Modélisation numérique de la réaction au feu des matériaux solides
Application aux études d'ingénierie de sécurité incendie

Mohameth DIA[1], Thomas ROGAUME[1], Benjamin BATIOT[1], Virginie DREAN[2], Eric GUILLAUME[2]

[1] Institut Pprime, UPR 3346 CNRS, Université de Poitiers, ENSMA
[2] Efectis, France

PLAN DE PRÉSENTATION

1. Contexte de l’étude
2. Méthodologie de recherche : approche multi-échelle
3. Résultats et discussions
4. Travaux futurs et perspectives

CONTEXTE & OBJECTIFS

LabCom PERF - ISI

Compétences et expertises de l'équipe Combustion Hétérogène

Compétences et expertises pour les essais à grande échelle

- ❑ Amélioration des modèles numériques pour décrire la réaction au feu.
- ❑ Quantification des émissions gazeuses lors des incendies (industriels).
- ❑ Meilleure description numérique de la formation des espèces gazeuses.

Attentes de la thèse

- ❑ Amélioration de la description de la décomposition thermique et de l'inflammation des matériaux solides ⇨ Mieux prédire la réaction au feu.
- ❑ Développer un protocole expérimental de quantification des émissions gazeuses avant et après combustion ⇨ Données pour les modèles.
- ❑ Développer un modèle de combustion **à chimie non infiniment rapide** dans le code **FDS** pour une **prédiction plus fiable des émissions gazeuses**.

Lubrizol, Rouen

MÉTHODOLOGIE DE RECHERCHE

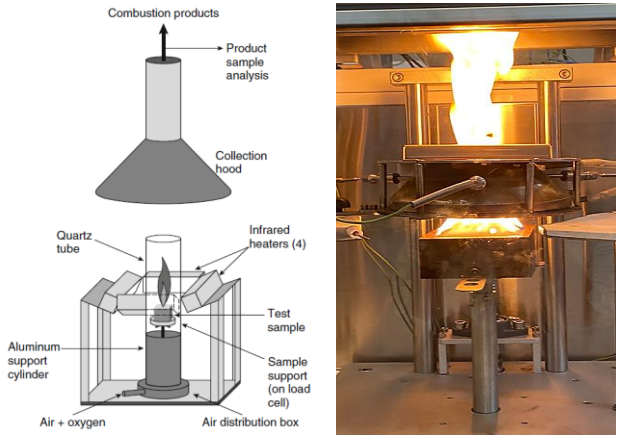
Application approche multi-échelle au PIR

Complexité des phénomènes physico-chimiques
tendance vers les conditions réelles

Echelle intermédiaire
grande échelle
(1D, 2D, 3D)

Panneau radiant / SBI

Petite échelle



Cône calorimètre (CCAC)

- Le polyisocyanurate est naturellement auto-extinguible
- Il présente une structure chimique stable et une bonne résistance au feu.
- Il est très utilisé dans le contexte industriel
- Il contient des espèces azotées

Echelle de la matière

ATG/DSC (0D, qlq mg)

Développement d'un nouveau code de description de la décomposition thermique

MÉTHODOLOGIE DE RECHERCHE

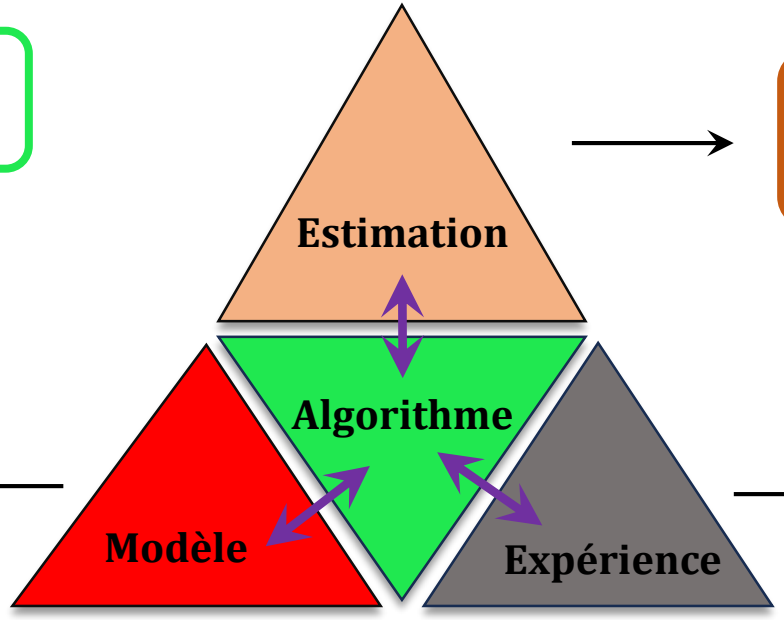
❑ Mécanisme réactionnel (approche dite LPA [1])

Réaction #	Réactifs		Produits condensés	Produits gazeux
1	PIR	→	$Nu_1\ PIR_{int_1}$	$+(1-Nu_1)\times \mathrm{Gas}_1$
i = 1 … 6	PIR_{int_i}	→	$Nu_{i+1}\ PIR_{int_{i+1}}$	$+(1-Nu_{i+1})\times \mathrm{Gas}_{i+1}$

❑ Méthodologie d'optimisation :

Algorithme d'inversion :
Particule Swarm Optimization

$$\psi = \sum_{i=1}^{N}\left[MLR_{\exp}(t_i) - MLR_{\mathrm{mod}}\left(A, E, n, nu, t\right)\right]^2$$



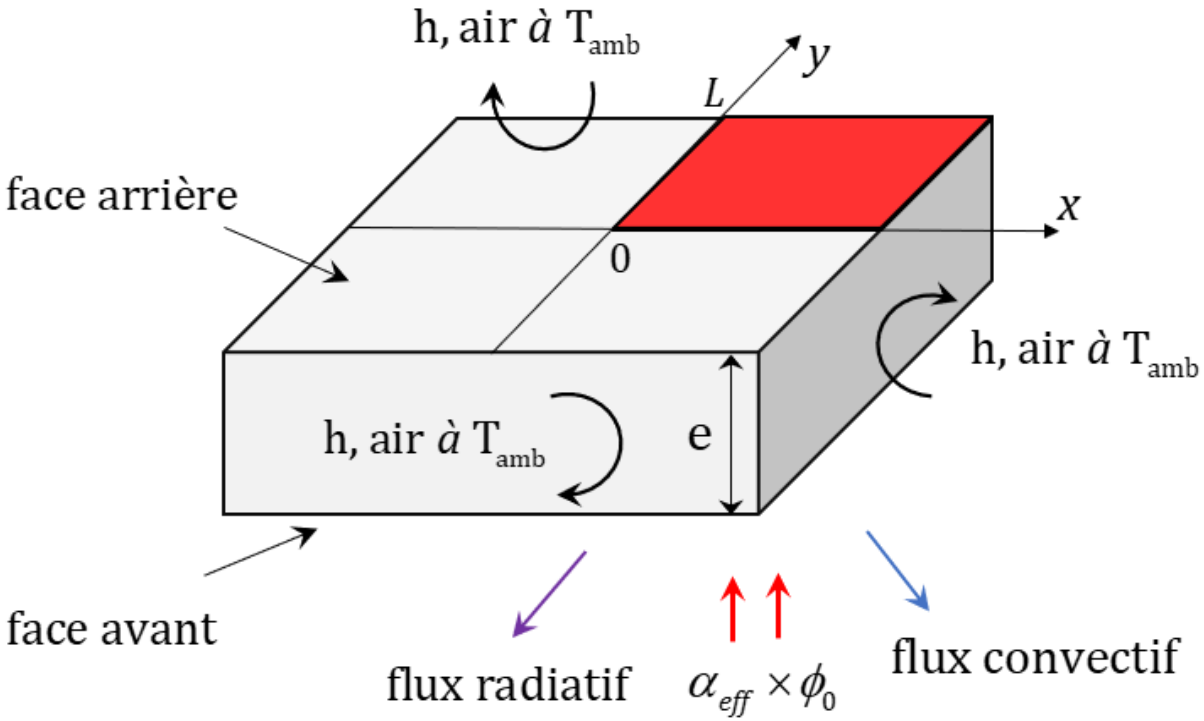
Identification des paramètres cinétiques
A, E, nu, n

Modèle : Loi d'Arrhenius

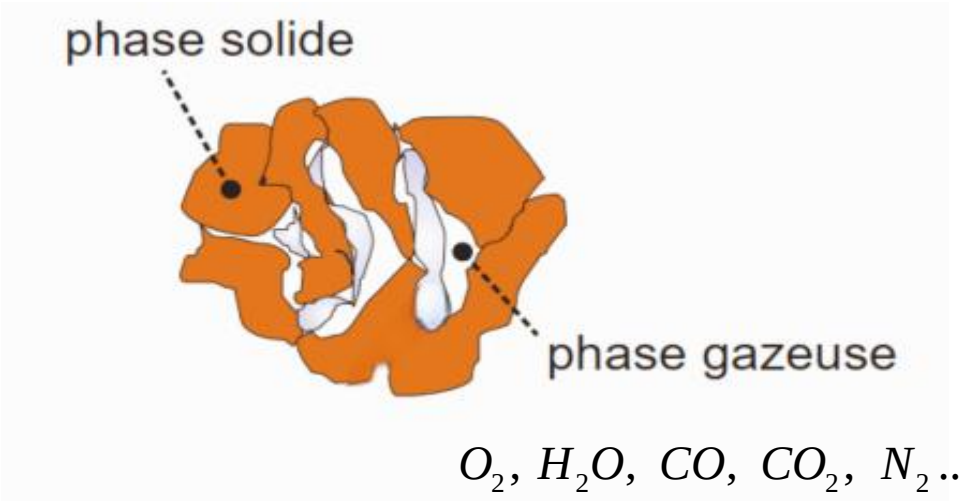
Dispositif expérimental (ATG)

[1] Nunn T.R., Howard M.R. - Products compositions and kinetics in the rapid pyrolysis of sweet gum hardwood, Industrial & Engineering chemistry, Process design and development, pages 836–844, 1985.

Modèle mathématique



Représentation du modèle 3D à l'échelle du cône calorimètre



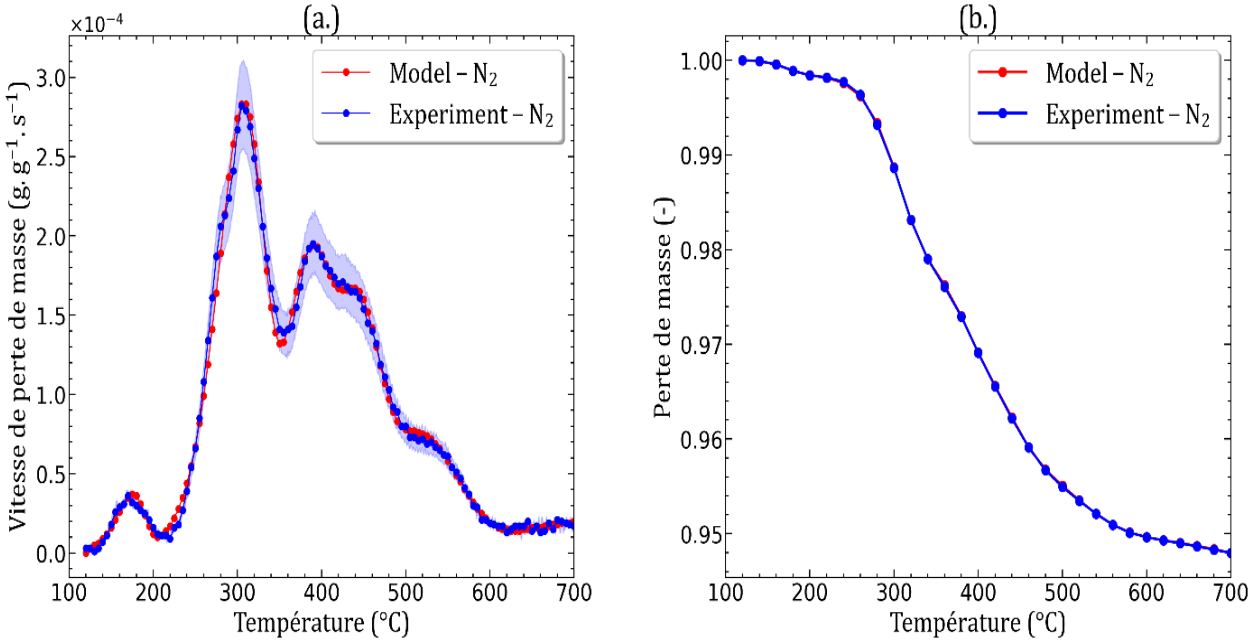
Principales phases du matériau à l'échelle microscopique

❑ Mise en équation

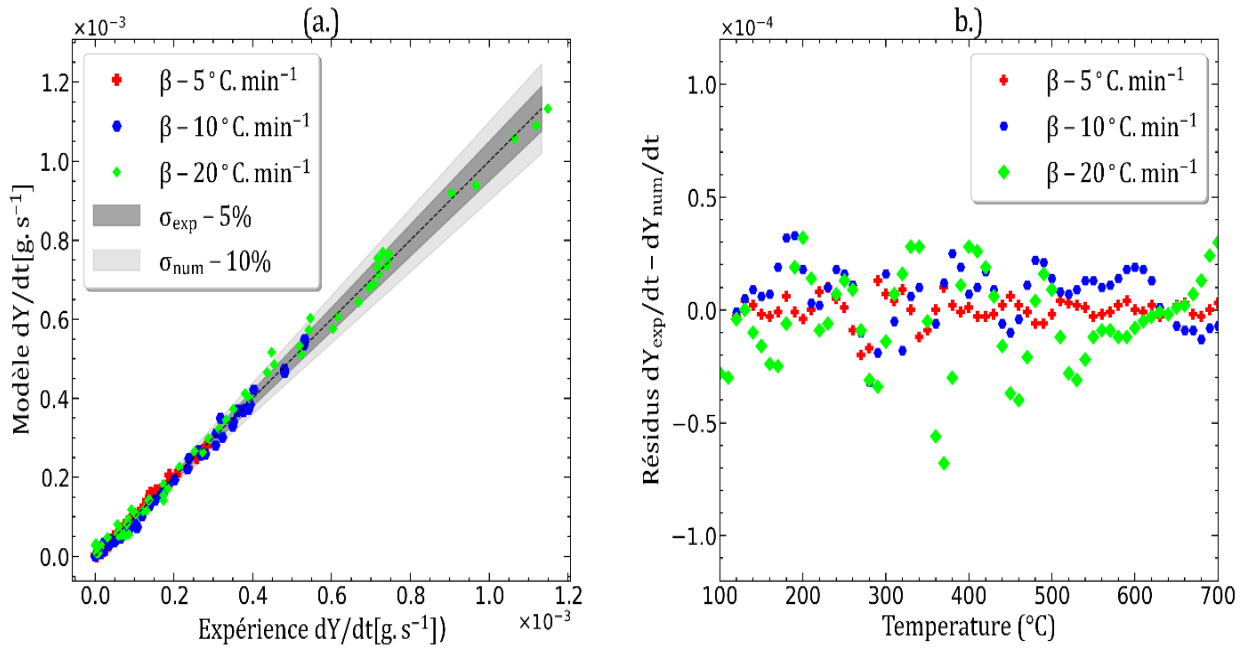
Équation de conservation de la masse	$$\left(\frac{M\Psi}{RT_g}\right)\frac{\partial P}{\partial t}=\frac{K_x}{\nu}\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial P}{\partial x}\right)+\frac{K_y}{\nu}\frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{\partial P}{\partial y}\right)+\frac{K_z}{\nu}\frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{\partial P}{\partial z}\right)+\dot{\omega}'''_{fg} \quad (1)$$
Équation de conservation de la quantité de mouvement (Darcy's law)	$$\dot{m}''_x=-\frac{K_x}{\nu}\frac{\partial P}{\partial x}\ ;\ \dot{m}''_y=-\frac{K_y}{\nu}\frac{\partial P}{\partial y}\ ;\ \dot{m}''_z=-\frac{K_z}{\nu}\frac{\partial P}{\partial z} \quad (2)$$
Équation de conservation des espèces	$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\rho_g\psi Y_j\right)+\vec{\nabla}.\left(\rho_g\dot{m}''Y_j\right)=\vec{\nabla}.\left(\psi\rho_g\frac{D}{\eta}\vec{\nabla}Y_j\right)+\left(\dot{\omega}'''_{fj}-\dot{\omega}'''_{dj}\right) \quad (3)$$
Équation de conservation de l'énergie	$$\left(\rho C_P\right)_S\frac{\partial T}{\partial t}+\vec{\nabla}.\left[\left(\rho C_P\right)_g\dot{m}''T\right]=\vec{\nabla}.\left(\lambda_{eff}\vec{\nabla}T\right)+\sum_{i=1}^{N_R}\omega_i\Delta H_i^o+\nabla q_{rad} \quad (4)$$

Validation du code de calcul
Application à la mousse PIR

❑ Résultats à l'échelle de l'ATG - Pertes de masse et les vitesses de perte de masse



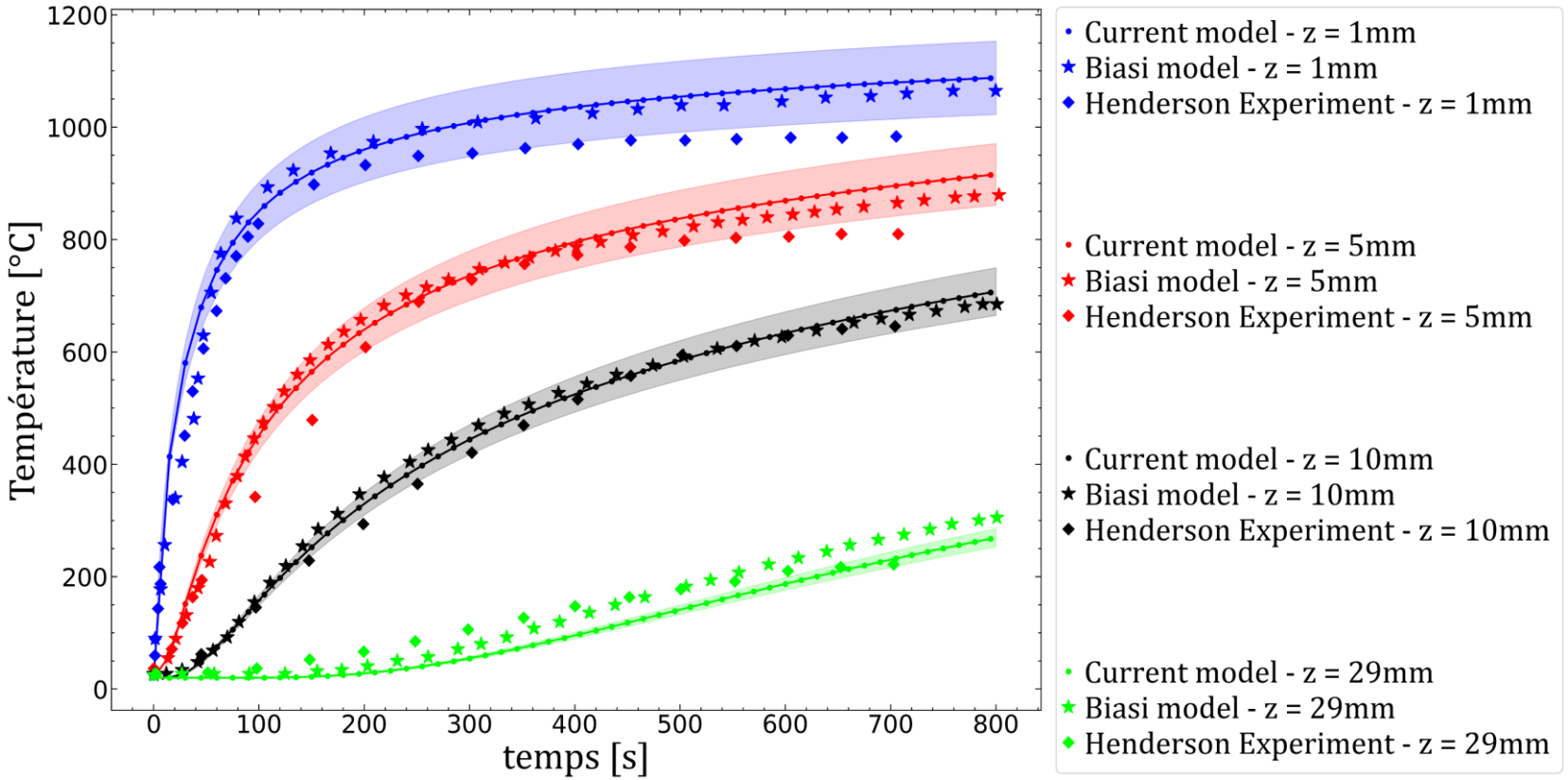
*Résultats expérimentaux et prévisions du modèle pour les essais d'analyse thermogravimétrique (ATG) réalisés sur la mousse PIR à **5 °Cmin^{-1}** sous azote (N_2). (a) Taux de perte de masse, (b) fraction de masse.*



*Calcul des résidus d'estimations **a.)** Représentation graphique de la prédiction du modèle et des mesures expérimentales du taux de perte de masse pour différentes vitesses de chauffage et sous azote (N_2). **b.)** résidus d'estimation entre le modèle numérique et expérimental*

❑ Les résidus sont centrés et tournent autour de 0, ce qui indique que le modèle est valide.

❑ Comparaison avec des données de la littérature – Echelle du cône calorimètre



Evolution de la température à différente profondeur du matériau à $\boldsymbol{280 kW/m^2}$

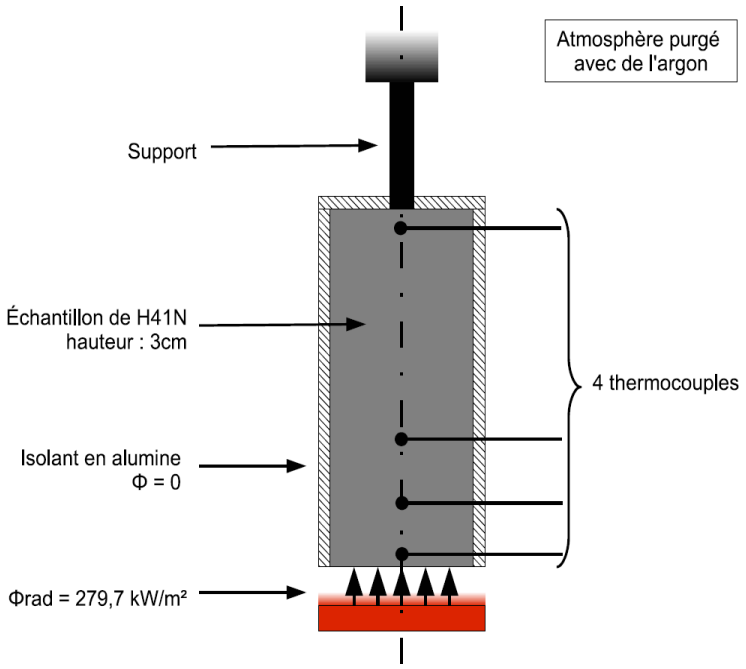
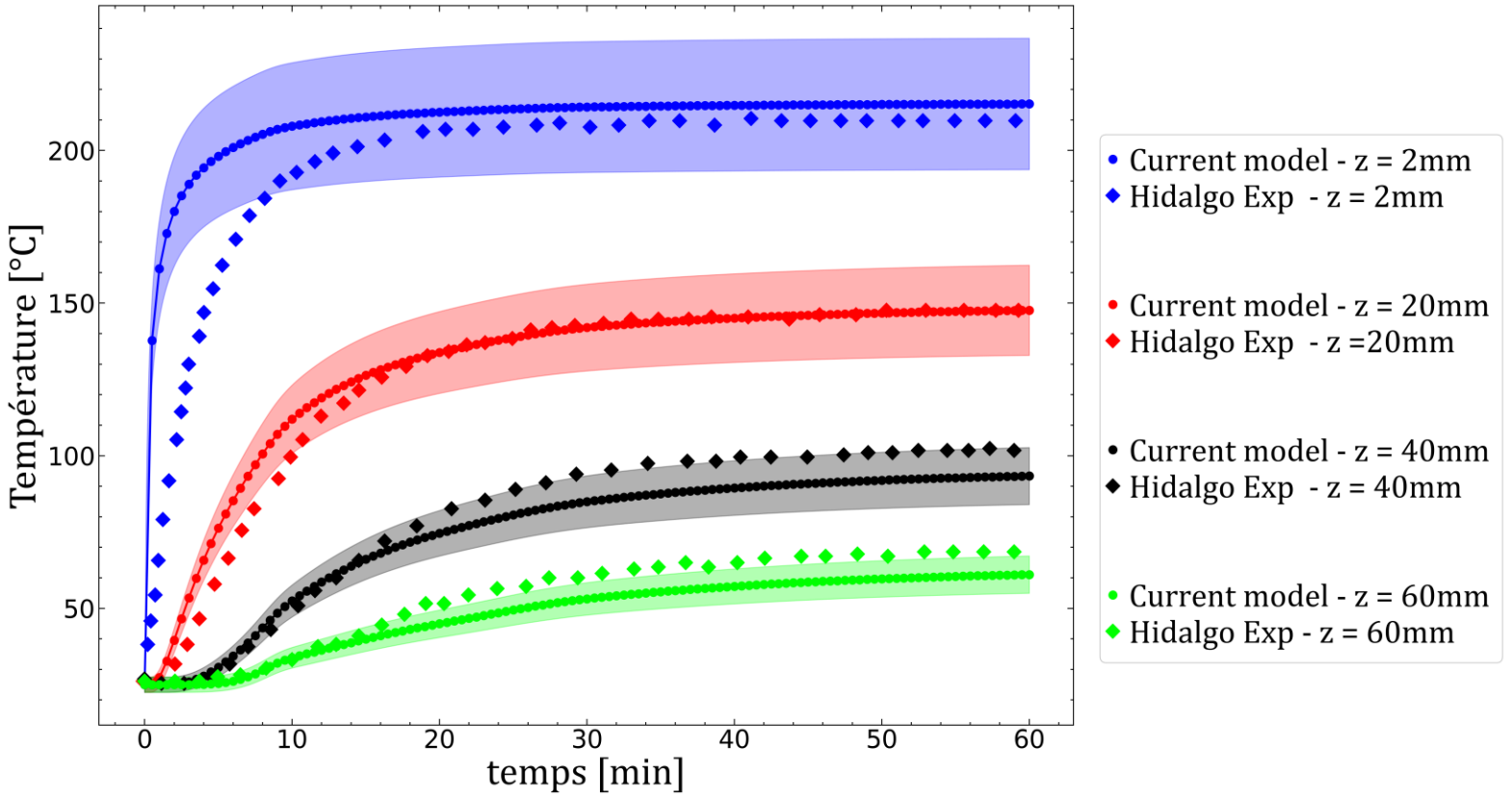


Schéma de l'expérience de Henderson [3]

❑ Le modèle représente bien le modèle de **V. Biasi** ainsi que les expériences de **Henderson**.

[3] Biasi, V., Leplat, G., Feyel, F., & Beauchêne, P. (2014). Heat and mass transfers within decomposing carbon fibers/epoxy resin composite materials. In *11th AIAA/ASME Joint Thermophysics and Heat Transfer Conference* (p. 2678).

❑ Comparaison avec des données de la littérature – Echelle du cône calorimètre



Evolution de la température à différente profondeur du matériau à $\boldsymbol{5kW/m^2}$

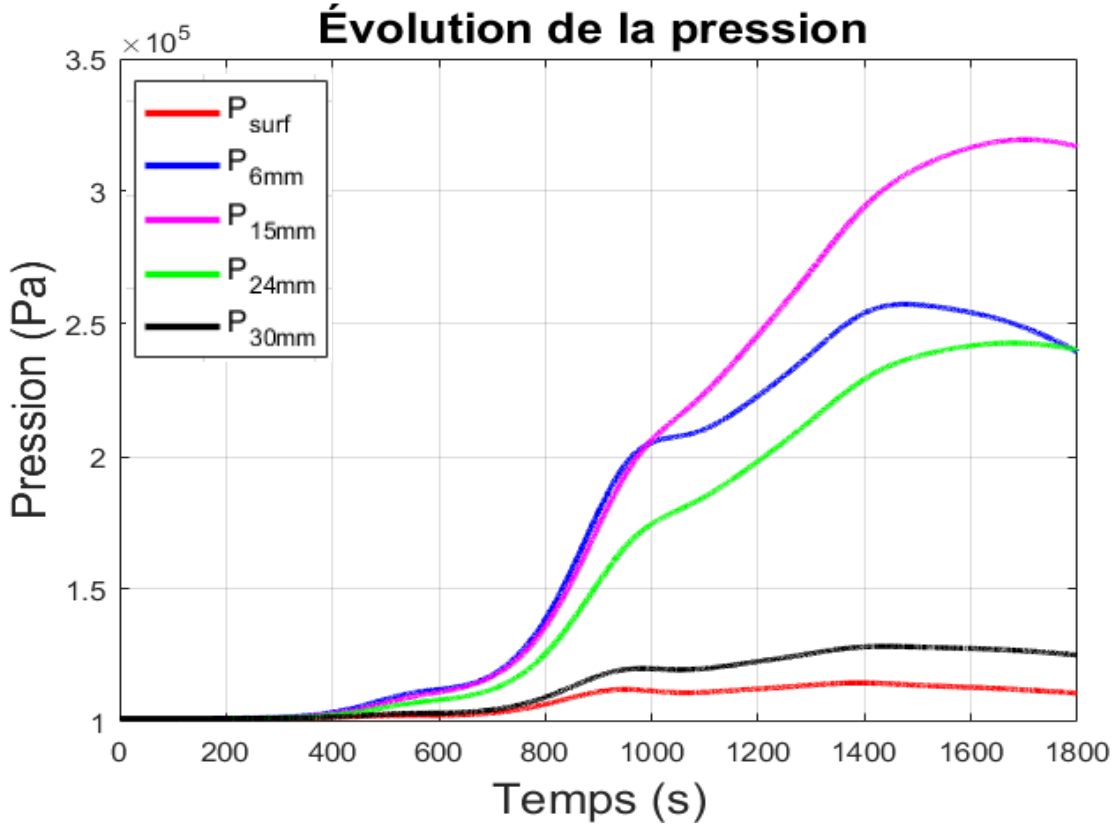
Schéma de l'expérience de J. Hidalgo [4]

❑ Le modèle représente bien les expériences de **J. Hidalgo**.

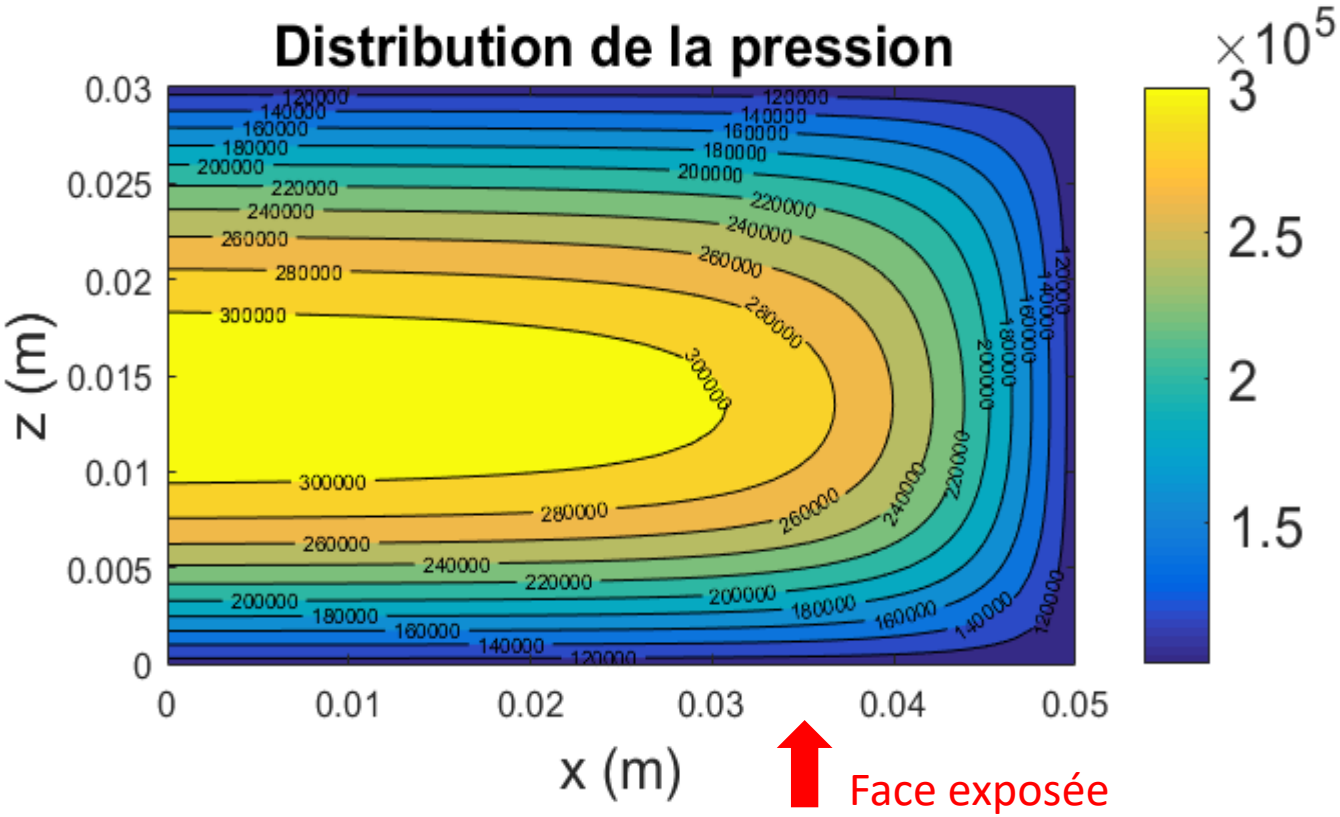
[4] Hidalgo-Medina, J. P. (2015). Performance-based methodology for the fire safe design of insulation materials in energy efficient buildings.

❑ Résultats à l'échelle du Cône Calorimètre

❑ Résultats sur la distribution de la température



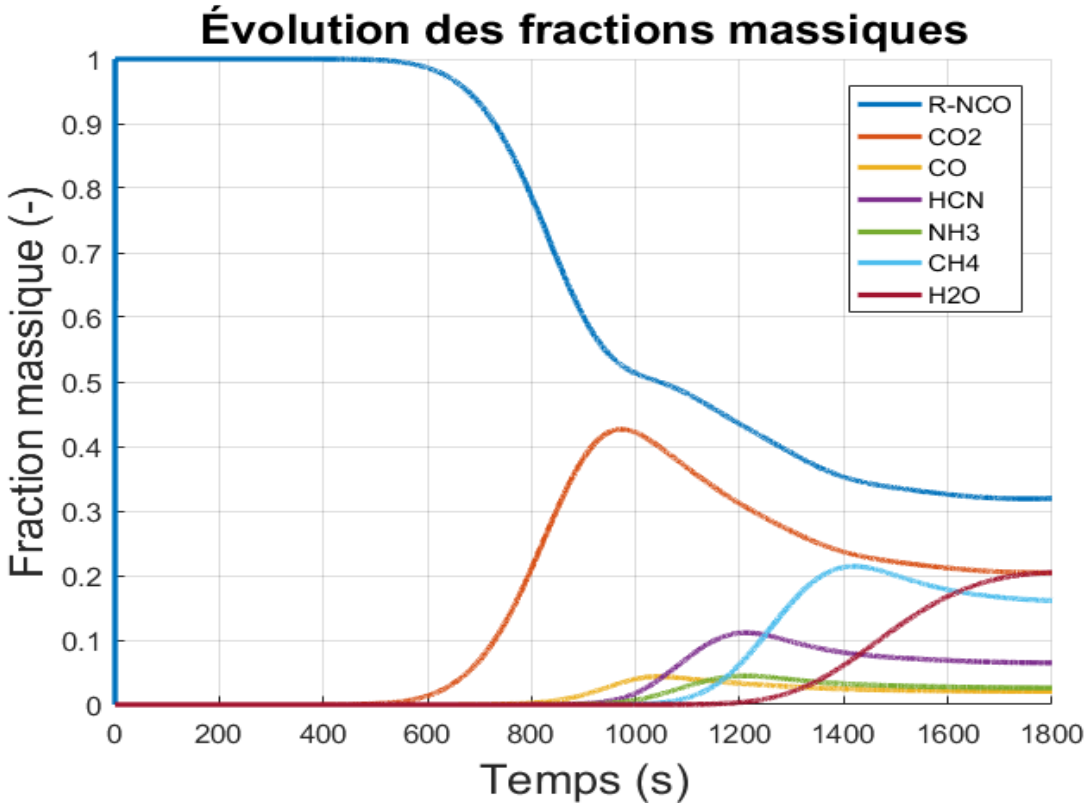
Evolution des pressions à différentes profondeurs *à* $\boldsymbol{50kW/m^2}$



Distribution de la pression sur l'ensemble du matériau

❑ Résultats à l'échelle du Cône Calorimètre

❑ Résultats sur les fractions massiques des produits gazeux (-)



Evolution des fractions massiques des différents produits gazeux à $\boldsymbol{50 kW/m^2}$.

Expression	Gas Species
+(1 - Y_{R,1}) ×	Phosphate + phthalate + Alcohol + CO_2
+(1 - Y_{R,2}) ×	Phthalate + Alcohol + $\mathbf{CO_2}$ + H_2O + Isocyanate + aromatic
+(1 - Y_{R,3}) ×	Alcohol + CO_2 + $\mathbf{H_2O}$ + CH_4 + Isocyanate + aromatic
+(1 - Y_{R,4}) ×	Phosphate + Alcohol + CO_2 + H_2O + $\mathbf{CH_4}$ + aromatic
+(1 - Y_{R,5}) ×	Alcohol + CO_2 + CH_4 + aromatic
+(1 - Y_{R,6}) ×	CH_4 + $\mathbf{NH_3}$ + **Isocyanic acid** + aromatic
+(1 - Y_{R,7}) ×	NI (non identifié)

Produits gazeux susceptible d'être émis lors de la décomposition thermique du PIR [2]

[2] Marquis, D. M., Batiot, B., Guillaume, E., & Rogaume, T. (2016). Influence of reaction mechanism accuracy on the chemical reactivity prediction of complex charring material in fire condition. *Journal of analytical and applied pyrolysis*, *118*, 231-248.

❑ Avancement scientifique – Travail en cours et à venir.

❑ A l'échelle de l'ATG

- Réduire le nombre de réactions afin de diminuer le temps de calcul.
- Identifier les différents composants (solides + gazeux) des différents réactions.
- Réduire les vitesses de chauffages afin de vérifier la non perte d'information.

❑ A l'échelle du cône calorimètre

- Effectuer une étude de sensibilité afin de ne garder que les phénomènes physico-chimiques pertinents.
- Valider le protocole expérimental de détermination des émissions gazeuses et réalisation des tests préliminaires.
- Essais en cône calorimètre et en panneau radiant pour caractériser les processus de décomposition thermique, d'inflammation et de propagation de flamme des solides à échelle croissante.
- Améliorer la capacité et la précision des modèles numériques à décrire les émissions gazeuses. Approche par **chimie non infiniment rapide**.

Merci de votre attention !