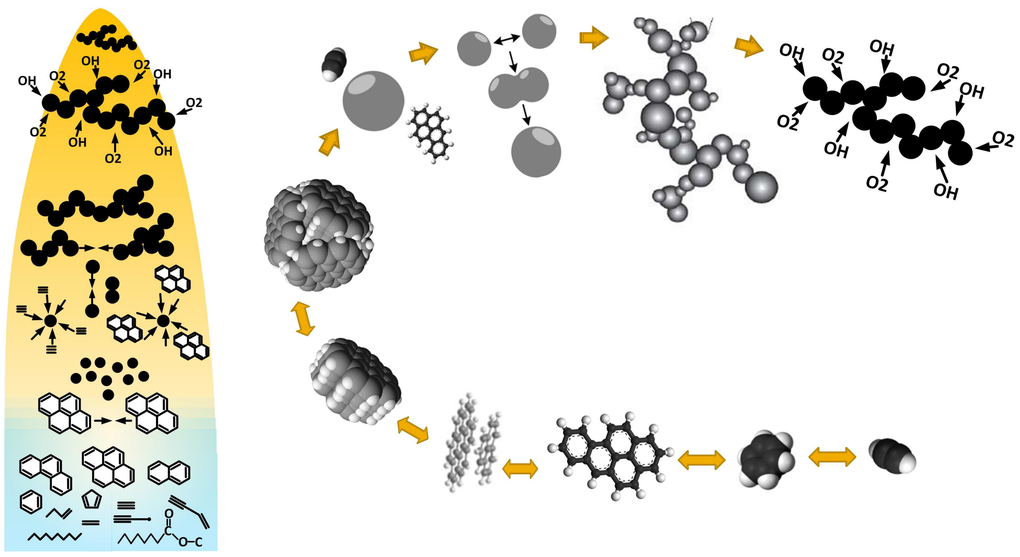
Modélisation de la production de suie dans les incendies

Contexte

Dans les incendies industriels, le transfert radiatif est le mode de transfert de chaleur dominant et la contribution de la suie prédomine généralement sur celle des produits de combustion tels que la vapeur d'eau et le dioxyde de carbone. Ces transferts de chaleur de la flamme et du milieu environnant vers le combustible condensé (liquide ou solide) assurent notamment la pyrolyse de ce dernier qui en retour nourrit la flamme en combustible gazeux. Dans le cas de feu sous-ventilé, le mécanisme de production de la suie est altéré du fait de la déplétion en oxygène ce qui entraîne une modification du transfert radiatif et de la pyrolyse résultante. La modélisation de la production de suie est par conséquent fondamentale si l'on veut espérer modéliser la pyrolyse et avoir des simulations reproduisant fidèlement les incendies industriels, y compris ceux en milieu sous-ventilé caractéristique des feux rencontrés en centrale nucléaire.

Le mécanisme de production de la suie



Schématisation des processus de formation des particules de suie [1]

La principale difficulté à modéliser la suie réside dans son mécanisme, qui est toujours sujet de recherche. Des avancés dans les dernières décennies ont permis d'identifier les PAH (*Polycycliques Aromatiques Hydrocarbures*) comme précurseurs de la suie. Ils sont produits lors de la pyrolyse du combustible, principalement à partir de l'acétylène et des radicaux propargyl et cyclopentadienyl qui conduisent au benzène, le 1er PAH. La nucléation d'une particule de suie (~ 10nm) s'effectue par dimerisation de PAH de taille modérée, typiquement le pyrène (A_4). Ces particules continuent de croître en taille soit par condensation de PAH plus petits, soit par des réactions de surface mettant en jeu l'acétylène. Les particules de suie peuvent aussi se coalescer ou s'agglomérer pour former des chaînes fractales pouvant atteindre 200 nm. A chaque étape de la formation, les particules de suie peuvent subir une oxydation, principalement par le radical OH ou bien aussi par O_2. De plus, ces oxydants étant de petits diamètres, ils peuvent s'insérer dans les structures des suies, y opérer une oxydation et entraîner une fragmentation de la particule de suie.

Vers un modèle de production de suie alternatif pour les incendies

Une modélisation détaillée de la production de la suie nécessite d'inclure les processus décrits ci-dessus. Dans notre modèle le pyrène est considéré comme précurseur immédiat [3]. Une particule de suie primaire se forme alors par la collision de deux molécules de pyrene. Ces particules primaires croissent ensuite en surface par condensation de pyrène et par réaction avec l'acétylène. Le modèle inclue également un modèle de coalescence et d'oxydation. Ci-dessous sont écrites les équations de transport de la fraction massique Y_s et le nombre densité N_s de la suie.

$$\frac{\partial \rho Y_s}{\partial t} + \frac{\partial \rho (u_i + u_i^{th}) Y_s}{\partial x_i} = \dot{\omega}_{nuc}^{Y_s} + \dot{\omega}_{cond}^{Y_s} + \dot{\omega}_{sg}^{Y_s} - \dot{\omega}_{ox}^{Y_s} \quad (1)$$

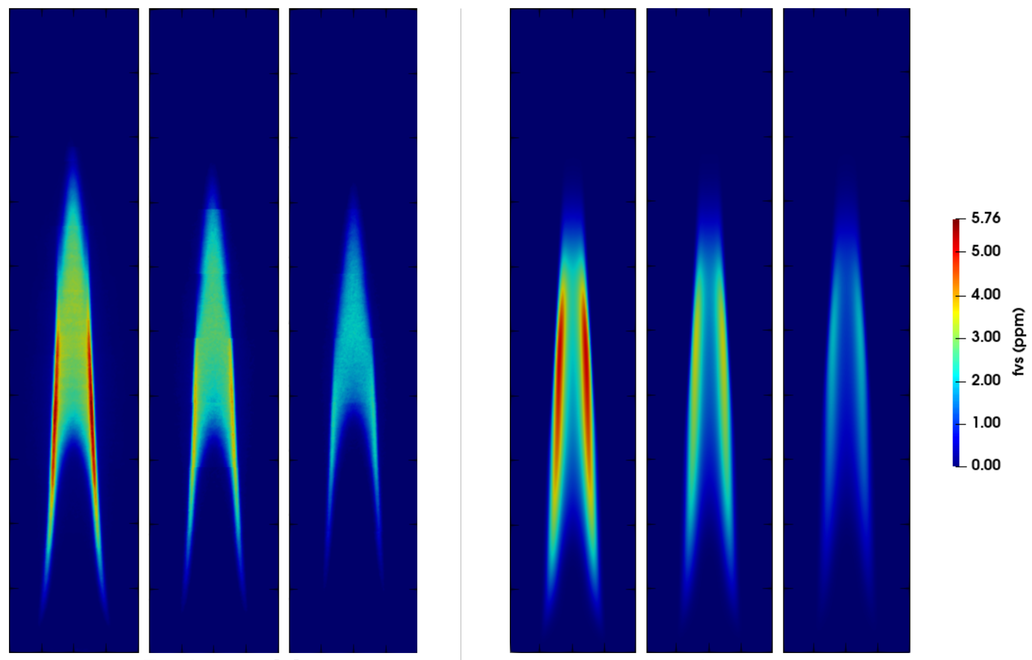
$$\frac{\partial \rho N_s}{\partial t} + \frac{\partial \rho (u_i + u_i^{th}) N_s}{\partial x_i} = \dot{\omega}_{nuc}^{N_s} - \dot{\omega}_{coag}^{N_s} \quad (2)$$

$$\frac{\partial \rho Y_{A_4}}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i Y_{A_4}}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\rho D_{A_4} \frac{\partial Y_{A_4}}{\partial x_i}\right) + \dot{\omega}_{A_4} - \dot{\omega}_{nuc}^{Y_s} - \dot{\omega}_{cond}^{Y_s} \quad (3)$$

Le pyrène étant présent dans des quantités faibles, un couplage avec l'équation de transport du pyrène est nécessaire.

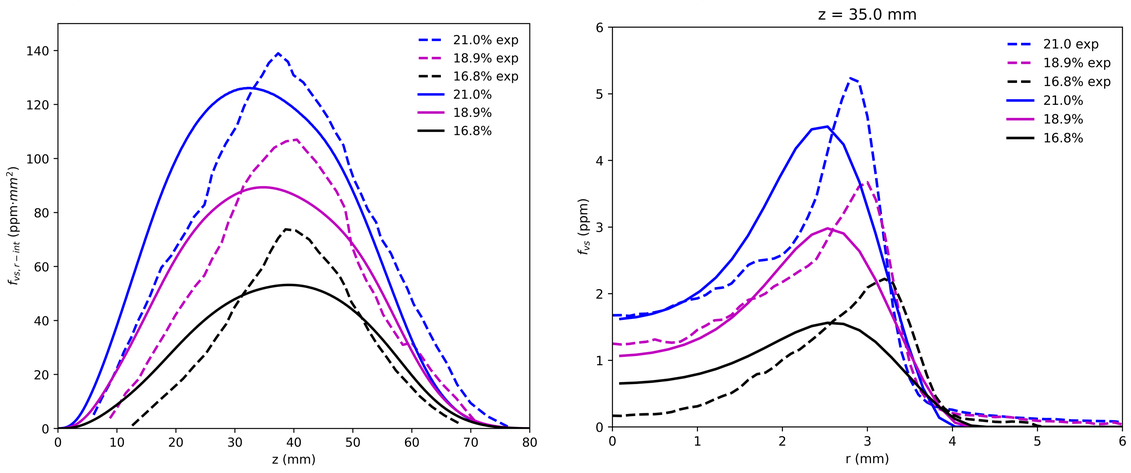
Flamme de diffusion laminaire

Les incendies sont des flammes de diffusion turbulente contrôlées par les forces de flottabilités. L'interaction forte de la suie avec la turbulence implique des exigences de modélisation dont on s'affranchit en investiguant ce modèle de suie sur des flammes de diffusion laminaire. Les flammes laminaires axisymmétriques d'éthylène investiguées expérimentalement par Sun et al. [2] ont été simulées. La fraction volume de suie (f_{vs}) est présentée ci-dessous, pour 3 conditions de déplétion en oxygène.



Expérience [2] Simulation

Le présent modèle A_4 parvient à prédire la quantité de suie sur les ailes de la flamme mais également dans l'axe d'une manière satisfaisante. Le graphique de gauche ci-dessous de la fraction volumique de suie intégrée radialement montre que la quantité de suie totale est bien prédite et celui de droite que la suie est bien répartie radialement dans la flamme. Malgré certaines disparités localisées, ce modèle à un seul précurseur réussit à prédire la physique de production de la suie, un vrai challenge.



Références

[1] Thomson Lab,University of Toronto, *https://combustion.mie.utoronto.ca*,

[2] Zhiwei Sun and Bassam Dally and Zeyad Alwahabi and Graham Nathan, *Combustion and Flame, 211, 96-111, 2020*

[3] Jörg Appel and Henning Bockhorn and Michael Frenklach, *Combustion and Flame, 121, 1, 122-136, 2000*

PARTNERS LOGOS RESERVED AREA

Contacts: Antoine Bouffard, antoine.bouffard@edf.fr
Tuteur EDF : Fatiha Nmira, fatiha.nmira@edf.fr
Directeur de thèse : Jean-Louis Consalvi, jean-louis.consalvi@univ-amu.fr

EDF Lab Chatou
MFEE Department
6, quai Watier
78400 Chatou

EDF SA au capital de 924 433 331euros - RCS Paris B 552 081 317 - Copyright EDF Médiathèque