

Modélisation de la dégradation thermique d'un contre plaqué en bois à l'aide du code GPyro

FATEH Talal

GDR incendie
Marseille - 2011

Plan de la presentation

- Introduction
- Présentation du code Gpyro
- Présentation des 3 modèles de pyrolyse étudiés :
 - *Modèle standard de Gpyro*
 - *Modèle développé en ATG*
 - *Modèle optimisé à partir du Cône calorimètre*
- Comparaison des résultats
- Discussion et Questions.

Contexte de mon Doctorat

Objectifs du travail :

- Développer des modèles de pyrolyse pertinents et performants (multi-étapes, cinétiques...).
- Décrire la décomposition thermique de divers solides.
- S'appliquant quelles que soient les configurations de feu :
 - En utilisant une démarche multi-échelles.
 - En considérant les évolutions physiques et chimiques de la décomposition.
 - En tenant compte des propriétés thermiques des combustibles.

Matériaux étudiés : **contre-plaqués** en bois.

Contexte

GPYRO

*Présentation
des modèles*

*Comparaison
des résultats*

Bilan

Perspectives

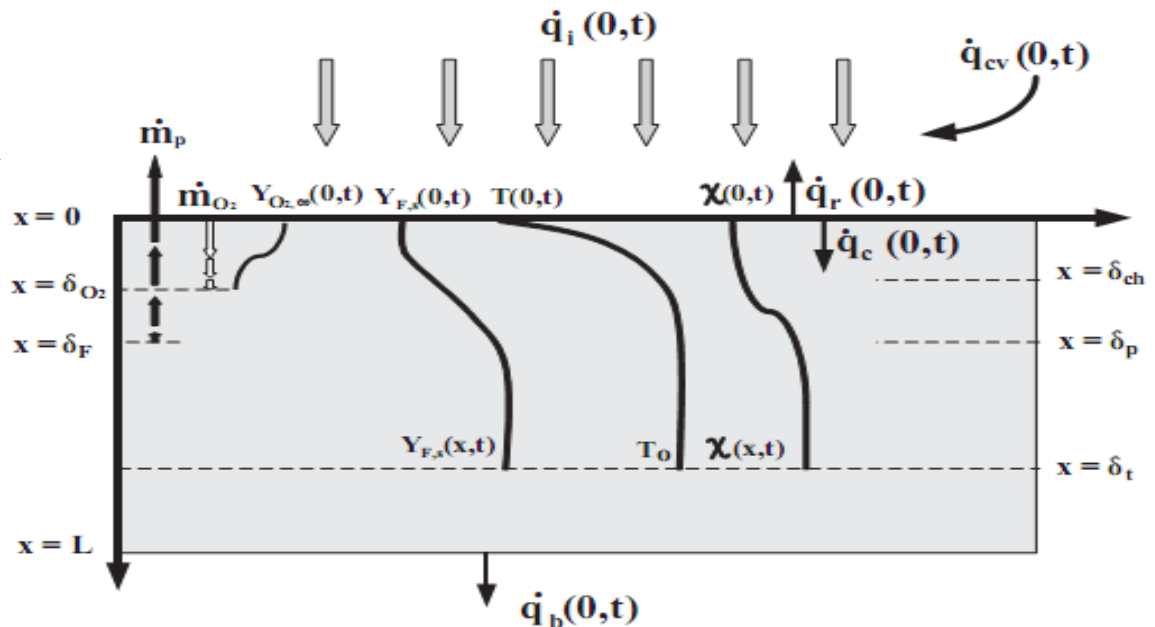
Démarche de travail

<i>Multi-échelles</i>	<i>Caractérisation physico-chimique</i>
<p><i>Contexte</i></p> <p><i>GPYRO</i></p> <p><i>Présentation des modèles</i></p> <p><i>Comparaison des résultats</i></p>	<p>Caractérisation physique-thermique-chimique de la dégradation thermique : DSC, ATG – IRTF et ATG-GCMS</p> <p style="text-align: center;">↓</p> <p>Proposition d'un mécanisme cinétique de dégradation</p> <p style="text-align: center;">↓</p> <p>Calcul des cstes cinétiques de chaque réaction : modèle des algorithmes génétiques</p>
<p><i>Bilan</i></p> <p><i>Perspectives</i></p>	<p>Vérification et validation du mécanisme cinétique et des cstes cinétiques par simulation des essais :</p> <ul style="list-style-type: none"> - Essais en cône calorimètre-IRTF + GCMS - Simulations : Firefoam, Gpyro0.7, Nvelle approche
<p>Echelle produit</p>	<p>Vérification et validation du mécanisme réactionnel et des cstes cinétiques : essais SBI, LIFT et simulations numériques</p>

Contexte de la Thèse

Rappel de la problématique :

Flux de chaleur reçu
 ↓
 Gradient de température
 ↓
 Gradient des fractions massiques provenant de la dévolatilisation
 ↓
 Diffusion possible de l'oxygène
 ↓
 Tout dépend de la perméabilité du combustible



Processus simplifié (1D) de dégradation d'un combustible solide .

- Contexte
- GPYRO
- Présentation des modèles
- Comparaison des résultats
- Bilan
- Perspectives

Présentation du code GPYRO

- Code développé par **LAUTENBERGER & al.** dans un objectif de proposer un modèle de pyrolyse global (version 0.7).(deux partis :gpyro_Propest et gpyro).
- Le code résout :
 - L'équation de conservation de la masse .
 - L'équation de conservation de l'énergie.
 - *Gaseous Momentum* dans le solide pour calculer T et les fractions massiques.
- Caractéristiques du code :
 - Possibilité d'estimer les paramètres de la cinétique de dégradation et les propriétés thermiques des phases condensées.
 - Facilité d'utilisation (interface Excel).

Contexte

GPYRO

Présentation
des modèles

Comparaison
des résultats

Bilan

Perspectives

Présentation du code GPYRO

- $K(T) = K_0 (T/T_r)^{nk}$
- $C(T) = C_0 (T/T_r)^{nC}$
- Equations d'arrhenius en Phase condensée:
 $k = A \cdot \exp(-E_A/RT) \cdot Y_{O_2} \cdot (m_{(t)}/m_0)^n$
- OD:ATG , 1D: cône , 2D: couplage gpyro/FDS
- traitement de La flamme est radiative (en cas de cône il faut précise le temps d'inflammation)
- (60 cpu parallèle) .

Gpyro : 15 onglets (interface Excel)

- **General**: définir les modèles de calcul -initiale température, pression , temps –autre option (2D-gpyro/FDS).
- **OUTPUT**: les résultats voulus (ex: température) .
- **SPROPS** : caractériser tous les matériaux (paramètres physiques k, c, ρ, ξ) (n_k-n_p et n_c l'évolution des caractéristiques thermiques des matériaux en fonction de la température) .
- **RXNS**: définir les réactions (paramètres cinétiques).

Gpyro : 15 onglets (interface Excel)

- **Gprops**: définir les espèces gazeuses(entrées ou produits) .
- **GYILEDS** : fraction massique.
- **HGRXNS**: les réactions en phase gazeuse .
- **HGYILEDS**: fraction massique.
- **LAYERS**: définir différentes couches au sein du matériaux.
- **BCPATCH**: définir les conditions limites.
- **GA_GENINPUT GA_VARS** : Algorithmes génétiques
- **01** :Résultats expérimentaux

Paramètres d'initialisation de GPyro

L'utilisateur fournit les résultats expérimentaux suivants :

- Résultats du cône : MLR/ temps
- Température de surface de l'échantillon

Le code calcule par une méthode d'Optimisation (A.G.) :

- Pour chaque réaction : ΔH_{vol} , $Z(A)$, E , n , n_{O_2} .
- Pour chaque phase intermédiaire : n_k , ρ_0 , C_0 , n_c , ξ , γ .

Contexte

GPYRO

Présentation
des modèles

Comparaison
des résultats

Bilan

Perspectives

Modèles de pyrolyse étudiés

Trois modèles différents :

1. Modèle existant dans le code Gpyro.
2. Modèle développé, optimisé et validé à partir des résultats ATG.
3. Mécanisme développé à partir des résultats ATG, mais avec optimisation des paramètres de la cinétique et des propriétés physiques et thermiques à l'échelle du cône.

Contexte

GPYRO

*Présentation
des modèles*

*Comparaison
des résultats*

Bilan

Perspectives

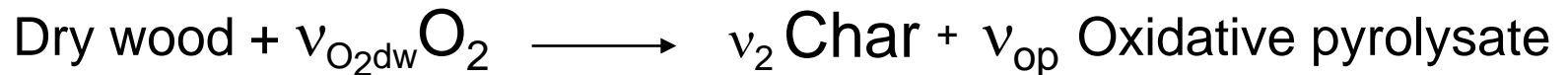
Modèle 1 : standard du code GPYRO

Comprend 3 réactions :

1 sous azote



2 sous air



Contexte

GPYRO

Présentation
des modèles

Comparaison
des résultats

Bilan

Perspectives

Modèle 2 : Mécanisme validé et calcul des cstes en ATG

5 réactions :

3 sous azote



2 sous air



Contexte

GPYRO

Présentation
des modèles

Comparaison
des résultats

Bilan

Perspectives

Modèle 3 : mécanisme ATG avec optimisation des paramètres à l'échelle du cône

Contexte

GPYRO

Présentation
des modèles

Comparaison
des résultats

Bilan

Perspectives

Sous azote

Plywood \longrightarrow v_1 α Plywood + $(1 - v_1)$ gas

α Plywood \longrightarrow v_2 β plywood + $(1 - v_2)$ gas

β plywood \longrightarrow v_3 σ plywood + $(1 - v_3)$ gas

Sous air

σ plywood \longrightarrow v_4 θ plywood + $(1 - v_4)$ gas

θ plywood \longrightarrow v_5 Résidu + $(1 - v_5)$ gas

Initialisation de chaque modèle

Résultats expérimentaux considérés :

- Résultats du cône à 20 et à 30 kW/m²
- Mesure de la Température en 2 points : un en surface et un à 1cm d'épaisseur

Paramètres optimisés :

- Cinétiques - 5 paramètres pour chaque réaction : ΔH_{vol} , $Z(A)$, E , n , n_{O_2} .
Soit :
 - 15 paramètres pour le modèle 1
 - 7 paramètres pour le modèle 2
 - 25 paramètres pour le modèle 3
- Pour chaque phase condensée considérée - 8 paramètres pour chacune des phases : K , n_c , n_k , ρ_0 , C_0 , n_c , ξ , γ . Soit :
 - 24 paramètres pour le modèle 1
 - 48 paramètres pour le modèle 2
 - 48 paramètres pour le modèle 3

Contexte

GPYRO

Présentation
des modèles

Comparaison
des résultats

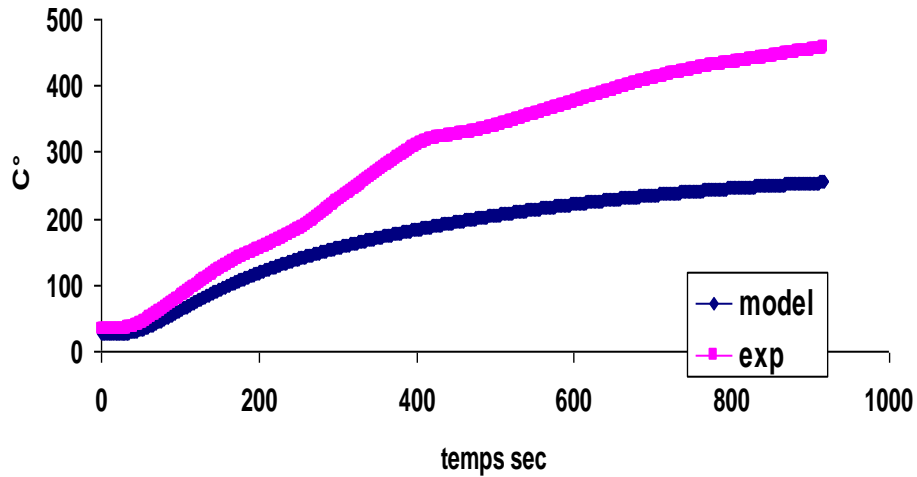
Bilan

Perspectives

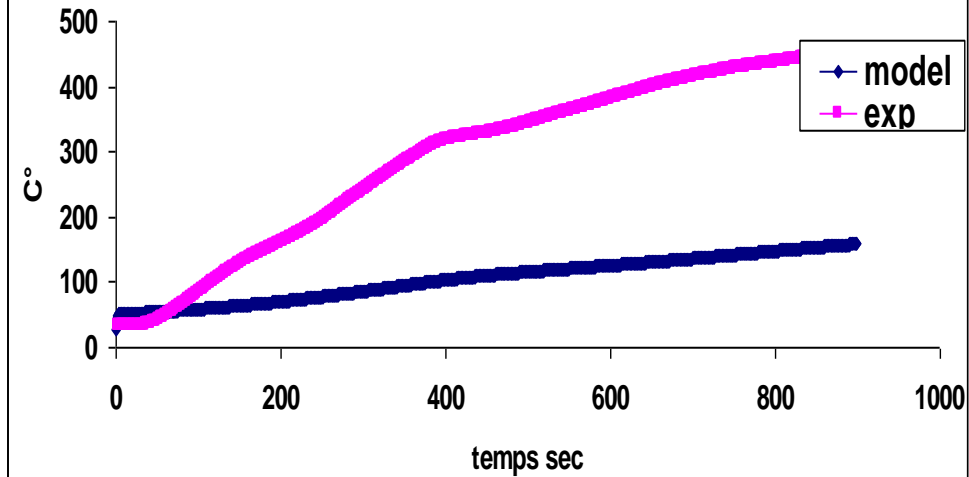
Comparaison des températures à 1cm d'épaisseur Talal FATEH

20 kw/m²

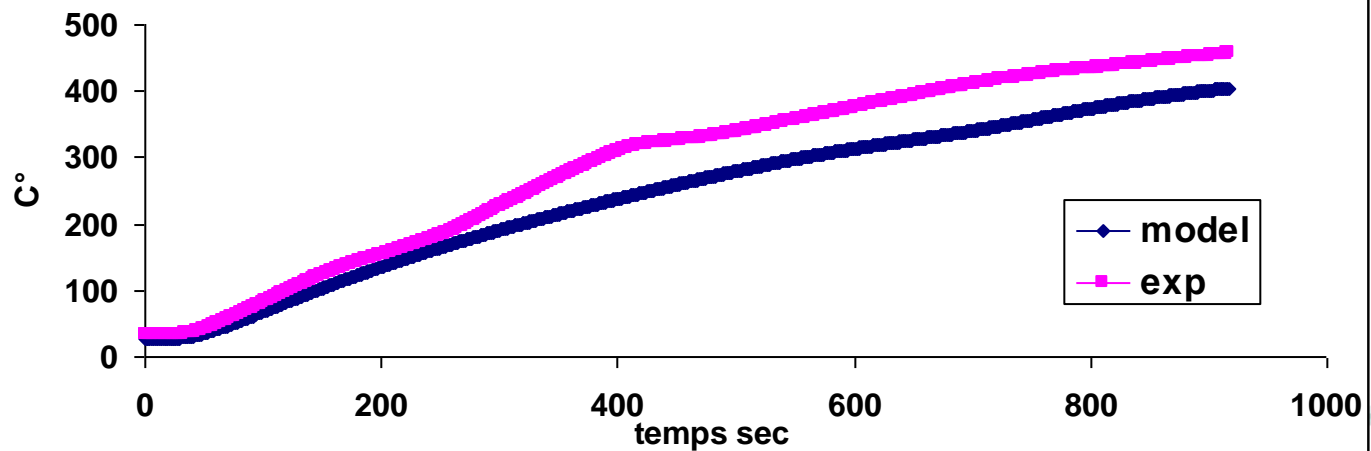
Modèle 1



Modèle 3

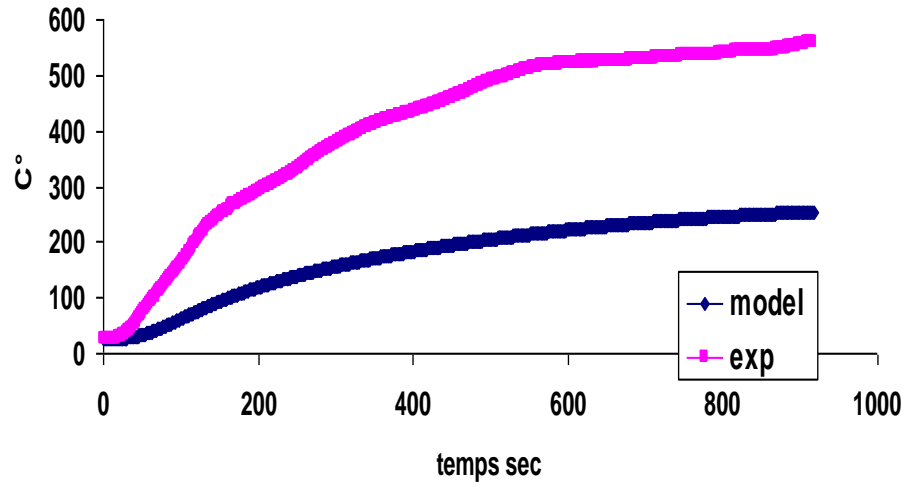


Modèle 2

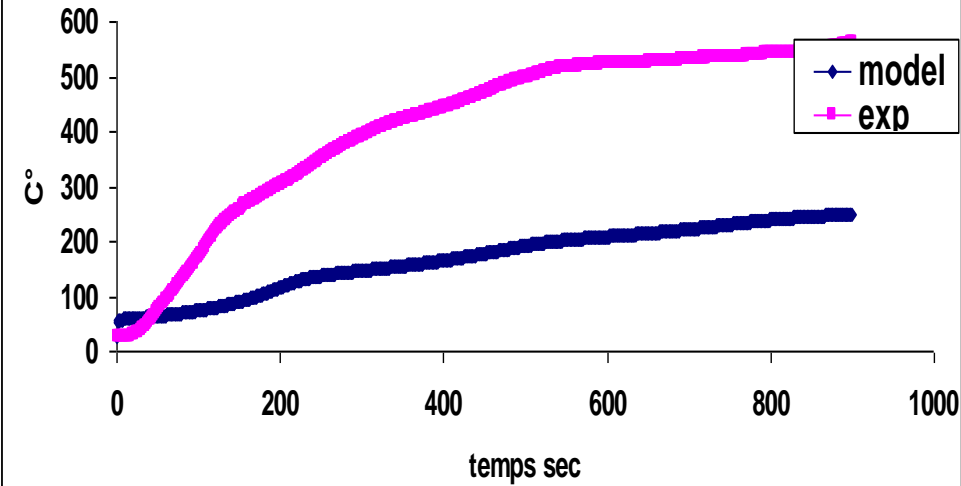


30 kw/m²

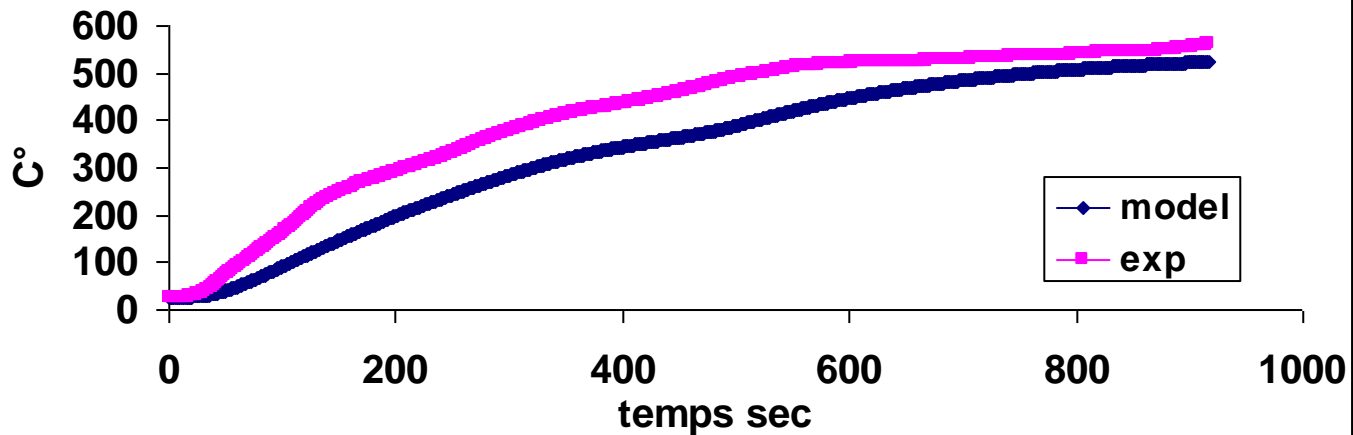
Modèle 1



Modèle 3

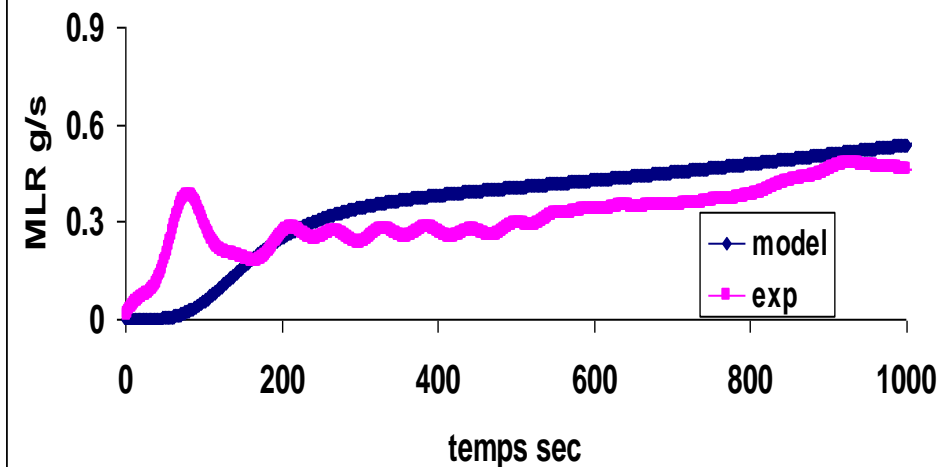


Modèle 2

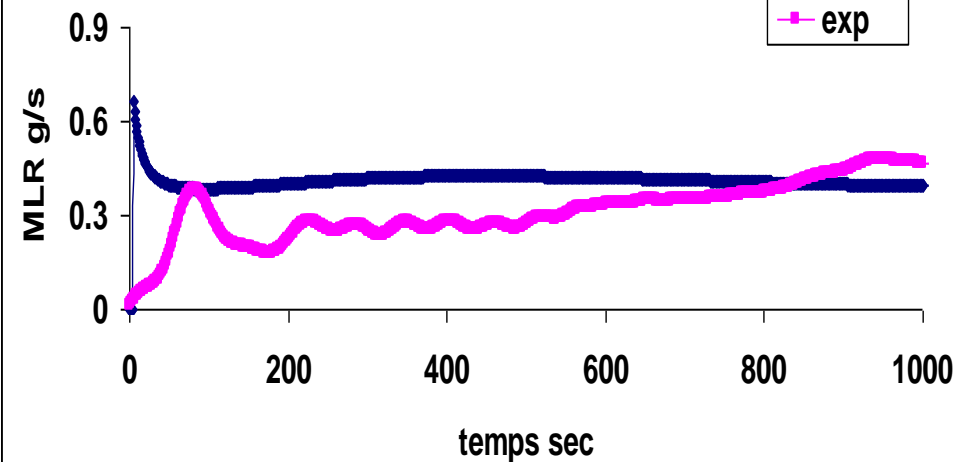


Comparaison des MLR 20 kw/m²

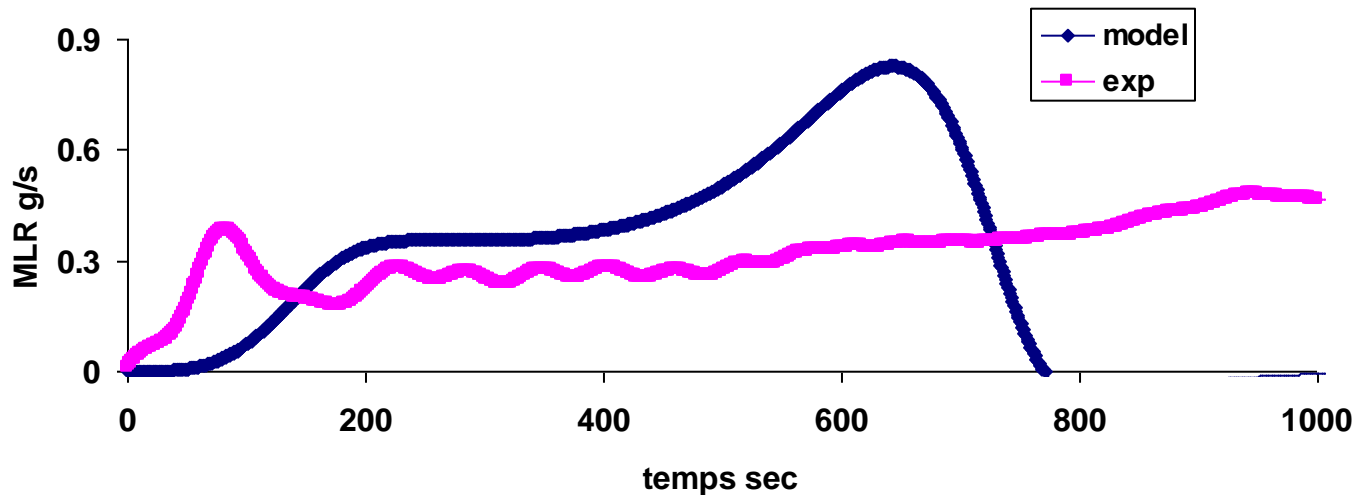
Modèle 1



Modèle 3



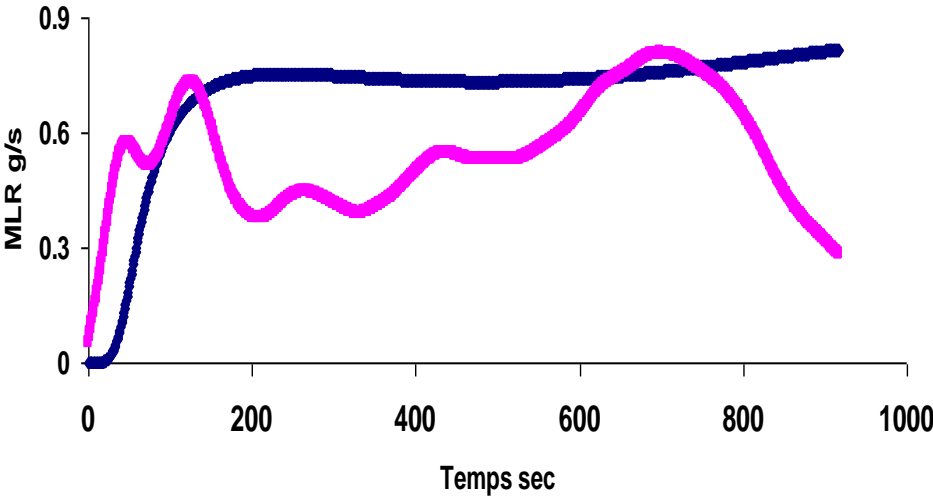
Modèle 2



Comparaison des MLR 30 kw/m²

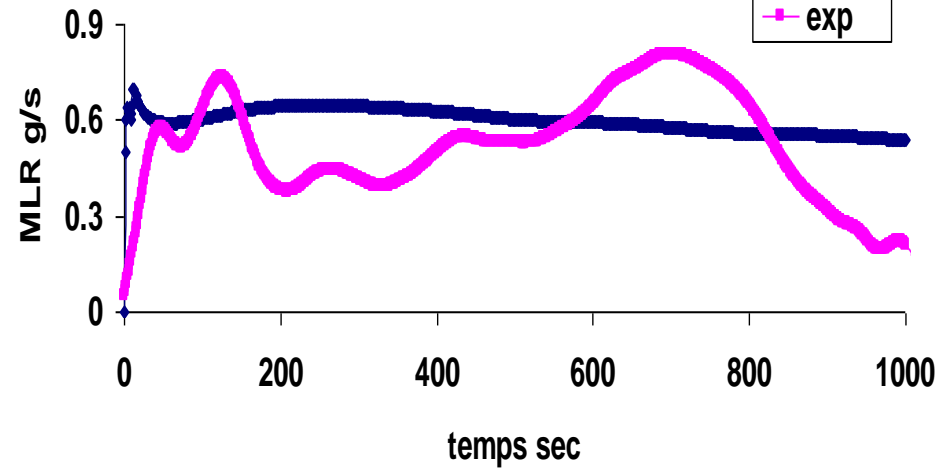
Modèle 1

◆ model
■ exp



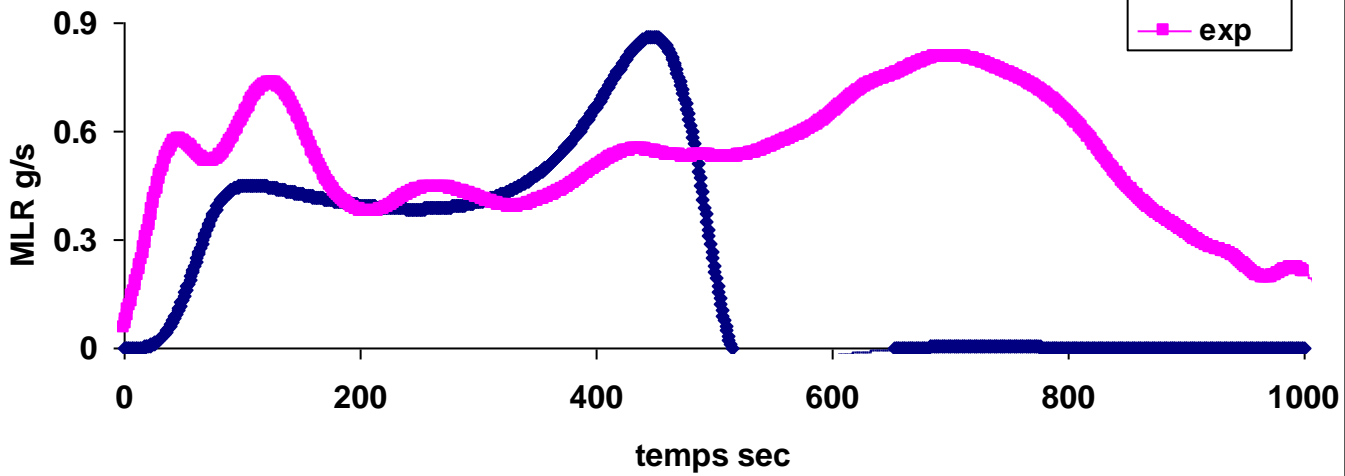
Modèle 3

◆ model
■ exp



Modèle 2

◆ model
■ exp



CONCLUSION

- Trois modèles différents ont été étudiés à l'aide du code Gpyro.
- Le modèle 2 (ATG) permet la meilleure description de la température.
- Les 3 modèles représentent mal la MLR expérimentale : nous observons1 décalage entre les courbes en début et en fin de dégradation.
- Toutefois l'optimisation des paramètres est encore en cours de développement : un meilleur accord peut être trouvé...
- Un problème notable avec Gpyro est le nombre de paramètres optimisés :
 - Solution semble fittée ?
 - Sens physique des valeurs obtenues ?
 - Solution valable à une seule échelle et pour les conditions particulières

Contexte

GPYRO

Présentation
des modèles

Comparaison
des résultats

Bilan

Perspectives

	Multi-échelles	Caractérisation physico-chimique
<i>Contexte</i>		
<i>GPYRO</i>		
<i>Présentation des modèles</i>	Echelle matière	Caractérisation physique-thermique-chimique de la dégradation thermique : DSC, ATG – IRTF et ATG-GCMS ↓ Proposition d'un mécanisme cinétique de dégradation ↓ Calcul des cstes cinétiques de chaque réaction : modèle des algorithmes génétiques
<i>Comparaison des résultats</i>	On connaît bien	
<i>Bilan</i>	Petite échelle	Vérification et validation du mécanisme cinétique et des cstes cinétiques par simulation des essais : - Essais en cône calorimètre-IRTF + GCMS - Simulations : Firefoam, Gpyro, Nvelle approche
<i>Perspectives</i>	solution	
	Echelle produit	Vérification et validation du mécanisme réactionnel et des cstes cinétiques : essais SBI, LIFT et simulations numériques

MERCI