

16^{èmes} Journées Internationales de Thermique (JITH 2013) Marrakech (Maroc), du 13 au 15 Novembre, 2013

Etude numérique du comportement de la dispersion d'hydrogène lors d'une fuite dans un espace partiellement ouvert

Yassine Hajji^{1*}, Mourad Bouteraa¹, Afif EL Gafsi¹ et Ali Belghith¹ ¹LETTM, Faculté des Sciences de Tunis, Campus Universitaire 1060 Tunis TUNISIE.

* yassin_hajji@yahoo.fr

Résumé : L'hydrogène paraît devoir jouer, dans un proche avenir, un rôle important dans le domaine des énergies nouvelles. En effet, la raréfaction des ressources en énergies fossiles doit être compensée par l'utilisation de nouvelles sources d'énergie qui impliquent l'utilisation de méthodes de stockage et de transport efficaces et souples dont nombre d'entre elles peuvent faire appel au vecteur hydrogène.

La sécurité est reconnue comme l'un des problèmes les plus importants face à l'utilisation plus étendue de l'hydrogène et le risque accru de la libération accidentelle dans l'infrastructure. La dispersion et l'accumulation d'hydrogène dans un espace partiellement ouvert avec une ventilation naturelle est étudiée, numériquement par le logiciel commercial FLUENT, dans le présent document. Après validation de notre code de calcul, le présent procédé est appliqué à un garage. Dans les simulations, différentes formes du plafond sont considérées en étudiants leurs effets sur d'augmentation de la concentration, la dispersion et de l'accumulation d'hydrogène.

Mots clés :

Hydrogène; stockage et dispersion; sécurité; ventilation; Fluent.

1. Introduction

La démarche en faveur du développement durable favorise la réduction de la consommation énergétique, le contrôle de la pollution et la diversification des sources d'énergie primaires, le développement des énergies renouvelables. L'hydrogène figure parmi les nouvelles énergies susceptibles de limiter à long terme les rejets de gaz à effet de serre. En effet, l'hydrogène utilisé dans les piles à combustible ou dans un moteur à combustion interne, est un vecteur d'énergie qui fournit de l'électricité et de la chaleur avec de l'eau comme seul résidu. Or si l'hydrogène est un gaz classé « extrêmement inflammable » : il possède un domaine d'inflammabilité large (4% - 75%). Son énergie d'inflammation est environ 10 fois inférieure à celle des hydrocarbures classiques. Par contre, sa température d'auto inflammation est plus élevée (585°C). La flamme de la combustion de l'hydrogène dans l'air est quasi-invisible et est très chaude (2000°C).

Il manifeste un potentiel d'explosibilité très élevé en milieu confiné. C'est le plus léger des gaz; il se diffuse très vite dans l'air et présente une propension élevée à fuir.

Diverses questions de sécurité ont été discutées jusqu'à présent. Il s'agit notamment de la fragilité de l'hydrogène, la pénétration, les fuites par convection, l'inflammation et l'explosion. En particulier, la recherche sur les fuites d'hydrogène est importante pour éviter toute inflammation accidentelle, et de fixer la marge de sécurité pour les fuites. Par conséquent, pour assurer l'utilisation sécuritaire de l'hydrogène, il est nécessaire de prévoir et de comprendre les caractéristiques de sa fuite et la dispersion. Récemment, plusieurs chercheurs ont étudié la dispersion et les fuites d'hydrogène. Les sujets d'étude ont inclus un jet d'hydrogène à travers une buse [1], les couches limites [2-3], la dispersion transitoire dans un cylindre vertical [4], la dispersion et la ventilation naturelle dans un garage [5,6,7,8,9,10,11], tunnel [12] et des chambres domestiques [13], les effets de la fuite et de la dispersion dans l'atmosphère [14]. Swain et Swain [15] ont rapporté sur l'influence de la géométrie du bâtiment et la ventilation passive sur la formation d'un nuage de gaz combustible. Ils ont également discuté une méthode de classification des fuites d'hydrogène et ils ont proposé une détermination des risques pour les espaces semi-ouvertes [1]. Matsuura et al. [7] ont examiné les effets de variation des positions des ouvertures de ventilation et les conditions d'aération sur la distribution des risques de fuite d'hydrogène dans un espace partiellement ouvert.

William M. Pitt et al. Ont réalisé des études expérimentales visant à caractériser le comportement de l'Hélium (dans un garage résidentiel à échelle réduit 1/4) [16], du mélange hydrogène-air lorsqu'il est libéré dans un garage résidentiel de deux voitures [17]; Ils ont étudié la distribution de la fraction d'hydrogène dans le

garage en présence et en absence de véhicule, le comportement de la combustion du mélange hydrogène-air qui entraîne des dommages du garage et du véhicule.

Kuldeep Prasad et al. ont étudié la ventilation naturelle et forcée de gaz porteur libéré dans un garage à grande échelle, ils ont développé un modèle analytique simple pour prédire le mélange naturel et forcé et la dispersion d'un gaz porteur libéré dans un compartiment partiellement ouvert avec des évents à de multiples niveaux.

Ces études ont montré que la dispersion de l'hydrogène et l'accumulation dans les espaces confinés sont des exemples de scénarios les plus dangereuses.

En utilisant l'hydrogène pour l'étude nécessite une installation bien préparée pour assurer l'exécution sécurisé des expériences. À cet égard, le CFD est considéré comme une approche coût-efficace et sans danger. Si les facteurs constitutifs, tels que les produits chimiques, les modèles physiques, les modèles de turbulence, les conditions aux limites, etc., sont modélisés correctement, et les schémas numériques sont contrôlés [7], la méthode fournit beaucoup d'informations sur les liaisons intégrés qui augmentent le risque potentiel. Cette information est également importante dans le calcul.

La revue de la littérature concernant la convection naturelle dans des cavités triangulaires isocèles montre que cette configuration a fait l'objet d'études expérimentales et numériques multiples. La température, les flux de chaleur de la paroi locales, et les taux de flux de chaleur moyenne ont été mesurées expérimentalement par Flack [18, 19] dans des cavités triangle isocèle avec trois rapports de forme différents. Les cavités remplies d'air, ont été chauffés/refroidis à partir de la base et refroidi/chauffé par les parois inclinées couvrant une large gamme de nombre Grashof. Asan et al. [3] ont réalisé une étude numérique de la convection naturelle laminaire dans un toit triangulaire en examinant une condition de paroi adiabatique dans leur procédure numérique.

Dans cette étude, la dispersion d'hydrogène dans un garage de forme prismatique (toiture rectangulaire) est étudiée numériquement par le logiciel commercial Fluent, en considérant les facteurs importants qui influent sur le comportement de la concentration de l'hydrogène et l'accumulation, telles que la forme de la toiture du garage.

2. Configuration géométrique

Dans notre travail, nous utilisons le code de calcul CFD Fluent, en traçant tout d'abord notre configuration sur Gambit, on a utilisé un modèle instationnaire et le k- ε standard comme modèle de turbulence. Pour la validation de nos résultats numériques, nous avons choisi l'étude expérimentale de William M. Pitts et al. [17] (Figure 1).



Figure 1 : Vue extérieure du garage de William M. Pitts et al.

Le garage ayant des dimensions intérieures de 6.10m (largeur), 6.10m (longueur), 3.05m (hauteur). Deux ouvertures $(0,2m \times 0,2m)$ dans la paroi latérale droite à la hauteur de 2,3m fournissent un accès visuel à l'intérieur. L'hydrogène, utilisé pour cette étude, pénètre dans le garage à travers la section supérieure d'une buse de forme rectangulaire, de 0.305m (largeur), 0.305m (longueur), 0.15m (hauteur), située au centre du sol du garage.

Pour faire la construction et le maillage du garage, on a utilisé le logiciel Gambit. (Figure 2). La qualité du maillage a une grande importance sur les résultats obtenus par un calcul numérique. Pour cela nous avons choisi un maillage structuré et serré tel que le nombre des mailles est environ 1 million.

Le taux de fuite d'hydrogène est supposé constant suffisant pour libérer 5 kg (une quantité alimentée dans des réservoirs d'hydrogène utilisés actuellement dans les automobiles) en 1 h ; le débit massique utilisé est de 83,3 g/min correspond à un débit volumique de 994 l/min dans les conditions standard de pression et température (1 atm et 20° C).



Figure 2 : Géométrie du garage adoptée tracée avec Gambit

3. Méthode numérique

Les équations qui régissent sont l'équation de continuité, l'équation de Navier-Stokes compressible avec une force gravitationnelle, l'équation de l'énergie et l'équation de transport pour la fraction massique de l'hydrogène. La turbulence est modélisée par le modèle k- ε standard. Les espèces de gaz diffus selon la loi de Fick. L'équation des gaz parfaits est utilisée pour fermer le système des équations. Le panache d'hydrogène est classé comme non-Boussinesq [8,9], et donc l'approximation de Boussinesq n'est pas utilisée. Des effets de flottabilité résultant des différences de densité pour des raisons thermiques et chimiques sont traités directement.

4. Résultats et discussion 4.1. Confrontation des résultats

Dans la partie de présentation des résultats, on commence par la validation de notre code numérique. La figure 3 montre une comparaison de nos résultats numériques, obtenus à l'aide du logiciel Fluent, avec les résultats expérimentaux de William et al. qui a mesuré la fraction volumique de l'hydrogène en fonction du temps à huit positions sur une ligne verticale du garage en fixant x=3.05m et y=5.49m [17]. On a choisit seulement trois positions pour faire la comparaison : la première près du sol (z=0.38m), la deuxième à mihauteur (z=1.52m) et la troisième près du plafond (z=3.05m).



Figure 3 : fraction volumique de l'hydrogène en fonction du temps : confrontation des résultats numériques et expérimentaux pour les trois points de mesure choisit.

Pour chaque cas, le capteur le plus proche du plafond a été le premier à détecter l'hydrogène. Seules quelques secondes sont nécessaires pour que l'hydrogène atteindre cet endroit. Comme le temps passe, la fraction volumique de l'hydrogène augmente durant la période de libération de l'hydrogène qui est égale à environ 3600s c.-à-d. 1 heure. On remarque que ces valeurs obtenues de la fraction volumique de l'hydrogène (environ 30%) sont suffisantes pour qu'un mélange hydrogène/air à l'intérieur du garage soit inflammable, puisque le domaine d'inflammabilité de l'hydrogène est (4% - 75%). Malgré la présence de deux ouvertures sur la paroi latérale droite du garage, elles sont insuffisantes de pour ventiler l'espace et pour éviter l'accumulation de l'hydrogène. On remarque aussi que nos résultats numériques sont en bon accord avec l'expérience pour toutes les positions de mesure, et plus particulièrement pour ces trois positions choisit.

4.2. Effet de la variation de l'angle au sommet

Dans le but de minimiser l'accumulation de l'hydrogène à l'intérieur du garage, cette partie est consacrée pour l'étude de l'effet de la géométrie prismatique sur l'accumulation et la dispersion de l'hydrogène, c'est pour cela que nous avons jugé utile d'étudier l'influence de la variation de l'angle au sommet A sur la concentration de l'hydrogène à l'intérieur du garage (Figure 4). Nous avons pris trois valeurs de A (A= 120°,

150° et 180°) en gardant les mêmes dimensions du garage utilisées par William et al. [17] (Largeur : 6.10m, longueur : 6.10m, hauteur : 3.05m).

Dans la figure 5 nous présentons les isovaleurs de la fraction molaire de l'hydrogène pour différents angles au sommet A, suivant le plan y=3.05m c.-à-d. au milieu du garage. On remarque qu'après quelques secondes du début de la fuite, une couche d'hydrogène commence à se former près du plafond puis elle descende progressivement et ça est dû à la faible densité de ce gaz puisque l'hydrogène est le gaz le plus léger. On remarque aussi qu'il ya trois zones dans ces isovaleurs : une zone supérieure très intense qui caractérise la stratification de l'hydrogène dans la région supérieure du garage, puis une deuxième zone moins intense au milieu et d'épaisseur inferieur, enfin la troisième zone près du sol d'intensité plus faible d'épaisseur environ 0.5m. Pour A= 120° on constate que l'épaisseur de la couche supérieure diminue ce qui implique la stratification du garage.



Figure 4 : Schéma du garage : cavité prismatique.





Figure 6 : fraction volumique de l'hydrogène en fonction du temps pour différentes valeurs de A.

La figure 6 montre que la fraction molaire de l'hydrogène augmente en fonction du temps et en fonction de la position z ; pour z=3.05m (dans la zone supérieure), z=1.52m (dans la zone au milieu) et pour z=0.38m (dans la zone près du sol). On remarque aussi que lorsque l'angle au sommet A diminue, c.-à-d. la cavité prismatique devient plus grande, la fraction d'hydrogène diminue presque 7% pour les trois positions de z ce qui implique l'effet de se paramètre géométrique sur la concentration d'hydrogène. (Tableau 1)

rableau 1. naction molare u nydrogene en pourcentage.			
	A= 180°	A= 150°	A= 120°
Z= 0.38m	31.84 %	28.75 %	25.52 %
Z= 1.52m	33.07 %	29.84 %	26.39 %
Z= 3.05m	33.47 %	30.22 %	26.84 %

Tableau 1 : fraction molaire d'hydrogène en pourcentage.

5. Conclusion

Cette étude effectue une simulation numérique, par le logiciel FLUENT, de la dispersion de l'hydrogène dans un garage de deux voitures. Après la validation de notre code de calcul, les effets de différentes angles au sommet A sur la dispersion et l'accumulation d'hydrogène sont présentés et discutés. On remarque qu'il ya formations de trois zones dans le garage: une zone supérieure très intense, puis une deuxième zone moins intense au milieu et d'épaisseur inferieur, enfin la troisième zone près du sol d'intensité plus faible d'épaisseur environ 0.5m. Pour $A= 120^{\circ}$ on constate que l'épaisseur de la couche supérieure diminue ce qui implique la stratification de l'hydrogène dans la cavité prismatique. On remarque aussi que lorsque l'angle au sommet A diminue, c.-à-d. la cavité prismatique devient plus grande, la fraction d'hydrogène diminue presque 7% pour les trois positions de z ce qui implique l'effet de se paramètre géométrique sur la concentration d'hydrogène.

Références

[1] J. Ishimoto, K. Ohira , K. Okabayashi , K. Chitose , Integrated numerical prediction of atomization process of liquid hydrogen jet. Cryogenics 2008; 48:238e47.

[2] MF. El-Amin, H. Kanayama, Boundary layer theory approach to the concentration layer adjacent to a ceiling wall at impinging region of a hydrogen leakage. *Int J Hydrogen Energy* 2008; 33(21):6393e400.

[3] MF. El-Amin, H. Kanayama. Boundary layer theory approach to the concentration layer adjacent to the ceiling wall of a hydrogen leakage: axisymmetric impinging and far regions. *Int J Hydrogen Energy* 2009; 34(3): 1620e6.

[4] SK. Vudumu, UO. Koylu. Detailed simulations of the transient hydrogen mixing, leakage and flammability in air in simple geometries. *Int J Hydrogen Energy* 2009; 34(6): 2824e33.

[5] CD. Barley, K. Gawlik . Buoyancy-driven ventilation of hydrogen from buildings: laboratory test and model validation. *Int J Hydrogen Energy* 2009; 34(13):5592e603.

[6] S. Gupta, J. Brinster, E. Studer, I. Tkatschenko, Hydrogen related risks within a private garage: concentration measurements in a realistic full scale experimental facility. *Int J Hydrogen Energy* 2009;34(14):5902e11

[7] K. Matsuura, H. Kanayama, H. Tsukikawa, M. Inoue. Numerical simulation of leaking hydrogen dispersion behavior in a partially open space. *Int J Hydrogen Energy* 2008;33(1): 240e7.

[8] K. Matsuura, Effects of the geometrical configuration of a ventilation system on leaking hydrogen dispersion and accumulation. *Int J Hydrogen Energy* 2009;34(24):9869e78.

[9] EA. Papanikolaou, AG. Venetsanos, M. Heitsch, D. Baraldi, A. Huser, J. Pujol, HySafe SBEP-V20: numerical studies of release experiments inside a naturally ventilated residential garage. *Int J Hydrogen Energy* 2010;35(10):4747e57.

[10] K. Prasad, J. Yang, Vertical releases of hydrogen in a partially enclosed compartment: Role of wind and buoyancy. *Int J Hydrogen Energy* 2011;36(1):1094e106.

[11] MR. Swain, ES. Grilliot, MN. Swain, Risks incurred by hydrogen escaping from containers and conduits. *Proc of the 1998 US DOE Hydrogen Program Review 1998*, NREL/CP-570e25315.

[12] P. Middha, OR. Hansen. CFD simulation study to investigate the risk from hydrogen vehicles in tunnels. *Int J Hydrogen Energy* 2009;34(14):5875e86.

[13] BJ. Lowesmith, G. Hankinson, C. Spataru, M. Stobbart, Gas build-up in a domestic property following releases of methan/hydrogen mixtures. *Int J Hydrogen Energy* 2009; 34(14):5932e9.

[14] TK. Tromp, RL. Shia, M. Allen, JM. Eiler, YL. Yung, Potential environmental impact of a hydrogen economy on the stratosphere. *Science* 2003;300:1740e2.

[15] MR. Swain, MN. Swain. Passive ventilation systems for the safe use of hydrogen. *Int J of Hydrogen Energy 1996*;21(10): 823–35.

[16] WM. Pitts, JC. Yang, MG. Fernandez, Experimental characterization of helium dispersion in a ¹/₄-scale twocar. Int J Hydrogen Energy, 2011

[17] W. M. Pitts, J. C. Yang, M. Blais, A. Joyce, Dispersion and burning behavior of hydrogen released in a full-scale residential garage in the presence and absence of conventional automobiles, *Int J Hydrogen Energy*, 2012

[18] R. D. Flack, Velocity Measurements in Two Natural Convection air Flows Using a Laser Velocimeter, J. *Heat Transfer*, 101 (1979), 2, pp. 256-260

[19] R. D. Flack, The Experimental Measurement of Natural Convection Heat Transfer in Triangular Enclosures Heated or Cooled from Below, *J. Heat Transfer*, 102 (1980), 4, pp. 770-772