

Analyse de sensibilité de scénarios de rejets accidentels d'ammoniac

PANDYA Nishant^{a,b*}, MARSDEN Eric^a, GABAS Nadine^b

^aInstitut pour une Culture de Sécurité Industrielle
6 allée Emile Monso, BP 34038, F-31029 Toulouse cedex 04, France

^bUniversité de Toulouse (INPT, UPS, Laboratoire de Génie Chimique)
5 rue Paulin Talabot, BP1301, F-31106 Toulouse cedex 01, France

Résumé

Cet article présente les résultats de l'analyse de sensibilité paramétrique du logiciel PHAST de modélisation de la dispersion atmosphérique de rejets accidentels de produits toxiques. Le cas étudié est une fuite diphasique survenue à partir d'un réservoir de stockage d'ammoniac sous pression. La méthode d'analyse de sensibilité globale EFAST est utilisée pour calculer les indices de sensibilité du premier ordre et totaux. Le scénario de base est divisé en sous-scénarios suivant les paramètres du terme source qui conditionnent les phénomènes physiques : débit de fuite, angle de rejet, couple classe de stabilité atmosphérique/vitesse du vent et hauteur de rejet. L'influence relative des nombreux paramètres d'entrée, répartis dans quatre familles, est étudiée sur les sorties du modèle telles que : concentrations dans les champs proche, moyen et lointain, distances dans la direction du vent correspondant à divers seuils toxiques. Cette étude montre notamment que les résultats de l'analyse de sensibilité dépendent fortement des sous-scénarios de rejets d' NH_3 . Une interprétation physique des effets des paramètres est avancée.

Mots clés : rejet accidentel, ammoniac, dispersion atmosphérique, analyse de sensibilité, logiciel PHAST.

1. Introduction

Dans le cadre de la réalisation des études de danger, la réglementation française prévoit le calcul de périmètres de sécurité autour des établissements industriels à risques. La libération accidentelle de gaz toxique constitue un des scénarios d'accident les plus répandus. L'étude de la dispersion atmosphérique des nuages de gaz, afin de modéliser les conséquences, fait appel à des logiciels de simulation parmi lesquels le logiciel PHAST, qui fait référence. Les résultats de la simulation étant dépendants d'un très grand nombre de paramètres de modélisation ajustables, il est apparu important de mener une étude approfondie sur l'analyse de la sensibilité paramétrique de cet outil. Les scénarios choisis dans cette étude proviennent d'un rejet diphasique à partir d'un stockage d'ammoniac liquéfié sous pression.

2. Méthodologie d'analyse de sensibilité paramétrique

Pour conduire l'analyse de sensibilité paramétrique, nous avons développé une méthodologie en reliant les logiciels PHAST et SimLab (Pandya et al., 2008a et 2008b).

2.1 PHAST

Le logiciel PHAST[®] (Process Hazard Analysis Software Tool), commercialisé par la société DNV (Det Norske Veritas), est un outil complet d'analyse des risques d'une installation industrielle. PHAST simule l'évolution d'un rejet accidentel d'un produit toxique et/ou inflammable, depuis la fuite initiale jusqu'à la dispersion atmosphérique en champ lointain, incluant la modélisation de l'épandage et de l'évaporation de flaque. PHAST est capable de modéliser les scénarios de rejets à partir des divers termes sources (fuite sur la paroi d'un réservoir, rupture d'une canalisation, ...) qui sont ensuite combinés avec le modèle de dispersion de PHAST de type intégral, appelé Unified Dispersion Model (UDM), pour obtenir par exemple : i) les distances de sécurité correspondant aux seuils toxiques et ii) l'empreinte du nuage au sol

* nishant.pandya@icsi-eu.org

à un instant donné. Dans cette étude, nous avons utilisé la version 6.54 de PHAST. L'outil comporte un grand nombre de paramètres ajustables, dont l'impact sur les résultats, dans différentes situations, est parfois mal connu des utilisateurs. L'objectif de l'analyse de sensibilité est de quantifier et de comprendre cet impact, en s'appuyant sur l'exécution d'un très grand nombre de simulations.

2.2 SimLab

Le logiciel gratuit SimLab version 3.0.8 (2009) a été choisi pour effectuer l'analyse de sensibilité globale (ASG) et en particulier calculer les indices de sensibilité du 1^{er} ordre qui représentent l'influence intrinsèque de chaque paramètre sur les sorties du modèle. Il existe plusieurs méthodes d'ASG telles que EFAST (Extended Fourier Amplitude Sensitivity Test) et Sobol' (Chan et al., 2004). Ces méthodes, basées sur l'analyse de la variance, permettent d'évaluer l'influence relative des paramètres sur les sorties du modèle en faisant varier tous les paramètres simultanément et sur toute la plage de valeurs.

2.3 Méthodologie

Elle comprend plusieurs étapes :

1. La description de chaque paramètre (valeur minimale, valeur maximale et type de distribution) est définie par l'utilisateur, enregistrée dans le contrôleur et envoyée vers SimLab.
2. L'ensemble des échantillons généré par SimLab, selon une méthode d'échantillonnage aléatoire, est enregistré dans le contrôleur. L'échantillon relatif à un scénario donné contient 20000 points.
3. Pour chaque point échantillonné, les sorties calculées par PHAST sont transmises au contrôleur.
4. L'ensemble des valeurs de sortie est transféré à SimLab.
5. SimLab calcule les indices de sensibilité selon la méthode choisie (EFAST ou Sobol').

3. Phénomène de dispersion

Nous avons étudié divers produits toxiques et inflammables qui interviennent couramment dans le cadre des études de dangers d'installations industrielles à risques : gaz léger (monoxyde d'azote), gaz liquéfié sous pression (ammoniac), gaz dense (chlore), liquide (hexane), liquide cryogénique (azote), gaz réactif qui polymérise avec l'eau (fluorure d'hydrogène). L'ensemble de ces rejets permet de couvrir les différents types de phénomènes physiques et donc de bien explorer les fonctionnalités du modèle de dispersion de PHAST (UDM). Cet article porte uniquement sur des rejets continus d'ammoniac en champ libre pendant une heure, issus d'une brèche sur la paroi d'un réservoir de stockage.

3.1 Rejet diphasique d'ammoniac

L'ammoniac est stocké en phase liquide à 0 °C et à sa pression de vapeur saturante (3,3 bars relatifs). Dans le cas d'une fuite continue en phase liquide, l'ammoniac se détend jusqu'à la pression atmosphérique. A cause de cette brusque dépressurisation, la fuite est diphasique. Une partie du rejet se vaporise ("flash thermodynamique") et l'autre partie se fragmente en fines gouttelettes. Selon la trajectoire et le diamètre des gouttelettes, elles s'évaporent totalement pendant leur trajet dans l'atmosphère, ou elles rencontrent le sol et forment une flaque qui s'évapore sous l'effet des échanges de chaleur avec le sol et l'atmosphère.

3.2 Modèle UDM

Selon le modèle UDM (Witlox, 2006), la simulation de la dispersion atmosphérique d'un nuage comprend différentes phases comme le montre par exemple la *Figure 1* dans le cas d'un rejet d'ammoniac près du sol (le trait pointillé correspond à l'axe du nuage).

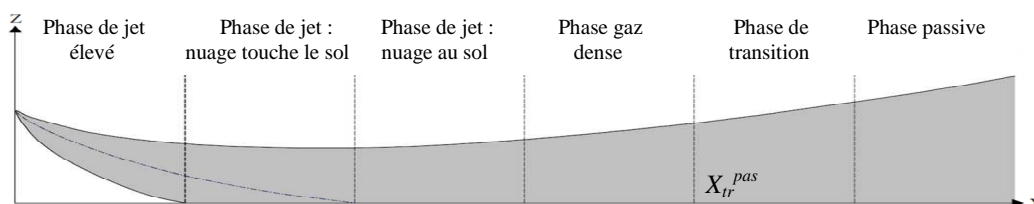


Figure 1. Phases de dispersion selon le modèle UDM pour un scénario ammoniac

Le modèle UDM repose sur un système d'équations différentielles de bilans matière, chaleur et quantité de mouvement, auquel s'ajoutent les équations qui régissent l'étalement du nuage. Le système d'équations dépend de la phase de dispersion. Pour un rejet continu, la résolution de ce système se fait suivant la distance X , dans la direction du vent.

Le terme E_{tot} ($\text{kg}\cdot\text{s}^{-1}\cdot\text{m}^{-1}$), qui représente l'entraînement total de l'air ambiant dans le nuage, est la somme de cinq contributions :

- entraînement « jet », E_{jet} : il se produit à cause de la différence entre la vitesse de nuage et la vitesse du vent. Il est proportionnel au coefficient α_1 .
- entraînement « cross-wind », E_{cross} : il est associé à la formation de tourbillons pendant les mouvements ascendant et descendant du nuage. Il est proportionnel au coefficient α_2 .
- entraînement passif dans le champ proche : il est créé par la turbulence ambiante dans le champ proche. Il est proportionnel au coefficient e_{pas} .
- entraînement « gaz-dense » : il est dû à la différence de masse volumique entre le nuage et l'air.
- entraînement passif dans le champ lointain : il est créé par la turbulence ambiante dans le champ lointain.

Sur la *Figure 1*, on note la présence d'une phase de dispersion virtuelle, dite de transition, qui permet d'éviter des discontinuités de comportement du nuage entre le champ proche et le champ lointain. Cette phase démarre à la distance X_{tr}^{pas} , qui est atteinte lorsque les quatre conditions suivantes sont satisfaites :

- la vitesse du nuage est assez proche de celle de l'air : ce critère dépend de la valeur de r_u^{pas} .
- la densité du nuage est assez proche de celle de l'air : ce critère dépend de la valeur de r_{ro}^{pas} .
- l'entraînement passif dans le champ proche représente la quasi-totalité de l'entraînement total : ce critère dépend de la valeur de r_E^{pas} .
- le nombre de Richardson est suffisamment petit : ce critère dépend de la valeur de Ri^{pas} .

Dans la phase de dispersion dite « gaz dense », l'étalement du nuage suivant Y dépend du paramètre CE .

4. Stratégie de choix des scénarios

Nous avons en préalable effectué une analyse de sensibilité en faisant varier l'ensemble des paramètres, que nous avons décomposé en quatre classes : les paramètres du terme source et les paramètres météo (A), les paramètres liés aux choix d'un modèle (B), les paramètres internes des modèles physiques (C) et les paramètres de résolution numérique (D). Les résultats montrent que les paramètres les plus influents sont ceux de la classe A. L'influence des paramètres appartenant aux autres classes est masquée par celle relativement importante (et peu surprenante) des paramètres de la classe A. Pour effectuer l'analyse de sensibilité des scénarios ammoniac, nous avons donc fixé les paramètres de la classe A. Par exemple, pour une fuite de diamètre 50 mm à partir d'un stockage d'ammoniac à 0 °C et à 3,3 bars relatifs, les conditions finales de rejet après l'expansion jusqu'à la pression atmosphérique, calculées avec le module « leak » de PHAST, sont : débit de 27,1 kg/s, vitesse égale à 144 m/s, température égale à -33°C, fraction liquide de 0,89 et diamètre moyen des gouttes égal à 16,8 μm .

En outre, nous avons identifié quatre paramètres de la classe A, que nous qualifions de paramètres « de bifurcation », qui entraînent des phénomènes physiques très différents : débit de rejet, angle de rejet, classe de stabilité / vitesse du vent, et hauteur de rejet. Afin de pouvoir interpréter physiquement les résultats de l'analyse de sensibilité, nous avons étudié de façon séparée des sous-scénarios pour des valeurs basses et élevées de chaque paramètre de bifurcation. Les deux valeurs fixées pour chaque paramètre de bifurcation sont présentées dans le *Tableau 1*. Les différentes combinaisons de ces valeurs définissent l'arbre des scénarios ammoniac (*Figure 2*).

Tableau 1. Paramètres de bifurcation des scénarios ammoniac

Paramètres de bifurcation	valeur 1	valeur 2
Débit de rejet, Q (kg/s)	faible : 27,1	fort : 278,8
Angle de rejet, θ (degré)	horizontal : 0 °	vertical : 90 °
Classe de stabilité atmosphérique / vitesse du vent (m/s)	neutre : D / 5	stable : F / 3
Hauteur de rejet, Z_R (m)	faible : 1	élevée : 20

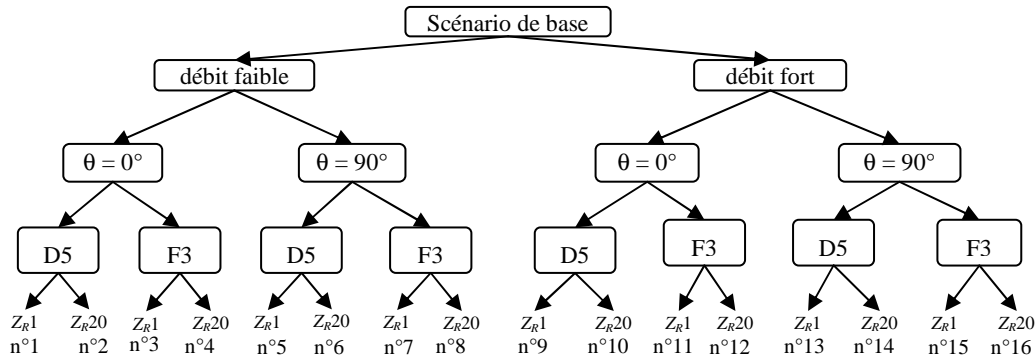


Figure 2. Arbre des scénarios ammoniac étudiés

Pour chacun des 16 scénarios étudiés, les paramètres sont décrits dans le Tableau 2.

Tableau 2. Paramètres étudiés

N°	Paramètres [valeur par défaut dans PHAST]		min	max
1	Flux solaire radiatif ($W \cdot m^{-2}$) [500]	S_{flux}	0	1200
2	Profil vertical du vent (vitesse : 1-constante mesurée à 10 m, 2-loi puissance) [2]	W_p		1, 2
3	Profil vertical de T et P (1-constant, 2-linéaire, 3- T log et P linéaire) [3]	TP_p		1, 2, 3
4	Transfert de chaleur entre le nuage et le sol (1-non, 2-oui) [2]	HT		1, 2
5	Inversion de température (1-oui, 2-non) [1]	$Mixing$		1, 2
6	Surface d'épandage du liquide (1-terre mouillée, 2-terre sèche, 3-béton, 4-béton étanche) [3]	S_{pool}		1, 2, 3, 4
7	Modèle thermo. d'évaporation des gouttelettes (1-équilibre, 2-non-équilibre) [2]	M_{thrm}		1, 2
8	Méthode de résolution des équations nuage/gouttes (2-synchronisé, 6- rigoureux) [2]	M_{drop}		2, 6
9	Coefficient d'entraînement « jet » [0,17]	α_j	0,01	2
10	Coefficient d'entraînement « cross-wind » [0,35]	α_c	0,01	2
11	Coefficient de traînée entre le nuage et l'air [0]	CDa	0	1
12	Coefficient d'entraînement de coté du nuage dense [0]	γ	0	2
13	Coefficient d'étalement du nuage dense [1,15]	CE	0	2
14	Coefficient d'entraînement passif dans le champ proche [1]	e_{pas}	0	1
15	Différence max. entre la vitesse nuage/air ambiant [0,1]	r_u^{pas}	0	1
16	Différence max. entre la densité nuage/air ambiant [0,015]	r_{ro}^{pas}	0,01	2
17	Fraction max. de l'entraînement non-passive [0,3]	r_E^{pas}	0	1
18	Nombre de Richardson maximum [15]	Ri^{pas}	0	50
19	Facteur de multiplication pour la phase passive [2]	r_{tr}^{pas}	1,01	2
20	Nombre de Richardson pour le décollement du nuage [-20]	Ri	-100	0
21	Paramètres de transition quasi-instantanée [0,8]	r_{quasi}	0,1	10
22	Nombre de Richardson pour la transition passive au dessus de la flaque [0,015]	Ri_{pool}	0	10
23	Paramètre d'entraînement de l'évaporation de flaque [1,5]	Ent_{pool}	0	2
24	Hauteur effective minimale du nuage (m) [0,02]	H_{mineff}	0,01	1

Les sorties considérées, calculées à $Z = 1,5$ m (hauteur moyenne d'une personne) sont :

- Concentrations à trois distances dans la direction du vent : C_{200} : champ proche ($X = 200$ m), C_{1k} : champ moyen ($X = 1000$ m), C_{10k} : champ lointain ($X = 10000$ m),
- Distances d'effets dans la direction du vent correspondant au seuil des effets irréversibles (SEI = 354 ppm), au seuil des premiers effets létaux (SEL 1% = 3400 ppm) et au seuil des effets létaux significatifs (SEL 5% = 3633 ppm) : $X(SEI)$, $X(SEL1)$ et $X(SEL5)$.

Le temps d'intégration (« averaging time » en anglais) est toujours pris égal à la durée de rejet (1 heure).

5. Résultats et discussion

5.1 Résultats

Notre travail produit un grand nombre de données, que nous ne pouvons reproduire faute de place. Nous présentons uniquement les résultats de l'analyse de sensibilité des scénarios n° 1 à 8, qui correspondent à

un faible débit de fuite. Ils sont présentés sous forme d'histogrammes dans la *Figure 3*. Pour les six sorties du modèle considérées, chaque histogramme représente les indices de 1^{er} ordre (S_i) des paramètres les plus influents (pour lesquels le S_p , pour au moins une sortie, est supérieur à 0,1). L'indice d'un paramètre pour une sortie donnée représente la proportion de sa contribution à la variance totale de la sortie, lorsque tous les paramètres varient. Les valeurs moyennes des sorties sont reportées dans le *Tableau 3*.

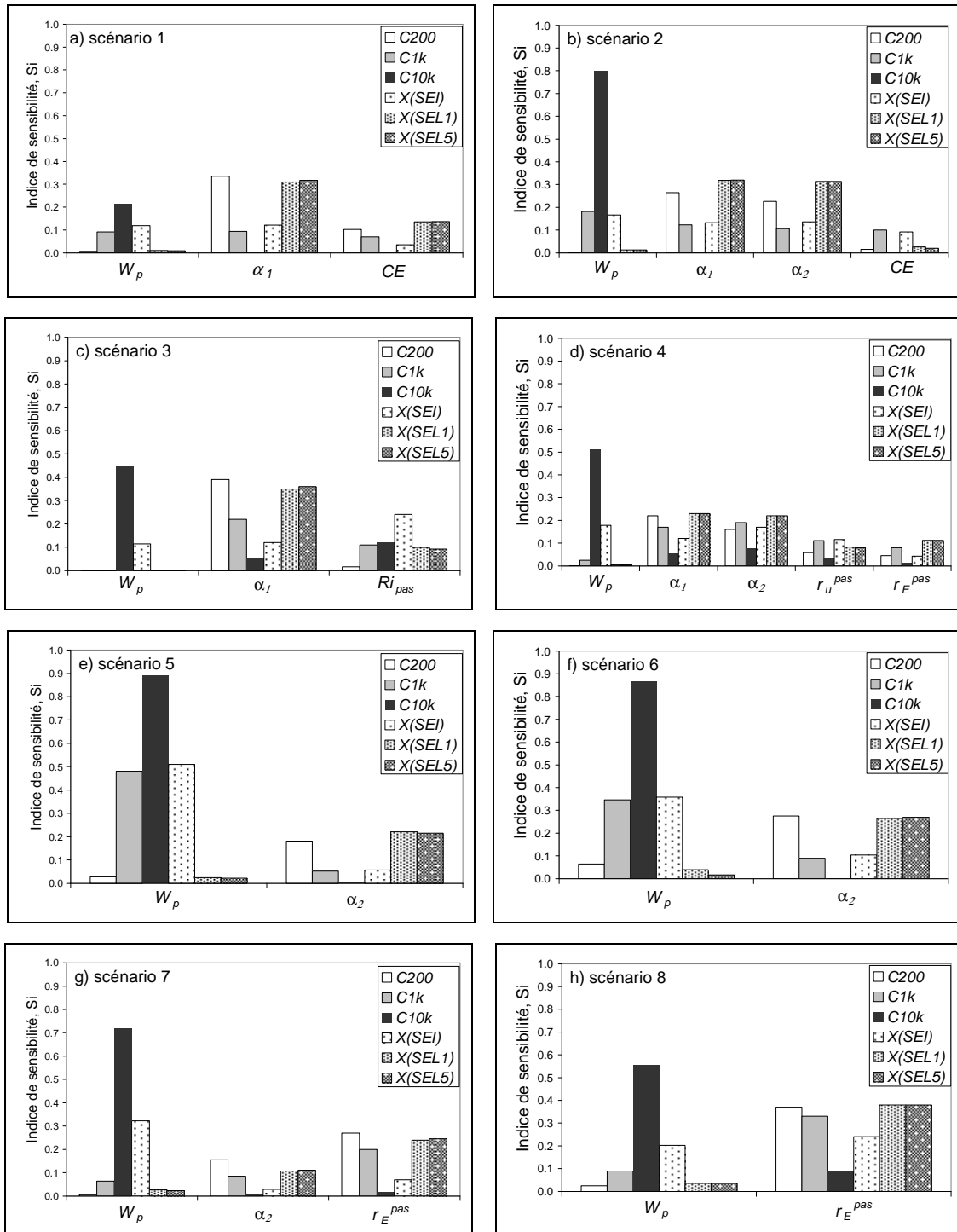


Figure 3. Histogrammes des indices de sensibilité

Tableau 3. Valeurs moyennes des sorties pour les scénarios ammoniac n° 1 à 8

Sorties	Sc n° 1	Sc n° 2	Sc n° 3	Sc n° 4	Sc n° 5	Sc n° 6	Sc n° 7	Sc n° 8
C200 (ppm)	6306,5	2826,5	11289,9	4479,0	2956,6	2071,1	7105,4	5135,1
C1k (ppm)	416,5	315,3	2204,1	1290,8	319,7	277,4	1754,1	1361,5
C10k (ppm)	10,4	9,7	113,8	91,8	9,8	9,4	103,3	90,5
X(SEI) (m)	1083,8	915,4	4149,6	3206,1	929,6	835,1	3780,3	3163,9
X(SEL1) (m)	277,2	141,1	634,2	287,9	172,0	34,4	490,0	327,9
X(SEL5) (m)	265,9	126,5	595,3	263,7	161,4	22,8	455,3	302,0

5.2 Discussion et conclusion

Quel que soit le scénario étudié (excepté le scénario 1), l'expression qui représente le profil vertical du vent (W_p) a une influence dans le champ lointain. Ce résultat s'explique par le fait qu'à 10 km du point de rejet, la dispersion est en phase passive, dans laquelle l'entraînement d'air dans le nuage est proportionnel à la vitesse du vent, qui varie en fonction de W_p .

Dans les scénarios 1 et 3 (rejets horizontaux de hauteur $Z_R = 1$ m), la sortie C200 est très influencée par α_1 . Dans le champ proche, la vitesse de rejet est très élevée (144 m/s) par rapport à la vitesse du vent et donc, l'entraînement « jet » est très dominant. Il devient moins important quand la vitesse du nuage diminue au cours de la dispersion, ce qui explique l'influence faible de α_1 sur C1k et nulle sur C10k.

Pour les scénarios 2 et 4 (rejets horizontaux à 20 m), les deux paramètres α_1 et α_2 sont prédominants dans le champ proche. Comme la hauteur du rejet est élevée, le nuage s'effondre au sol dans le champ proche. En effet, le nuage a un comportement de gaz dense à cause de sa température très basse (-33 °C). Ces observations expliquent donc l'importance de α_2 (cf. paragraphe 3.2).

L'effet intrinsèque des conditions météo, représenté par le couple classe de stabilité/vitesse de vent où D/5 est plus favorable à la dilution du nuage avec l'air que F/3, est mis en évidence par la comparaison des scénarios 1 (D/5) et 3 (F/3) d'une part, et des scénarios 2 (D/5) et 4 (F/3) d'autre part. Le Tableau 3 montre que les concentrations (et donc les périmètres de sécurité) sont très largement influencées par les 2 conditions météo étudiées. On note que les paramètres qui déterminent la transition passive, tels que Ri^{pas} , r_u^{pas} ou r_E^{pas} , apparaissent sur la Figure 3 uniquement pour les scénarios avec la condition F/3 pour laquelle la transition passive se fait plus loin de la source que pour les scénarios avec D/5.

Pour les scénarios 1 et 2, les valeurs moyennes des sorties X(SEL1) et X(SEL5) indiquent qu'ils sont situés dans le champ proche. Ceci explique le fait que les influences des paramètres sur ces sorties sont les mêmes que pour la sortie C200. De la même façon, comme X(SEI) est située dans le champ moyen, les influences des paramètres sont les mêmes pour les sorties X(SEI) et C1k.

Pour les rejets verticaux (n° 5 à 7), α_2 est le seul paramètre influent sur la sortie C200. À partir du point de rejet, le nuage commence par s'élever, puis descend vers le sol. L'entraînement « cross-wind » est donc beaucoup plus important que l'entraînement « jet ». Par rapport aux rejets horizontaux, la transition passive se fait beaucoup plus près de la source et donc le paramètre W_p est influent dans le champ moyen ; cela concerne les sorties C1k et X(SEI).

6. Références

- Chan, K., Tarantola, S., Saltelli, A., Sobol', I.M., 2004, Variance-based methods. In: Saltelli A., Chan K., Scott E. M., eds. 2004. *Sensitivity analysis*. New York: Wiley. Ch.8.
- Pandya, N., Marsden, E., Floquet, P., Gabas, N., 2008a, Sensitivity analysis of a model for atmospheric dispersion of toxic gases, *Computer Aided Chemical Engineering*, 25, pp. 1143 - 1148.
- Pandya, N., Marsden, E., Floquet, P., Gabas, N., 2008b, Toxic release dispersion modelling with PHAST: parametric sensitivity analysis, *Chemical Engineering Transactions*, 13, pp. 179-186.
- SimLab (2009), Joint Research Centre, <http://simlab.jrc.ec.europa.eu/>
- Witlox, H. W. M., 2006, UDM Theory Document, DNV Software, Londres, UK, Janvier 2006.