture) mais plutôt vers 330-332 secondes. Bien que le délai avant l'ignition ne soit pas tout à fait suffisant pour permettre une correspondance quasi-parfaite entre les valeurs expérimentales et les valeurs numériques (cf. figure 6.10), il apparaît que le courant de gravité est effectivement présent.

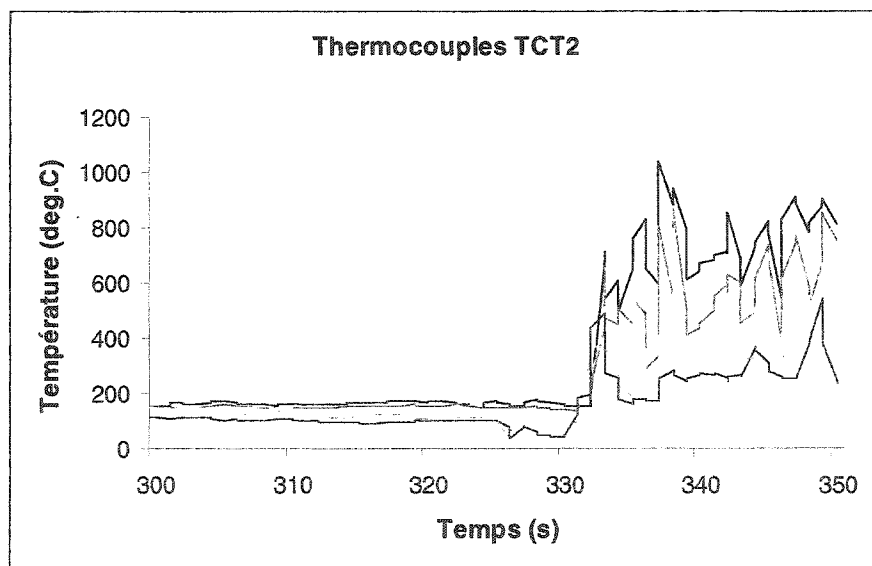


Figure 6.15 : Valeurs simulées des températures entre 300 et 350 secondes (simulation C-4)

La présence de ce courant est d'autant plus évidente lorsqu'on observe la figure 6.16, qui montre la valeur de la fraction de mélange sur l'axe central du conteneur pour la simulation C-4 après 330 secondes. On constate en effet la présence du courant de gravité (en bleu) qui entre dans le conteneur par la portion inférieure de l'ouverture, de même que le courant sortant de la portion supérieure de l'ouverture. Cette figure nous

permet aussi de voir le mélange qui s'effectue au niveau de l'interface entre le courant de gravité et les gaz présents dans le conteneur. On remarque en effet que l'air ambiant (bleu) qui entre dans le conteneur se mélange peu à peu aux autres gaz au fur et à mesure de sa progression vers la source d'ignition. Ce mélange se traduit par la variation de couleur à l'interface du courant de gravité, où le mélange passe de l'air frais jusqu'à un mélange de produits de combustion et de carburant (rouge).

Un dernier aspect intéressant par rapport au courant de gravité est la présence, lors de l'allumage du retour de flamme, d'une zone de combustion le long de l'interface entre le courant de gravité et le mélange gazeux composé de carburant et de produits de combustion. Ceci est intéressant du fait que ce phénomène fut constaté à quelques reprises lors d'études sur les retours de flamme [5,26] et qu'il semble que la méthode utilisée permette de reproduire ce phénomène jusqu'à un certain point. Comme on peut constater à l'aide de la figure 6.17, qui montre la surface estimée de la flamme tout de suite après l'allumage du backdraft, la flamme initiale qui crée l'expansion expulsant les gaz à l'extérieur de l'enceinte est formée à l'interface du courant de gravité, c'est-à-dire là où il existe un mélange approprié de l'air frais et du carburant (zone verte sur la figure 6.16).

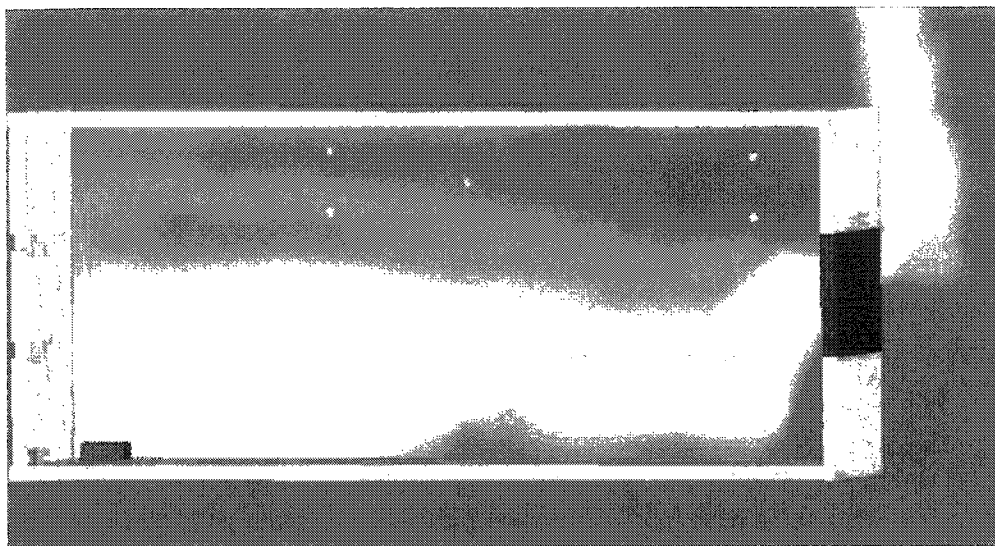


Figure 6.16 : Coupe des valeurs de la fraction de mélange au centre du conteneur après 330 secondes (simulation C-4)

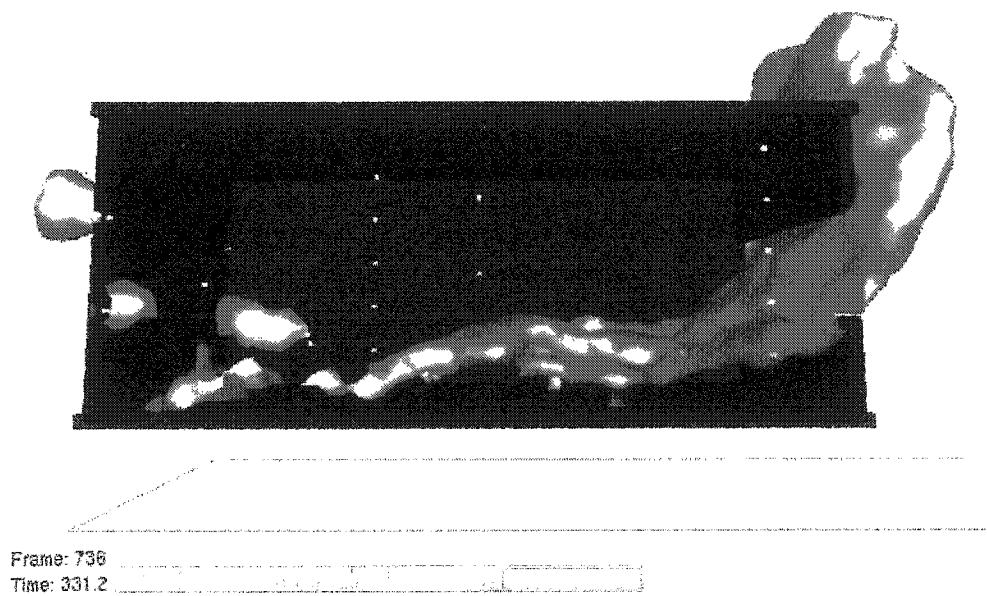


Figure 6.17 : Surface estimée de la flamme à 331,2 secondes (simulation C-4)

Explosion

Voyons à présent comment la suppression de la combustion durant le courant de gravité influence l'explosion caractéristique des retours de flamme. Les figures 6.18 à 6.21 montrent, pour chaque simulation (C-1 à C-4), la plus grande surface de flamme obtenue dans les instants suivant l'ignition du retour de flamme.

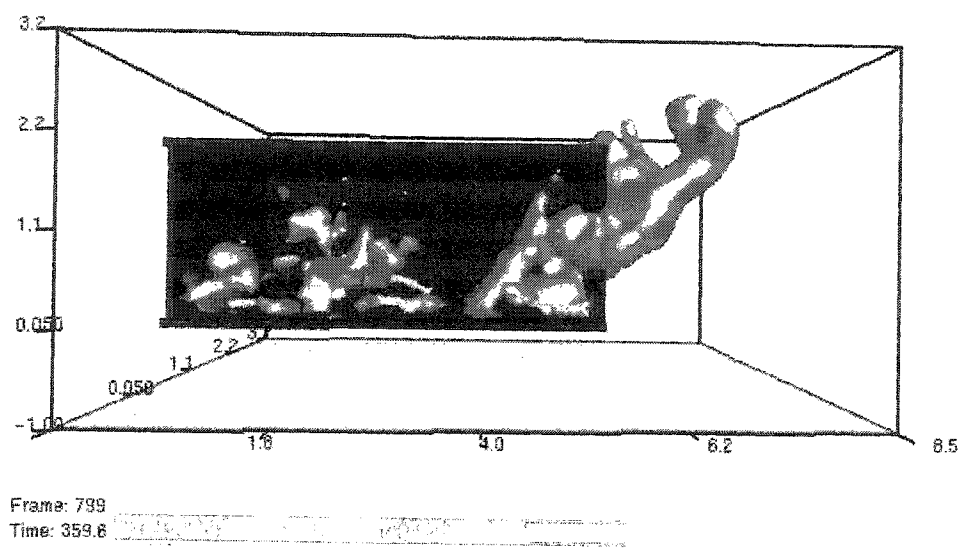


Figure 6.18 : Surface estimée de la flamme à 359,6 secondes (simulation C-1)

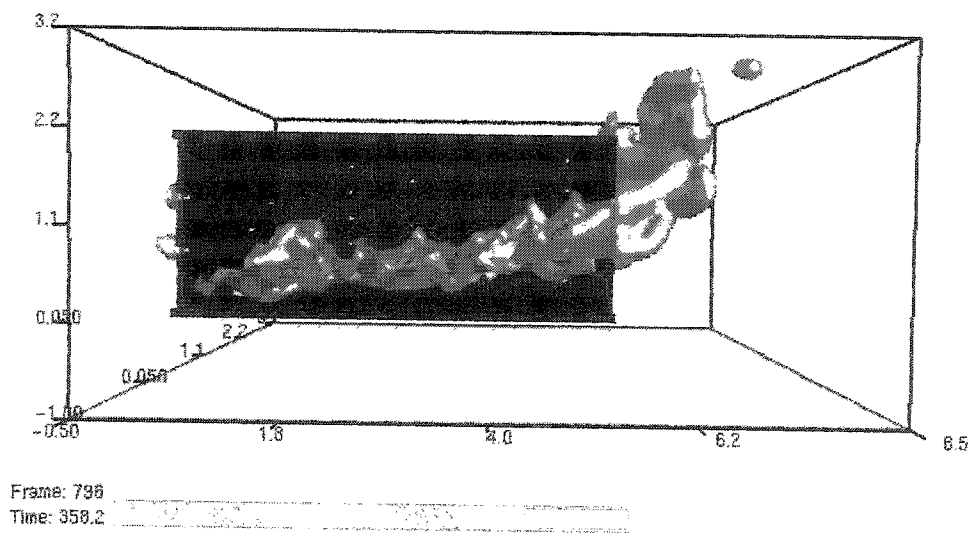


Figure 6.19 : Surface estimée de la flamme à 358,2 secondes (simulation C-2)

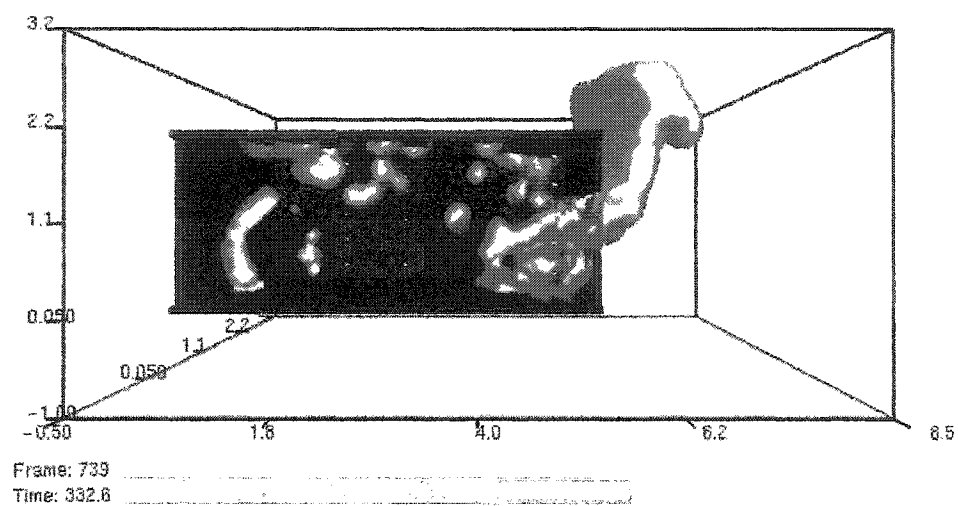


Figure 6.20 : Surface estimée de la flamme à 332,6 secondes (simulation C-3)

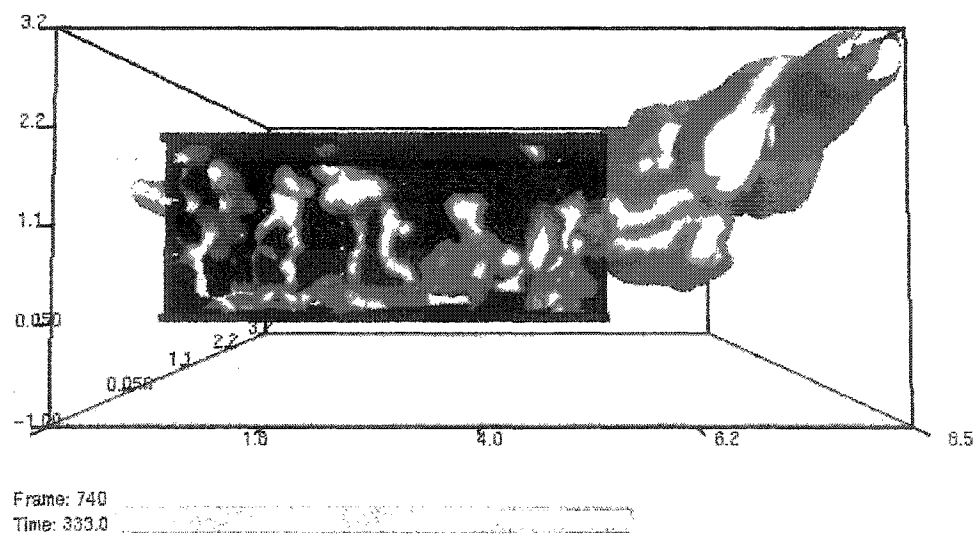


Figure 6.21 : Surface estimée de la flamme à 333,0 secondes (simulation C-4)

Concentration des espèces

Bien que la méthode de suppression de la combustion ne modifie pas la production et la consommation des espèces comme tel, le courant de gravité qui se produit grâce à cette méthode fera inévitablement varier la concentration des espèces au moment de l'ouverture du conteneur. Afin d'analyser les modifications produites, une dernière simulation fut réalisée en combinant la simulation C-4 et la modification des paramètres réactionnels. La simulation C-4 fut choisie car elle fournit les résultats les plus près des résultats expérimentaux en ce qui concerne l'historique des températures (cf. figure 6.10). La concentration des espèces en fonction du temps pour cette nouvelle simulation est reproduite à la figure 6.22.

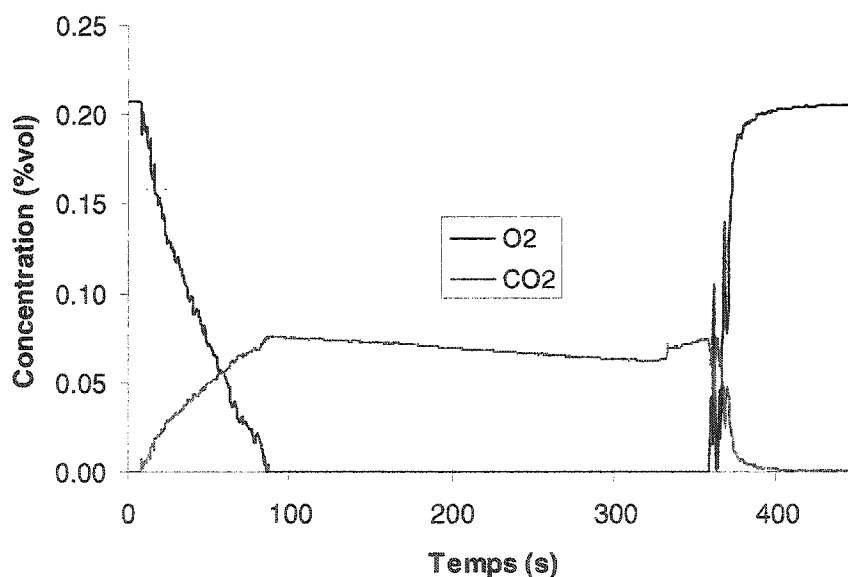


Figure 6.22 : Valeurs simulées des concentrations en O_2 et CO_2 (simulation C-4 avec paramètres réactionnels modifiés)

On remarque ici que la méthode de suppression de la combustion ne modifie pas véritablement, dans ce cas-ci, l'historique de la concentration des espèces. Ceci est sans aucun doute dû à l'emplacement de la sonde de mesure des concentrations dans le

conteneur. En effet, puisque la sonde est située à la mi-hauteur du conteneur, le courant de gravité passe sous celle-ci et n'influence pas la lecture des concentrations. On peut aisément s'apercevoir de ceci à l'aide de la figure 6.16, dans laquelle on voit clairement le courant de gravité qui circule sous la sonde qui est en plein centre du conteneur (point jaune). De plus, puisque qu'il n'y a qu'une dizaine de secondes entre l'ouverture et l'ignition du backdraft, le courant de gravité n'a pas le temps de remplir d'air frais toute la partie inférieure du conteneur. Toutefois, si l'on observe l'historique de la concentration des espèces pour la simulation C-2 où le délai avant l'allumage est d'environ 25 secondes (cf. figure 6.23), on peut apercevoir l'impact du courant de gravité au niveau de la concentration en oxygène et en dioxyde de carbone par la présence de pics où la concentration d'oxygène augmente et la concentration de CO_2 diminue.

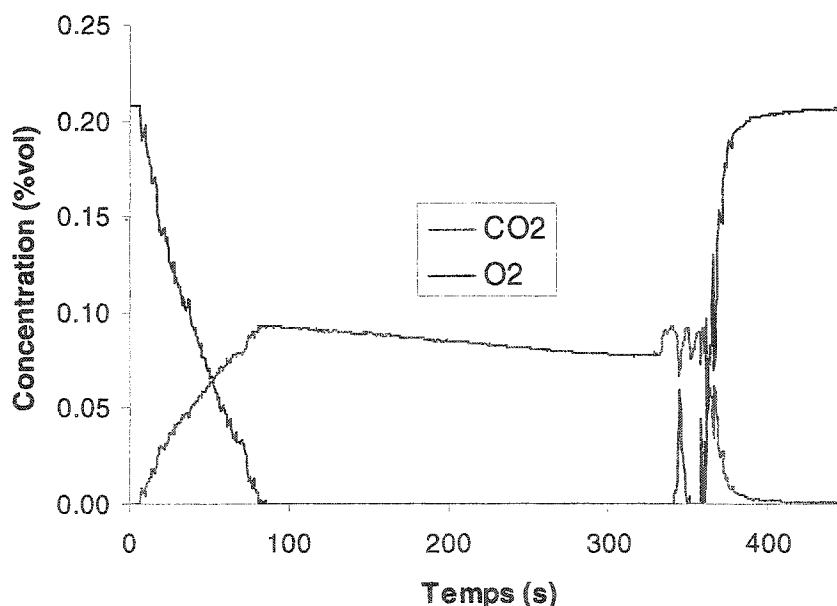


Figure 6.23 : Valeurs simulées des concentrations en O_2 et CO_2 (simulation C-2)

CHAPITRE 7

DISCUSSION

À la lumière des résultats présentés dans les deux chapitres précédents, les contributions apportées à la simulation des retours de flamme avec FDS v3.10 par les modifications proposées du logiciel seront maintenant analysées. Tout d'abord, il est à noter que FDS v3.10, dans sa version originale, permet malgré tout de simuler le type de backdraft à l'étude avec une relativement bonne précision. En effet, la tendance générale dans le comportement de l'incendie est à peu près respectée, à l'exception du courant de gravité. La période de combustion initiale, l'extinction de la flamme par manque d'oxygène, l'accumulation des produits de pyrolyse et l'explosion finale sont tous des phénomènes qui sont passablement bien simulés par FDS v3.10. Toutefois, si l'on s'intéresse au comportement précis des retours de flamme en conteneur, certains aspects des simulations numériques nécessitent d'être améliorés.

Malheureusement, c'est la nature même des modèles utilisés par le logiciel qui entraînent les problèmes de représentation des retours de flamme. La base même de la problématique entourant la simulation de ce phénomène est l'hypothèse utilisée par toutes les versions de FDS, qui consiste à considérer que la combustion est régie par le mélange des espèces. Cette hypothèse donne d'excellents résultats lorsque l'incendie à l'étude est dans un milieu convenablement ventilé où de l'air est constamment disponible pour assurer la réaction de combustion. Toutefois, lorsqu'on tente de simuler un incendie où l'air se fait rare, les résultats peuvent laisser à désirer selon les aspects du phénomène qui nous intéressent.

Ainsi, il apparaît que les deux modifications présentées au chapitre 6 pour améliorer les simulations sont en fait des tentatives de contournement des problèmes posés par cette hypothèse. En effet, la modification des paramètres réactionnels pour tenir compte de la condition de sous-ventilation ne serait évidemment pas nécessaire si l'hypothèse d'une ventilation adéquate était respectée. De même, l'absence du courant de gravité est aussi

due au fait que le logiciel considère que tout carburant qui entre en contact avec suffisamment d'oxygène doit automatiquement entrer en réaction avec lui, sans égard à sa concentration ou à sa température. On sait néanmoins qu'en réalité, les carburants possèdent des plages d'inflammabilité bien définies et que peu importe la quantité de carburant et d'air, aucune combustion ne peut se produire sans une source de chaleur permettant l'ignition du mélange combustible. Ce sont ces aspects intimement liés au phénomène de retour de flamme qui ont dû être introduits de force, si l'on peut dire, dans le fonctionnement de FDS pour permettre de meilleures simulations du phénomène.

Ainsi, à la lumière des simulations présentées au chapitre 5, il apparaît que les deux principaux problèmes causés par les modèles utilisés par FDS v3.10 lors de la simulation des retours de flamme sont :

- La surproduction de dioxyde de carbone, qui est aussi reliée à la sous-production de monoxyde de carbone et de suie
- L'absence du courant de gravité caractéristique des backdrafts

Afin de contourner ces obstacles, deux modifications ont été apportées aux simulations. La première modification vise à rétablir une production appropriée de CO_2 à l'aide des paramètres réactionnels et la deuxième vise à permettre au courant de gravité de se produire en arrêtant la combustion durant la période appropriée.

La modification des paramètres réactionnels, bien qu'étant une approche quelque peu triviale, permet tout de même d'ajuster aisément la production des différents produits de combustion en fonction de la situation à simuler. Puisque les conditions de combustion à l'étude diffèrent considérablement des conditions pour lesquelles le logiciel est conçu, cette modification s'est avérée nécessaire, à défaut de modifier le fonctionnement intrinsèque de FDS v3.10.

Lorsqu'on observe l'historique de la concentration des espèces pour les simulations effectuées avec les nouveaux paramètres réactionnels, on constate l'abaissement prévu de

la concentration en dioxyde de carbone. On remarque en effet que la concentration de CO_2 , plafonne à environ 7,5%, ce qui est plus acceptable que la concentration précédente, qui était de 10%. Toutefois, tel que mentionnée dans la section 6.1.2, les résultats expérimentaux obtenus par Gojkovic semblent être entachés d'erreurs relativement grandes et l'ajustement des paramètres réactionnels n'en est que plus difficile. En ce qui concerne les concentrations d'oxygène obtenues lors des simulations, les différences entre résultats numériques et expérimentaux ne peuvent être comblées à partir des paramètres réactionnels, et la modification du modèle de combustion utilisé apparaît comme étant la seule approche permettant d'envisager une amélioration de l'historique de la concentration en oxygène.

La deuxième modification apportée, pour sa part, est beaucoup plus fructueuse car elle permet de reproduire une partie très importante de la physique du problème, qui autrement est totalement absente de la simulation. De plus, cette modification influence le retour de flamme simulé dans l'ensemble des comportements qui sont subséquents au courant de gravité. Ainsi, elle a un effet direct ou indirect sur l'historique des températures, l'historique de la concentration des espèces, la durée et l'intensité du retour de flamme et la dimension de l'explosion engendrée par le backdraft.

En effet, si l'on observe les historiques de températures pour les simulations C-1 à C-4 (cf. figures 6.7 à 6.10), on s'aperçoit que la suppression de la combustion durant la progression du courant de gravité engendre de relativement grandes variations dans les résultats. On remarque tout d'abord que les températures maximales atteintes sont réduites à des valeurs plus proches des valeurs expérimentales. La durée des retours de flamme semble aussi subir des améliorations, ceux-ci étant considérablement plus courts que lors des premières simulations sans modifications. On doit toutefois mentionner ici l'exception de la simulation C-3, pour laquelle le court délai avant l'allumage combiné à l'absence de fuites ne permet pas une réelle réduction de la durée du retour de flamme. À l'autre extrême se retrouvent les simulations C-1 et C-2, où le temps avant l'ignition est

beaucoup plus long, d'où un retour de flamme d'autant plus faible et plus court. La simulation C-4, pour sa part, a donné un temps avant l'allumage qui a permis une correspondance quasi-parfaite entre les résultats numériques et expérimentaux et il semble donc que cette approche permette une amélioration notable des profils de température pour le problème à l'étude.

En plus d'améliorer la durée et l'intensité des retours de flamme, la suppression de la combustion durant le courant de gravité permet de reproduire la légère chute de température qui se produit entre le moment où le conteneur est ouvert et le moment où le backdraft est allumé.

Du côté de la concentration des espèces, la méthode utilisée, du fait qu'elle permet à une certaine quantité d'air de pénétrer dans le conteneur, peut engendrer des modifications dans l'historique des concentrations. Ces variations dépendent toutefois du délai avant l'ignition et de l'emplacement des capteurs de concentrations. En effet, puisque le courant de gravité circule le long du sol, plus le capteur est loin de celui-ci, plus le délai avant l'ignition devra être long pour qu'on puisse observer des variations dans la concentration au niveau de ce capteur. Toutefois, puisque l'on ne sait pas dans ce cas-ci où étaient situés les capteurs de concentrations lors des expériences, l'important est de constater la présence du courant de gravité. Il est en effet raisonnable de croire que si le capteur avait été placé au même endroit que lors des expériences, les résultats numériques et expérimentaux auraient été similaires, du moins dans leurs tendances générales.

Finalement, de façon très intéressante, il semble que la modification apportée modifie quelque peu le comportement de l'explosion engendrée par le retour de flamme. En effet, alors qu'auparavant l'explosion créée avec le conteneur avec fuites était très faible, celle créée avec le logiciel modifié est beaucoup plus grande et dépasse même les dimensions de l'explosion du conteneur sans fuites pour la simulation C-4. En effet, puisque le moment de l'ouverture du conteneur ne coïncide plus avec le moment où s'allume le

backdraft, les gaz expulsés par la pression accumulée dans le conteneur sans fuites ne contribuent pas à faire augmenter l'intensité de l'explosion. L'expulsion de ces gaz entraîne plutôt une diminution de l'intensité de l'explosion, car le carburant expulsé ne peut y participer. Inversement, comme il n'y a pas d'accumulation de pression dans le conteneur avec fuites, tout le carburant qui s'y trouve est disponible pour alimenter l'explosion, d'où la plus grande intensité de celle-ci. Ainsi, à l'inverse des résultats obtenus sans modifications, l'explosion engendrée avec le conteneur avec fuites est supérieure à celle obtenue pour le conteneur sans fuites. Il n'est donc pas nécessaire d'avoir une accumulation de pression pour obtenir une explosion de bonne dimension, ce qui est conforme à la physique du problème et aux résultats expérimentaux.

En ce qui concerne les délais avant l'allumage, si l'on observe les historiques de températures pour les simulations C-1 à C-4, on constate aisément que les délais entre l'ouverture du conteneur et l'allumage du retour de flamme sont loin d'être constants. En effet, alors que les simulations C-1 et C-2 ont un délai de l'ordre de 20-25 secondes, les simulations C-3 et C-4 ont un délai de 6 secondes environ. Ceci a de lourdes conséquences sur l'historique des températures, mais affecte aussi l'ensemble des comportements qui font suite au courant de gravité. On remarque en effet que plus le délai avant l'allumage est long et plus le backdraft aura tendance à être court et faible en intensité. Évidemment, ceci est causé par l'évacuation du mélange combustible durant ce délai, tel que constaté par Fleischmann lors de ses expériences en conteneurs de format réduit [5]. En effet, plus le délai est long, plus le courant sortant (que l'on peut observer sur la figure 6.16) permet à une grande quantité de carburant de sortir de l'enceinte. Ainsi, lorsque le délai est très long, comme lors des simulations C-1 et C-2, ceci résulte en une explosion relativement faible en durée et en intensité.

Si les conséquences des disparités entre les différents temps à l'allumage sont relativement évidentes, il en est autrement des raisons derrière ces grandes variations dans les délais. Tel que mentionné à la section 6.2.1, on devrait obtenir au passage du

courant de gravité des concentrations qui progressent depuis un milieu avec peu d'air et beaucoup de carburant, jusqu'à un milieu composé uniquement d'air frais. Puisque le long de cette progression les concentrations en oxygène, méthane et azote sont inter reliées, la technique utilisée devrait permettre d'obtenir des délais à l'allumage qui sont sensiblement les mêmes. Toutefois, ce n'est pas ce que l'on obtient lors des simulations effectuées avec FDS v3.10, et il apparaît que la raison derrière ces disparités soit de nature numérique plutôt que physique.

En effet, puisque dans les simulations la flamme s'éteint par manque d'oxygène selon les paramètres du modèle d'extinction de flamme (cf. section 2.2.4), le méthane imbrûlé s'ajoute aux produits de combustion. Lors de l'introduction de l'air frais, il se produit un mélange entre l'oxygène, l'azote, le méthane et les produits de combustion. Or, la fraction de mélange (Z) ne permet pas de représenter correctement les zones où l'oxygène est mélangé au carburant, car aucune valeur de cette variable ne permet de représenter un tel mélange. On voit clairement sur la figure 2.1 que la présence d'oxygène et de carburant en un même endroit sont exclusives, et ne correspond donc à aucune valeur de la fraction de mélange. Les relations d'état ne sont donc plus valides pour des valeurs de Z en dessous de la valeur stoechiométrique (valeur où la fraction massique d'oxygène et de carburant est nulle) [34]. Puisque la sous-routine qui détermine la concentration des composants indiqués dans le paramètre NOHR utilise la valeur de la fraction de mélange, la mesure de la concentration en oxygène servant à faire recommencer la combustion est erronée. Ceci résulte en un mauvais délai avant l'allumage, qui en soi provoque un ensemble d'erreurs dans la simulation du phénomène. Il apparaît donc que la concentration en oxygène ne doit pas être utilisée comme variable critique pour le paramètre NOHR, car elle entraîne une forte surestimation du délai avant l'allumage.

Finalement, il est intéressant de constater que la présence des fuites permet malgré tout de mieux simuler le retour de flamme à l'étude. Effectivement, sans modifications au logiciel, la présence de fuites améliore légèrement l'historique des températures, mais

nuit à l'intensité de l'explosion. Toutefois, lorsque le paramètre NOHR est utilisé, les fuites améliorent non seulement l'historique des températures mais permettent aussi une plus grande explosion qu'en l'absence de fuites.

Néanmoins, les fuites engendrent une légère erreur sur le profil des températures, durant la période où la combustion est inhibée par le manque d'oxygène. En effet, les fuites permettent un léger dégagement de chaleur, qui se traduit par une température trop élevée durant la période entre 150 et 325 secondes environ, période où le conteneur refroidit à cause de l'absence de combustion. Afin de résoudre ce problème, le paramètre NOHR devrait être modifié pour arrêter la combustion à 90 secondes environ, instant où la flamme s'éteint par manque d'oxygène. Ceci permettrait d'obtenir le même profil de températures que la simulation sans fuites pour la période entre 0 et 325 secondes, puis de profiter des améliorations qu'apportent les fuites pour la période qui suit l'ouverture du conteneur.

CONCLUSION

C'est à l'aide des résultats expérimentaux obtenus par Gojkovic sur les retours de flamme en conteneurs que la présente étude a tenté de reproduire le phénomène par le biais du logiciel de simulation d'incendies FDS v3.10. Les simulations initiales visant à valider l'utilisation de ce logiciel pour la simulation des retours de flammes ont démontré que malgré certains aspects négatifs, FDS v3.10 permet de simuler avec une relativement bonne précision les principaux aspects des backdrafts. Toutefois, certains aspects tels le courant de gravité et une faible concentration en dioxyde de carbone sont mal reproduits par le logiciel en question.

Dans cet ordre d'idées, deux hypothèses ont été émises puis testées pour tenter d'approcher les résultats numériques des résultats expérimentaux. La première approche consiste en une modification des paramètres réactionnels utilisés par FDS v3.10 pour améliorer les concentrations en dioxyde de carbone durant les simulations. La deuxième voie empruntée repose sur l'implémentation de sous-routines pour arrêter toute combustion durant la période de progression du courant de gravité.

Les résultats présentés au chapitre 6 démontrent que la modification des paramètres réactionnels permet de modifier les concentrations des espèces à la guise de l'utilisateur et selon ses besoins. Effectivement, les concentrations en CO_2 sont passées de 10 à 7,5%, selon ce qui avait été choisi comme valeur cible pour la concentration de cette espèce. Il s'agit toutefois d'une technique élémentaire qui n'est pas généralisable car les concentrations visées par une simulation peuvent varier en fonction des conditions où se produit la simulation. En revanche, les nouveaux paramètres réactionnels établis pour la réaction de combustion du méthane en milieu sous-ventilé devraient conduire à des résultats acceptables pour les concentrations des espèces lorsque les conditions de simulation sont approximativement les mêmes que pour le problème à l'étude, c'est-à-dire lorsqu'il y a combustion de méthane en air raréfié.

Quant à l'arrêt de la combustion durant le courant de gravité, il apparaît à la lumière des résultats présentés que le but visé par l'implémentation de l'algorithme de suppression de la combustion est atteint, en ce sens qu'il permet au courant de gravité de progresser à l'intérieur du conteneur. Cette approche permet ainsi de rétablir une partie importante de la physique du problème qui était auparavant absente des simulations. En effet, le délai entre l'ouverture du conteneur et l'ignition du backdraft est restitué, ce qui a un impact sur un ensemble de caractéristiques des résultats de simulation. Ainsi, lorsque les éléments du nouveau paramètre NOHR sont choisis judicieusement, les améliorations touchent la durée et l'intensité du retour de flamme, l'historique de la concentration des espèces, le refroidissement au passage du courant de gravité ainsi que la taille de l'explosion produite. Cependant, le choix des éléments contenus dans le paramètre NOHR influence fortement la durée du délai avant l'allumage du backdraft et du même coup les aspects mentionnés précédemment. Il est donc nécessaire de tester différentes possibilités pour évaluer l'impact de la variable critique et de la valeur critique choisie.

Les simulations numériques de retours de flamme étant encore au stade embryonnaire, de nombreux travaux devront être effectués avant que les résultats soient directement applicables à l'étude des situations réelles de retours de flamme. Par contre, certains travaux pourraient être menés dans un futur rapproché pour évaluer les possibilités des techniques établies dans le présent ouvrage. Parmi ceux-ci, il serait intéressant de simuler un retour de flamme dans une géométrie plus complète, dans un immeuble par exemple. L'extension de la présente méthode à d'autres carburants pourrait aussi aider à évaluer les valeurs critiques appropriées pour des carburants autres que le méthane. Toutefois, afin de simuler avec précision les conditions découlant d'une situation de retour de flamme, il faudra ultimement modifier le modèle de combustion de FDS pour y enlever l'hypothèse que la combustion est régie par le mélange des espèces. Un modèle approprié devra inclure des principes tels que les plages d'inflammabilité, l'ignition des mélanges gazeux par une source de chaleur, ainsi qu'une réaction de combustion dépendante de la composition de la région où se produit cette combustion.

RÉFÉRENCES

- [1] MINISTÈRE DE LA SÉCURITÉ PUBLIQUE DU QUÉBEC. 2002. *La sécurité incendie au Québec Quelques chiffres*, [En ligne]. Québec : Ministère de la Sécurité publique. 24p. ISBN 2-550-40268-5. www.msp.gouv.qc.ca/stats/Incendie/1999/stat_incendie.pdf (Page consultée le 24 octobre 2003)

- [2] DÉVELOPPEMENT DES RESSOURCES HUMAINES CANADA. *Statistiques – Semaine de prévention des incendies*, [En ligne]. <http://www.qc.hrdc-drhc.gc.ca/travail/SPI/stats.html> (Page consultée le 23 octobre 2003)

- [3] CONSEIL NATIONAL DE RECHERCHES CANADA. *Fire Risk Management – Total Fire Costs*, [En ligne]. <http://irc.nrc-cnrc.gc.ca/frm/costs.html> (Page consultée le 23 octobre 2003)

- [4] CROFT, W.M. 1980. «Fires Involving Explosions – A Literature Review». *Fire Safety Journal*. 3:1. 3-24

- [5] FLEISCHMANN, Charles Martin. 1993. *Backdraft Phenomena*. 217p. Thèse de doctorat en génie sécurité incendie, University of California at Berkeley

- [6] CHITTY, Richard. 1994. *A Survey of Backdraught*. Londres: Fire Research and Development Group. 59p. ISBN 1-85893-191-6

- [7] SUTHERLAND, B.J. 1999. *Smoke Explosions*. 109p. Thèse de maîtrise en génie sécurité incendie, University of Canterbury, Nouvelle-Zélande

- [8] FLEISCHAMNN, C.M., McGRATTAN, K.B. 1999. «Numerical and Experimental Gravity Currents Related to Backdrafts». *Fire Safety Journal*. 33:1. 21-34
- [9] WENG, W.G., FAN, W.C., QIN, J., YANG, L.Z. 2002. «study on salt water modeling of gravity currents prior to backdrafts using flow visualization and digital particle image velocimetry». *Experiments in Fluids*. 33:3. 398-404
- [10] McGRATTAN, K.B, REHM, R.G., BAUM, H.R. 1994. «Fire-Driven Flows in Enclosures». *Journal of Computational Physics*. 110:2. 285-291
- [11] REHM, R.G., McGRATTAN, K. B, BAUM, H.R., CASSEL, K.W. 1997. «Transport by Gravity Currents in Building Fires». *Fire Safety Science - Proceedings of the Fifth (5th) International Symposium*. Melbourne, Australie: International Association for Fire Safety Science. 391-402
- [12] FLEISCHMANN, C.M., PAGNI, P.J. 1992. «Preliminary Backdraft Experiments». *12th Joint Panel Meeting of the UJNR Panel on Fire Research and Safety* . Tokyo, Japon: Building Research Inst. & Japan Fire Research Inst. 208-215
- [13] FLEISCHMANN, C.M., PAGNI, P.J., WILLIAMSON, R.B. 1994. «Quantitative Backdraft Experiments». *Fire Safety Science - Proceedings of the Fourth (4th) International Symposium*. Ottawa, Canada: International Association for Fire Safety Science 337-348
- [14] BUKOWSKI, R.W. 1996. «Modeling a Backdraft Incident: The 62 Watts St. (NY) Fire». *Fire Engineers Journal*. 56:185. 14-17

- [15] DUNN, Vincent. 1988. «Beating the Backdraft». *Fire Engineering*. Avril 1988. 45-48
- [16] DUNNE, Thomas. 2002. «Delayed Backdraft». *Fire Engineering*. 155:12. 32,35,38
- [17] DUNN, Vincent. *December Newsletter by Vincent Dunn*, [En ligne].
<http://vincentdunn.com/dunn/newsletters/dec/dec.pdf> (Page consultée le 16 juillet 2003)
- [18] SIMON YU, K.S., 1992. «Flashover and Backdraft». *Fire Engineers Journal*. 52:167. 27-30
- [19] BENICHOUE, Nourredine, 2003. Notes de cours. *Short course – Introduction to Fire Safety Engineering*. Carleton University, Ottawa
- [20] GOJKOVIC, Daniel, 2000. *Initial Backdraft Experiments*. Suède : Lund University. 51p. ISSN: 1402-3504, ISRN: LUTVDG/TVBB-3121-SE
- [21] MORTON, B.R., TAYLOR, G., TURNER, J.S. 1956. «Turbulent Gravitational Convection from Maintained and Instantaneous Sources». *Proceedings of the Royal Society of London*. Londres: Royal Society of London. 234, 1-23
- [22] KAWAGOE, K. 1958. *Fire Behavior in Rooms*. Tokyo: Building Research Institute. Report No.27
- [23] CETEGAN, B.M., (ZUKOSKI, E.E., KUBOTA, T.) 1982. *Entrainment and Flame Geometry of Fire Plumes*. Thèse de doctorat, California Institute of Technology, Pasadena

- [24] QUINTIERE, J.G., McCAFFREY, B.J., HARKLEROAD, M. F. 1981.
«Estimating Room Temperatures and the Likelihood of Flashover using Fire Test Data Correlations». *Fire Technology*. No.17. 98-119
- [25] JONES, W.W., QUINTIERE, J.G. 1984. « Prediction of Corridor Smoke Filling by Zone Models ». *Combustion Science and Technology*. 35:5-6. 239-253
- [26] BOLLIGER, I.B. 19935. *Full Residential-Scale Backdraft*. 82p. Thèse de maîtrise en génie sécurité incendie, University of Canterbury, Nouvelle-Zélande
- [27] WENG, W.G., FAN, W.C. 2002. « Experimental Study on the Mitigation of Backdraft in Compartment Fires with Water Mist». *Journal of Fire Sciences*. 20:4. 259-278
- [28] GOTTUK, D.T., PEATROSS, M.J., FARLEY, J.P., WILLIAMS, F.W. 1999.
«The Development and Mitigation of Backdraft : a Real-Scale Shipboard Study». *Fire Safety Journal*. 33:4. 261-282
- [29] NATIONAL INSTITUTE OF STANDARDS AND TECHNOLOGY, Building and Fire Research Laboratory. *Fire Growth and Smoke Transport Modeling with CFAST/FAST*, [En ligne]. <http://fast.nist.gov/> (Page consultée le 15 avril 2003)
- [30] WENG, W.G., FAN, W.C., WANG, Q., YANG, L. 2002. «A model of backdraft phenomenon in building fires». *Progress in Natural Science*. 12:2. 131-135
- [31] GOJKOVIC, D., BENGTSSON, L. 2001. «Some Theoretical and Practical Aspects on Fire Fighting in a Backdraft Situation». *International Interflam Conference, 9th proceedings*. Edinburgh, Scotland: Interscience Communications Ltd. Vol.2, 1093-1104

- [32] CRANFIELD UNIVERSITY, *SOFIE – Simulation of Fires in Enclosures*, [En ligne]. <http://www.cranfield.ac.uk/sme/sofie/> (Page consultée le 3 septembre 2003)
- [33] McGRATTAN, K.B., FORNEY, G.P., PRASAD, K., FLOYD, J.E., HOSTIKKA, S. 2002. *Fire Dynamics Simulator (Version 3) – User's Guide*. NIST, 81p. NISTIR 6784
- [34] McGRATTAN, K.B., FORNEY, G.P., REHM, R.G., BAUM, H.R., PRASAD, K., FLOYD, J.E., HOSTIKKA, S., HAMINS, A. 2002. *Fire Dynamics Simulator (Version 3) – Technical Reference Guide*. NIST, 51p. NISTIR 6783
- [35] MASON, P. J. 1994. «Large-Eddy Simulation: A Critical Review of the Technique». *Journal of the Royal Meteorology Society*. Vol.120, 1-16
- [36] PIOMELLEI, U. 1999. «Large-Eddy Simulation: Achievements and Challenges». *Progress in Aerospace Science*. Vol.35, 335-362
- [37] SPALART, P.R. 1988. «Direct Simulation of a Turbulent Boundary Layer up to $Re_\theta=1400$ ». *Journal of Fluid Mechanics*. Vol.187, 61-98
- [38] LE, H., MOIN, P., KIM, J. 1998. «Direct Simulation – a Tool in Turbulence». *Annual Review in Fluid Mechanics*. Vol.30, 539-578
- [39] SMAGORINSKY, J. 1963. «General Circulation Experiments with the Primitive Equations. I. The Basic Experiment». *Monthly Weather Review*. No.41, 99-164
- [40] REHM, R.G., BAUM, H.R. 1978. «The equations of motion for thermally driven, buoyant flows». *Journal of Research of the NBS*. No.83, 297-308

- [41] HUGGETT, C. 1980. «Estimation of the Rate of Heat Release by Means of Oxygen Consumption Measurements». *Fire and Materials*. No.4, 61-65
- [42] SIEGEL, R., HOWELL, J.R. 1992. *Thermal Radiation Heat transfer*. 3^e Édition. Philadelphie: Hemisphere Publishing Corporation. 814p.
- [43] UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL. CERCA. *CEntre de Recherche en Calcul Appliqué*, [En ligne]. <http://www.cerca.umontreal.ca> (Page consultée le 4 septembre 2003)
- [44] McGRATTAN, K.B., FORNEY, G.P. 2003. *User's Guide for Smokeview Version 3.1 – A Tool for Visualizing Fire Dynamics Simulation Data*. NIST, 60p. NISTIR 6980
- [45] BAUM, H.R., McCAFFREY, B.J. 1989. «Fire Induced Flow Field – Theory and Experiment». *Fire Safety Science – Proceedings of the Second International Symposium*, Hemisphere, New-York. 129-148
- [46] BAUM, H.R., McGRATTAN, K.B., REHM, R.G. 1997. «Three Dimensional Simulations of Fire Plume Dynamics». *Fire Safety Science – Proceedings of the Fifth International Symposium*, 511-522
- [47] TURNS, S.R. 2000. *An Introduction to Combustion – Concepts and Applications*. 2nd Edition. Boston: McGraw-Hill. 676 p.
- [48] PITTS, W. M. 1995. «The Global Equivalence Ratio Concept and the Formation Mechanism of Carbon Monoxide in Enclosure Fires». *Progress in Energy and Combustion science*. 21:3, 197-237

- [49] PITTS, W.M. 1994. «Limitations of the Global Equivalence Ratio Concept for Predicting CO Formation in Room Fires». *Proceedings of the 12th joint panel of the UJNR Panel on Fire Research and Safety*. Tokyo, Japon: Building Research Institute, Tsukuba, Ibakari and Fire Research Institute, 152-159
- [50] MULHOLLAND, G.W. 1988. *Letter report to Richard G. Gann, Chief, Fire Measurement and Research Division, Center for Fire Research*. National Bureau of Standards, unpublished
- [51] CETEGEN, B.M., ZUKOSKI, E.E., KUBOTA, T. 1982. *Government Contractor's report GCR-82-402*, National Bureau of Standards
- [52] TONER, S.J., ZUKOSKI, E.E., KUBOTA, T. 1987. *Government Contractor's report GCR-87-528*, National Bureau of Standards
- [53] MOREHART, J.H., ZUKOSKI, E.E., KUBOTA, T. 1990. *Government Contractor's report GCR-90-585*, National Bureau of Standards
- [54] SANTORO, R.J. 1994. *Fundamental Mechanisms for CO and Soot Formation. Final Report*, NIST, 167p., GCR-94-661
- [55] SANTORO, R.J., PURI, R., MULHOLLAND, G.W., LEONARD, S. 1994. «Generation of CO and Smoke During Underventilated Combustion». *Combustion and Flame*. 98:1. 20-34
- [56] BRYNER, N.P., JOHNSON, E.L., PITTS, W.M. 1994. *NISTIR-5568*, National Institute of Standards and Technology

- [57] SHADDIX, C.R., SMYTH, K.C. 1994. *Soot Production in Flickering Methane, Propane and Ethylene Diffusion Flames*, Gaithersburg, MD: National Institute of Standards and Technology, 2p. NISTR-5499

- [58] SHADDIX, C.R., EVEREST, D.A., SMYTH, K.C. 1995. «Laser Measurements of Soot and CO production in Time-Varying, Hydrocarbon Diffusion Flames», *Combustion Byproducts, 4th International Congress*, Berkeley: University of California, 59 p.

ANNEXE A

Fichiers d'entrée des simulations

A-1 : Fichier d'entrée – conteneur sans fuites

Expérience no 13 de Daniel Gojkovic

```
&HEAD CHID='Exp13',TITLE='Simulation backdraft dans un container' /
```

```
&MISC REACTION = 'METHANE', NFRAMES=2000 , DTCORE=30.,
      DATABASE='../DATABASE/database3.data' /
```

```
&GRID IBAR=90,JBAR=42,KBAR=42 /
```

```
&PDIM XBAR0=-0.5,XBAR=8.5,YBAR0=-1,YBAR=3.2,ZBAR0=-1,ZBAR=3.2 /
```

```
&TIME TWFIN=450. /
```

Dégagement de chaleur du bruleur: 642 kW donc 642 kW / (0.3m x 0.3m) = 7133 kW/m2

```
&SURF ID='Bruleur',HRRPUA=7133., RAMP_Q='BRULEUR RAMP' /
```

```
&RAMP ID='BRULEUR RAMP', T= 0.0, F=0.0 /
```

```
&RAMP ID='BRULEUR RAMP', T= 1.0, F=1.0 /
```

```
&RAMP ID='BRULEUR RAMP', T= 317.0, F=1.0 /
```

```
&RAMP ID='BRULEUR RAMP', T= 318.0, F=0.0 /
```

```
&RAMP ID='BRULEUR RAMP', T= 450.0, F=0.0 /
```

```
&OBST XB=0.10,0.40,0.90,1.20,0.00,0.10,
SURF_IDS='Bruleur','INERT','INERT',BLOCK_COLOR='red' /
```

```
&VENT CB='XBAR' ,SURF_ID='OPEN' /
```

```
&VENT CB='XBAR0',SURF_ID='OPEN' /
```

```
&VENT CB='YBAR' ,SURF_ID='OPEN' /
```

```
&VENT CB='YBAR0',SURF_ID='OPEN' /
```

```
&VENT CB='ZBAR' ,SURF_ID='OPEN' /
```

container

```
&OBST XB=-0.10,5.60,-
```

```
0.10,0.00,0.00,2.20,SURF_ID='STEEL',BLOCK_COLOR='INVISIBLE' /
```

```
&OBST XB=-0.10,5.60,2.20,2.30,0.00,2.20,SURF_ID='STEEL',BLOCK_COLOR='grey' /
```

```
&OBST XB=-0.10,0.00,0.00,2.20,0.00,2.20,SURF_ID='STEEL',BLOCK_COLOR='grey' /
```

```
&OBST XB= 5.50,5.60,0.00,2.20,0.00,0.70,SURF_ID='STEEL',BLOCK_COLOR='grey' /
```

```
&OBST XB= 5.50,5.60,0.00,2.20,0.70,1.50,SURF_ID='STEEL',BLOCK_COLOR='blue',
```

```
T_REMOVE=325. /
```

```
&OBST XB= 5.50,5.60,0.00,2.20,1.50,2.20,SURF_ID='STEEL',BLOCK_COLOR='grey' /
```

```
&OBST XB=-0.10,5.60,-0.10,2.30,-0.10,0.00,SURF_ID='STEEL',BLOCK_COLOR='grey' /
```

```
&OBST XB=-0.10,5.60,-0.10,2.30, 2.20,2.30,SURF_ID='STEEL',BLOCK_COLOR='grey' /
```

Série de thermocouple située à l'arrière du container (près de l'ouverture):

```
&THCP XYZ=5.0,0.15,2.0,QUANTITY='TEMPERATURE',LABEL='TC_A1'/
&THCP XYZ=5.0,0.15,1.6,QUANTITY='TEMPERATURE',LABEL='TC_A2'/
&THCP XYZ=5.0,0.15,1.2,QUANTITY='TEMPERATURE',LABEL='TC_A3'/
&THCP XYZ=5.0,0.15,0.8,QUANTITY='TEMPERATURE',LABEL='TC_A4'/
&THCP XYZ=5.0,0.15,0.4,QUANTITY='TEMPERATURE',LABEL='TC_A5'/
```

Série de thermocouple située à l'avant du container (près du bruleur):

```
&THCP XYZ=1.8,1.10,2.0,QUANTITY='TEMPERATURE',LABEL='TC_B1'/
&THCP XYZ=1.8,1.10,1.6,QUANTITY='TEMPERATURE',LABEL='TC_B2'/
&THCP XYZ=1.8,1.10,1.2,QUANTITY='TEMPERATURE',LABEL='TC_B3'/
&THCP XYZ=1.8,1.10,0.8,QUANTITY='TEMPERATURE',LABEL='TC_B4'/
&THCP XYZ=1.8,1.10,0.4,QUANTITY='TEMPERATURE',LABEL='TC_B5'/
```

Thermocouples pour mesurer le debit dans l'ouverture

```
&THCP XB=5.50,5.50,0.00,2.20,0.70,1.50,QUANTITY='MASS FLOW',LABEL='TC_FLOW' /
```

Série de thermocouple située au centre du container:

```
&THCP XYZ=2.75,1.1,1.1,QUANTITY='PRESSURE',LABEL='THCP_PRESSION'/
&THCP XYZ=2.75,1.1,1.1,QUANTITY='oxygen',LABEL='THCP_O2'/
&THCP XYZ=2.75,1.1,1.1,QUANTITY='carbon dioxide',LABEL='THCP_CO2'/
&THCP XYZ=2.75,1.1,1.1,QUANTITY='fuel',LABEL='THCP_CH4' /
```

Slice File prise en plein centre du container sur sa longueur:

```
&SLCF PBX=1.1,QUANTITY='TEMPERATURE' /
&SLCF PBX=1.1,QUANTITY='fuel' /
&SLCF PBX=1.1,QUANTITY='oxygen' /
&SLCF PBX=1.1,QUANTITY='MIXTURE_FRACTION' /
```

Slice File prise au centre du container sur sa largeur:

```
&SLCF PBX=2.5,QUANTITY='TEMPERATURE' /
&SLCF PBX=2.5,QUANTITY='MIXTURE_FRACTION' /
```

Slice File prise à l'arrière du container sur sa largeur:

```
&SLCF PBX=5,QUANTITY='TEMPERATURE' /
&SLCF PBX=5,QUANTITY='fuel' /
&SLCF PBX=5,QUANTITY='MIXTURE_FRACTION' /
```

```
&PL3D DTSAM=1., QUANTITIES(8)='fuel' /
```

A-2 : Fichier d'entrée – conteneur avec fuites

Expérience no 13 de Daniel Gojkovic

```
&HEAD CHID='Exp13_leakage',TITLE='Simulation backdraft dans un container' /

&MISC REACTION = 'METHANE', NFRAMES=2000, DTCORE=30.,
      DATABASE='../DATABASE/database3.data'/

&GRID IBAR=90,JBAR=42,KBAR=42 /

&PDIM XBAR0=-0.5,XBAR=8.5,YBAR0=-1,YBAR=3.2,ZBAR0=-1,ZBAR=3.2 /

&TIME TWFIN=450. /

Dégagement de chaleur du bruleur: 642 kW donc 642 kW / (0.3m x 0.3m) = 7133
kW/m2
&SURF ID='Bruleur',HRRPUA=7133., RAMP_Q='BRULEUR RAMP' /

&RAMP ID='BRULEUR RAMP', T= 0.0, F=0.0 /
&RAMP ID='BRULEUR RAMP', T= 1.0, F=1.0 /
&RAMP ID='BRULEUR RAMP', T= 317.0, F=1.0 /
&RAMP ID='BRULEUR RAMP', T= 318.0, F=0.0 /
&RAMP ID='BRULEUR RAMP', T= 450.0, F=0.0 /

&OBST
XB=0.10,0.40,0.90,1.20,0.00,0.10,SURF_IDS='Bruleur','INERT','INERT',BLOCK_COLOR
='red' /

&VENT CB='XBAR',SURF_ID='OPEN' /
&VENT CB='XBAR0',SURF_ID='OPEN' /
&VENT CB='YBAR',SURF_ID='OPEN' /
&VENT CB='YBAR0',SURF_ID='OPEN' /
&VENT CB='ZBAR',SURF_ID='OPEN' /

container
&OBST XB=-0.10,5.60,-
0.10,0.00,0.00,2.20,SURF_ID='STEEL',BLOCK_COLOR='INVISIBLE' /
&OBST XB=-0.10,5.60,2.20,2.30,0.00,2.20,SURF_ID='STEEL',BLOCK_COLOR='grey' /

&OBST XB=-0.10,0.00,0.00,2.20,0.00,0.70,SURF_ID='STEEL',BLOCK_COLOR='grey' /
&OBST XB=-0.10,0.00,0.10,2.10,0.70,0.80,SURF_ID='STEEL',BLOCK_COLOR='grey' /
&OBST XB=-0.10,0.00,0.00,2.20,0.80,1.40,SURF_ID='STEEL',BLOCK_COLOR='grey' /
&OBST XB=-0.10,0.00,0.10,2.10,1.40,1.50,SURF_ID='STEEL',BLOCK_COLOR='grey' /
&OBST XB=-0.10,0.00,0.00,2.20,1.50,2.20,SURF_ID='STEEL',BLOCK_COLOR='grey' /

&OBST XB= 5.50,5.60,0.00,2.20,0.00,0.70,SURF_ID='STEEL',BLOCK_COLOR='grey' /
&OBST XB= 5.50,5.60,0.00,2.20,0.70,1.50,SURF_ID='STEEL',BLOCK_COLOR='blue',
T_REMOVE=325. /
&OBST XB= 5.50,5.60,0.00,2.20,1.50,2.20,SURF_ID='STEEL',BLOCK_COLOR='grey' /

&OBST XB=-0.10,5.60,-0.10,2.30,-0.10,0.00,SURF_ID='STEEL',BLOCK_COLOR='grey' /
&OBST XB=-0.10,5.60,-0.10,2.30, 2.20,2.30,SURF_ID='STEEL',BLOCK_COLOR='grey' /

Série de thermocouple située à l'arrière du container (près de l'ouverture):
&THCP XYZ=5.0,0.15,2.0,QUANTITY='TEMPERATURE',LABEL='TC_A1'/
&THCP XYZ=5.0,0.15,1.6,QUANTITY='TEMPERATURE',LABEL='TC_A2'/'
```

```
&THCP XYZ=5.0,0.15,1.2,QUANTITY='TEMPERATURE',LABEL='TC_A3'/
&THCP XYZ=5.0,0.15,0.8,QUANTITY='TEMPERATURE',LABEL='TC_A4'/
&THCP XYZ=5.0,0.15,0.4,QUANTITY='TEMPERATURE',LABEL='TC_A5'/
```

Série de thermocouple située à l'avant du container (près du bruleur):

```
&THCP XYZ=1.8,1.10,2.0,QUANTITY='TEMPERATURE',LABEL='TC_B1'/
&THCP XYZ=1.8,1.10,1.6,QUANTITY='TEMPERATURE',LABEL='TC_B2'/
&THCP XYZ=1.8,1.10,1.2,QUANTITY='TEMPERATURE',LABEL='TC_B3'/
&THCP XYZ=1.8,1.10,0.8,QUANTITY='TEMPERATURE',LABEL='TC_B4'/
&THCP XYZ=1.8,1.10,0.4,QUANTITY='TEMPERATURE',LABEL='TC_B5'/
```

Thermocouples pour mesurer le debit dans l'ouverture + leakage

```
&THCP XB=5.50,5.50,0.00,2.20,0.70,1.50,QUANTITY='MASS FLOW',LABEL='TC_FLOW'/

&THCP XB=0.00,0.00,0.00,0.10,0.70,0.80,QUANTITY='MASS FLOW',LABEL='TC_FLOW_L1'/
&THCP XB=0.00,0.00,0.00,0.10,1.40,1.50,QUANTITY='MASS FLOW',LABEL='TC_FLOW_L2'/
&THCP XB=0.00,0.00,2.10,2.20,0.70,0.80,QUANTITY='MASS FLOW',LABEL='TC_FLOW_L3'/
&THCP XB=0.00,0.00,2.10,2.20,1.40,1.50,QUANTITY='MASS FLOW',LABEL='TC_FLOW_L4'/
```

Série de thermocouple située au centre du container:

```
&THCP XYZ=2.75,1.1,1.1,QUANTITY='PRESSURE',LABEL='THCP_PRESSION'/
&THCP XYZ=2.75,1.1,1.1,QUANTITY='oxygen',LABEL='THCP_O2'/
&THCP XYZ=2.75,1.1,1.1,QUANTITY='carbon dioxide',LABEL='THCP_CO2'/
&THCP XYZ=2.75,1.1,1.1,QUANTITY='fuel',LABEL='THCP_CH4'/
```

Slice File prise en plein centre du container sur sa longueur:

```
&SLCF PBX=1.1,QUANTITY='TEMPERATURE' /
&SLCF PBX=1.1,QUANTITY='fuel' /
&SLCF PBX=1.1,QUANTITY='oxygen' /
&SLCF PBX=1.1,QUANTITY='MIXTURE_FRACTION' /
```

Slice File prise au centre du container sur sa largeur:

```
&SLCF PBX=2.5,QUANTITY='TEMPERATURE' /
&SLCF PBX=2.5,QUANTITY='MIXTURE_FRACTION' /
```

Slice File prise à l'arrière du container sur sa largeur:

```
&SLCF PBX=5,QUANTITY='TEMPERATURE' /
&SLCF PBX=5,QUANTITY='fuel' /
&SLCF PBX=5,QUANTITY='MIXTURE_FRACTION' /
```

```
&PL3D DTSAM=1. ,QUANTITIES(8)='fuel' /
```

A-3 : Fichier d'entrée – conteneur avec fuites (maillage fin)

Expérience no 13 de Daniel Gojkovic

```
&HEAD CHID='Exp13_leak_5cm',TITLE='Simulation backdraft dans un container (5cm
grid)' /
```

```
&MISC REACTION = 'METHANE',
      DATABASE='../../DATABASE/database3.data',
      DTCORE=10., RESTART_FILE='Exp13_leak_5cm.restart' /
```

```
&GRID IBAR=180,JBAR=84,KBAR=84 /
```

```
&PDIM XBAR0=-0.5,XBAR=8.5,YBAR0=-1,YBAR=3.2,ZBAR0=-1,ZBAR=3.2 /
```

```
&TIME TWFIN=450. /
```

Dégagement de chaleur du bruleur: 642 kW donc 642 kW / (0.3m x 0.3m) = 7133 kW/m2

```
&SURF ID='Bruleur',HRRPUA=7133., RAMP_Q='BRULEUR RAMP' /
```

```
&RAMP ID='BRULEUR RAMP', T= 0.0, F=0.0 /
```

```
&RAMP ID='BRULEUR RAMP', T= 1.0, F=1.0 /
```

```
&RAMP ID='BRULEUR RAMP', T= 317.0, F=1.0 /
```

```
&RAMP ID='BRULEUR RAMP', T= 318.0, F=0.0 /
```

```
&RAMP ID='BRULEUR RAMP', T= 450.0, F=0.0 /
```

```
&OBST XB=0.10,0.40,0.90,1.20,0.00,0.10,SURF_IDS='Bruleur','INERT','INERT',
BLOCK_COLOR='red' /
```

```
&VENT CB='XBAR',SURF_ID='OPEN' /
```

```
&VENT CB='XBAR0',SURF_ID='OPEN' /
```

```
&VENT CB='YBAR',SURF_ID='OPEN' /
```

```
&VENT CB='YBAR0',SURF_ID='OPEN' /
```

```
&VENT CB='ZBAR',SURF_ID='OPEN' /
```

container

```
&OBST XB=-0.10,5.60,-0.10,0.00,0.00,2.20,SURF_ID='STEEL',
```

```
BLOCK_COLOR='INVISIBLE' /
```

```
&OBST XB=-0.10,5.60,2.20,2.30,0.00,2.20,SURF_ID='STEEL', BLOCK_COLOR='grey' /
```

```
&OBST XB=-0.10,0.00,0.00,2.20,0.00,0.70,SURF_ID='STEEL', BLOCK_COLOR='grey' /
```

```
&OBST XB=-0.10,0.00,0.10,2.10,0.70,0.80,SURF_ID='STEEL', BLOCK_COLOR='grey' /
```

```
&OBST XB=-0.10,0.00,0.00,2.20,0.80,1.40,SURF_ID='STEEL', BLOCK_COLOR='grey' /
```

```
&OBST XB=-0.10,0.00,0.10,2.10,1.40,1.50,SURF_ID='STEEL', BLOCK_COLOR='grey' /
```

```
&OBST XB=-0.10,0.00,0.00,2.20,1.50,2.20,SURF_ID='STEEL', BLOCK_COLOR='grey' /
```

```
&OBST XB= 5.50,5.60,0.00,2.20,0.00,0.70,SURF_ID='STEEL', BLOCK_COLOR='grey' /
```

```
&OBST XB= 5.50,5.60,0.00,2.20,0.70,1.50,SURF_ID='STEEL', BLOCK_COLOR='blue',
```

```
T_REMOVE=325. /
```

```
&OBST XB= 5.50,5.60,0.00,2.20,1.50,2.20,SURF_ID='STEEL', BLOCK_COLOR='grey' /
```

```
&OBST XB=-0.10,5.60,-0.10,2.30,-0.10,0.00,SURF_ID='STEEL', BLOCK_COLOR='grey' /
```

```
&OBST XB=-0.10,5.60,-0.10,2.30, 2.20,2.30,SURF_ID='STEEL', BLOCK_COLOR='grey' /
```

Série de thermocouple située à l'arrière du container (près de l'ouverture):

```
&THCP XYZ=5.0,0.15,2.0,QUANTITY='TEMPERATURE',LABEL='TC_A1' /
```

```
&THCP XYZ=5.0,0.15,1.6,QUANTITY='TEMPERATURE',LABEL='TC_A2'/
&THCP XYZ=5.0,0.15,1.2,QUANTITY='TEMPERATURE',LABEL='TC_A3'/
&THCP XYZ=5.0,0.15,0.8,QUANTITY='TEMPERATURE',LABEL='TC_A4'/
&THCP XYZ=5.0,0.15,0.4,QUANTITY='TEMPERATURE',LABEL='TC_A5'/
```

Série de thermocouple située à l'avant du container (près du bruleur):

```
&THCP XYZ=1.8,1.10,2.0,QUANTITY='TEMPERATURE',LABEL='TC_B1'/
&THCP XYZ=1.8,1.10,1.6,QUANTITY='TEMPERATURE',LABEL='TC_B2'/
&THCP XYZ=1.8,1.10,1.2,QUANTITY='TEMPERATURE',LABEL='TC_B3'/
&THCP XYZ=1.8,1.10,0.8,QUANTITY='TEMPERATURE',LABEL='TC_B4'/
&THCP XYZ=1.8,1.10,0.4,QUANTITY='TEMPERATURE',LABEL='TC_B5'/
```

Thermocouples pour mesurer le debit dans l'ouverture + leakage

```
&THCP XB=5.50,5.50,0.00,2.20,0.70,1.50,QUANTITY='MASS FLOW',LABEL='TC_FLOW'/
```

```
&THCP XB=0.00,0.00,0.00,0.10,0.70,0.80,QUANTITY='MASS FLOW',LABEL='TC_FLOW_L1'/
&THCP XB=0.00,0.00,0.00,0.10,1.40,1.50,QUANTITY='MASS FLOW',LABEL='TC_FLOW_L2'/
&THCP XB=0.00,0.00,2.10,2.20,0.70,0.80,QUANTITY='MASS FLOW',LABEL='TC_FLOW_L3'/
&THCP XB=0.00,0.00,2.10,2.20,1.40,1.50,QUANTITY='MASS FLOW',LABEL='TC_FLOW_L4'/
```

Série de thermocouple située au centre du container:

```
&THCP XYZ=2.75,1.1,1.1,QUANTITY='PRESSURE',LABEL='THCP_PRESSION'/
&THCP XYZ=2.75,1.1,1.1,QUANTITY='oxygen',LABEL='THCP_O2'/
&THCP XYZ=2.75,1.1,1.8,QUANTITY='carbon dioxide',LABEL='THCP_CO2_high'/
&THCP XYZ=2.75,1.1,1.1,QUANTITY='carbon dioxide',LABEL='THCP_CO2_mid'/
&THCP XYZ=2.75,1.1,0.4,QUANTITY='carbon dioxide',LABEL='THCP_CO2_low'/
&THCP XYZ=2.75,1.1,1.1,QUANTITY='fuel',LABEL='THCP_CH4'/
```

Slice File prise en plein centre du container sur sa longueur:

```
&SLCF PBX=1.1,QUANTITY='TEMPERATURE' /
&SLCF PBX=1.1,QUANTITY='fuel' /
&SLCF PBX=1.1,QUANTITY='oxygen' /
&SLCF PBX=1.1,QUANTITY='MIXTURE_FRACTION' /
```

Slice File prise au centre du container sur sa largeur:

```
&SLCF PBX=2.5,QUANTITY='TEMPERATURE' /
&SLCF PBX=2.5,QUANTITY='MIXTURE_FRACTION' /
```

Slice File prise à l'arrière du container sur sa largeur:

```
&SLCF PBX=5,QUANTITY='TEMPERATURE' /
&SLCF PBX=5,QUANTITY='fuel' /
&SLCF PBX=5,QUANTITY='MIXTURE_FRACTION' /
```

```
&PL3D DTSAM=1. /
```

ANNEXE B

Paramètres utilisés par FDS

Lors des simulations

B-1 : Propriétés de l'acier

```
&SURF ID = 'STEEL'
      RGB = 0.20,0.20,0.20
      C_DELTA_RHO = 20.
      DELTA = 0.005 /
```

B-2 : Réaction de combustion du méthane

```
&REAC ID='METHANE'
      FYI='Methane, C H_4'
      MW_FUEL=16
      NU_O2=2.
      NU_CO2=1.
      NU_H2O=2.
      RADIATIVE_FRACTION=0.15
      SOOT_YIELD=0.01 /
```

B-3 : Réaction modifiée de combustion du méthane

```
&REAC ID='METHANE_LOWVENT'
      FYI='under ventilated Methane, C H_4, Phi>2.0'
      MW_FUEL=16
      NU_O2=2.
      NU_CO2=1.
      NU_H2O=2.
      RADIATIVE_FRACTION=0.15
      SOOT_YIELD=0.03
      CO_YIELD=0.34 /
```

ANNEXE C

Variables critiques utilisables

Pour l'application du paramètre NOHR

C-1 Variables critiques compatibles avec le paramètre NOHR

Variable	Description	Symbole	Unités
DENSITY	Densité	ρ	kg/m ³
TEMPERATURE	Température des gaz	T	C
U-VELOCITY	Composante de vitesse	u	m/s
V-VELOCITY	Composante de vitesse	v	m/s
W-VELOCITY	Composante de vitesse	w	m/s
VELOCITY	Vitesse de l'écoulement	$\sqrt{u^2+v^2+w^2}$	m/s
PRESSURE	Pression de perturbation	$\tilde{p}$	Pa
HRRPUV	Dégagement de chaleur par unité de volume	q'''	kW/m ³
MIXTURE_FRACTION	Fraction de mélange	Z	kg/kg
DYNAMIC_VISCOSITY	Viscosité dynamique	μ	kg/m/s
KINEMATIC_VISCOSITY	Viscosité cinématique	μ/ρ	m ² /s
DIVERGENCE	Divergence	$\nabla \cdot \mathbf{u}$	s ⁻¹
WMPUV	Masse d'eau par unité de volume	m_w'''	kg/m ³
WATER VAPOR	Fraction massique de vapeur d'eau	Y _w	kg/kg
oxygen	Fraction volumique d'O ₂	X _{O₂} (Z)	mol/mol
oxygen mass fraction	Fraction massique d'O ₂	Y _{O₂} (Z)	kg/kg
fuel	Fraction volumique de carburant	X _f (Z)	mol/mol
nitrogen	Fraction volumique de N ₂	X _{N₂} (Z)	mol/mol
water vapor	Fraction volumique de H ₂ O	X _{H₂O} (Z)	mol/mol
carbon dioxide	Fraction volumique de CO ₂	X _{CO₂} (Z)	mol/mol
carbon monoxide	Fraction volumique de CO	X _{CO} (Z)	ppm
soot volume fraction	Fraction volumique de suie	$\rho Y_s / \rho_s$	ppm
soot density	Concentration de particules de suie	ρY_s	μg/m ³
extinction coefficient	Coefficient d'extinction lumineuse	K = K _m ρY_s	1/m
visibility	Distance de visibilité	S=C/K	m