Analyse de sensibilité du modèle de dégradation thermique des solides

Benjamin BATIOT
Anthony COLLIN
Franck RICHARD
Jocelyn LUCHE
Thomas ROGAUME

Benjamin.batiot@ensma.fr
Institut P' • UPR CNRS 3346
ENSMA • Téléport 2
Avenue Clément ADER• BP 40109
F86961 FUTUROSCOPE CHASSENEUIL Cedex

Sommaire

1. Contexte
2. Modélisation à l'échelle matière et technique d'analyse de sensibilité utilisée
3. Étude préliminaire
4. Résultats de l'analyse sur les paramètres
5. Résultats de l'analyse sur les mécanismes
6. Conclusion

Contexte

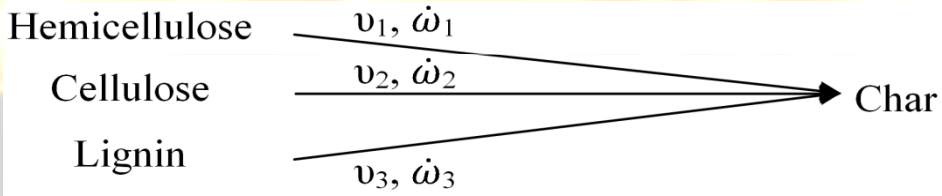
- La modélisation et la prédiction des feux à grande échelle (FDS, Open Foam…)
- Les codes de simulations se composent de sous modèles
  - Turbulence, transferts thermiques, pyrolyse…
- Modèle de pyrolyse : sous modèle important car représente le terme source
  - Perte de masse et vitesse de perte de masse en 0D
  - Quantité de gaz générée

Modélisation à l'échelle matière

- Mécanisme réactionnel de plusieurs types
  - Linéaire

$$\text{Dry wood} \xrightarrow{\upsilon_1,\ \dot{\omega}_1} \alpha\ \text{wood} \xrightarrow{\upsilon_2,\ \dot{\omega}_2} \beta\ \text{wood} \xrightarrow{\upsilon_3,\ \dot{\omega}_3} \text{Char}$$

  - Parallèle



- Loi cinétique utilisée : Arrhenius modifiée

$$\dot{\omega}_i = 10^{A_i} e^{-\frac{E_i}{RT}} (m_i)^{n_i}$$

Simplification : une étape réactionnelle

- Mécanisme à une étape $m_1 \rightarrow m_2$
- Description de la réaction $m_1 \rightarrow \upsilon m_2 + \text{gaz}$
- Calcul des vitesses $\frac{dm_1}{dt} = -\dot{\omega}$ et $\frac{dm_2}{dt} = \upsilon\dot{\omega}$
- Loi cinétique $\dot{\omega} = 10^{A} e^{-\frac{E_a}{RT}} (m_i)^{n}$

Simplification utilisée pour l'étude des paramètres

Principe de l'analyse de sensibilité globale par la méthode de Sobol

« L'A.S. permet d'analyser un modèle mathématiques en étudiant l'impact de la variabilité des facteurs d'entrée du modèle sur la variable de sortie. »

$$A, E, n, \upsilon \xrightarrow[\text{Variations}]{\text{Input data}} \boxed{\begin{array}{c}\textit{Model} \\ m_1 \xrightarrow{\upsilon_1 \dot{\omega}_1} m_2 \\ \dot{\omega}_i = 10^{A_i} e^{-\frac{E_i}{RT}} (m_i)^{n_i}\end{array}} \xrightarrow[\text{Variations}]{\text{Output data}} MLR$$

<u>La méthode de Sobol est :</u>

- Quantitative
- Précise
- Qui permet d'étudier tous les aspects d'un modèle
- Mais, très gourmande en temps de calcul

Technique de Sobol

- *Calcul des indices de premier ordre*

$$\hat{S}_i = \frac{\hat{V}_i}{\hat{V}}$$

Calcul des indices de deuxième ordre

$$\hat{S}_{ij} = \frac{V_{ij}}{V} = \frac{\hat{V}_{ij} - \hat{V}_i - \hat{V}_j}{\hat{V}}$$

- *Ainsi de suite pour les ordres supérieurs…*

- *L'indice total peut être calculé directement par la relation :*

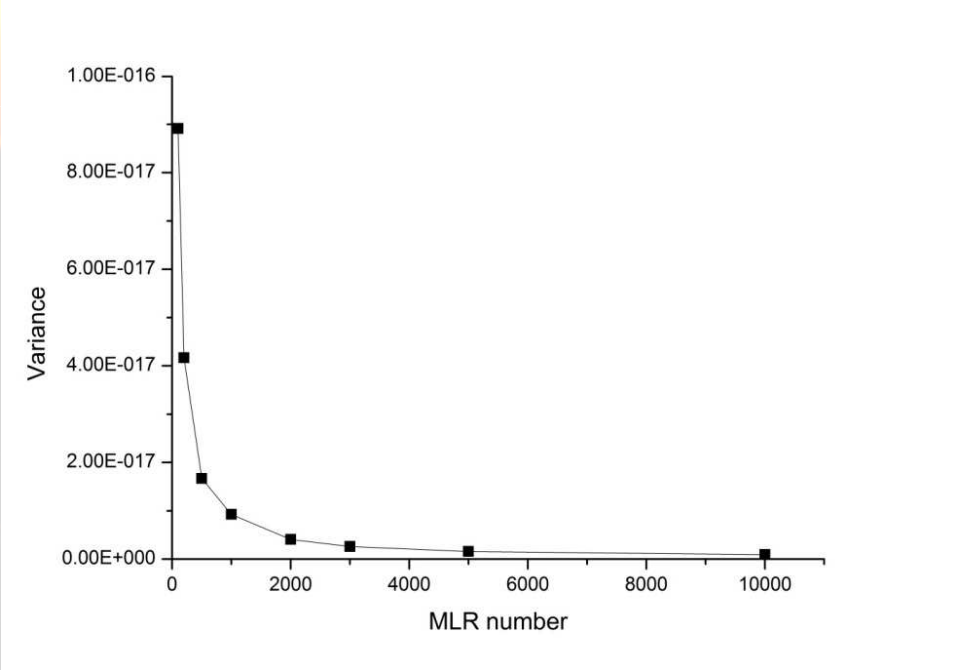
$$\hat{S}_{Ti} = \frac{\hat{U}_{\sim i} - \hat{f}_0^2}{\hat{V}}$$

Étude préliminaire

- Gamme de variations des paramètres étudiés

Parameter	Range	Units
A	[6 ; 13]	s^{-1}
E	[80 ; 190]	$kJ.mol^{-1}$
n	[0.5 ; 3]	/
v	[0.3 ; 0.9]	/

- Nb de MLR à calculer
  - Test sur les écarts entre les moyennes de plusieurs tests pour un même nombre de MLR calculées



Analyse globale sur les inconnus

Mécanisme simplifié à une étape réactionnelle

Indices	1st order		Total order				2nd order	3rd order	
	S_E	S_A	ST_A	ST_E	ST_n	ST_v	S_{AE}	S_{AEv}	S_{AEn}
Mean	0,12	0,07	0,83	0,90	0,08	0,18	0,56	0,11	0,06
Max	0,20	0,15	0,95	1,00	0,13	0,36	0,70	0,27	0,11
Min	0,03	-0,03	0,76	0,83	0,05	0,13	0,46	0,05	0,02

- Indice de premier ordre très faible
- Indice total très fort surtout pour A et E

} Nécessité d'étudier les relations entre les paramètres

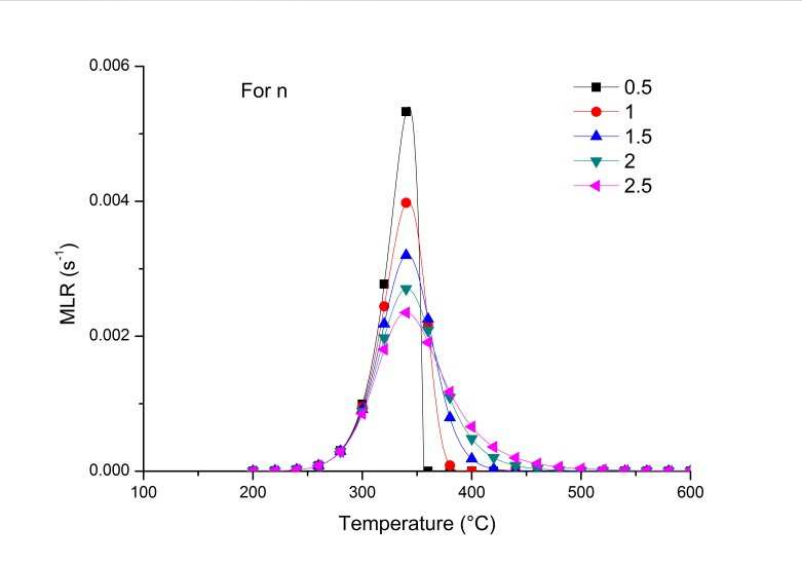
- Indice de deuxième ordre entre A et E très fort
- n et v ont un rôle très faible mais une interaction avec A et E

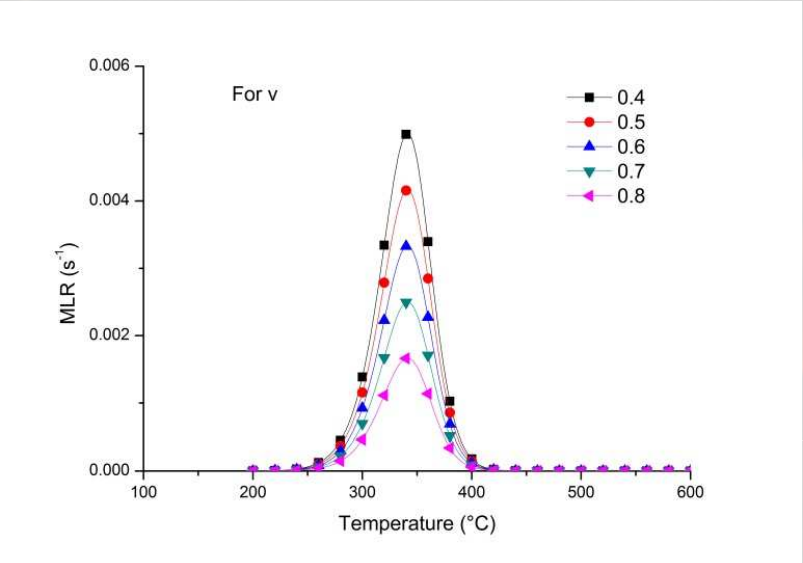
<u>Conclusion :</u>

A et E ont un impact très fort sur les variations des MLR calculées
La relation entre ces 2 paramètres qui joue un rôle essentiel.

n et v ont une importance mineure mais agissent sur le lien entre A et E

Analyse locale avec n et *v*



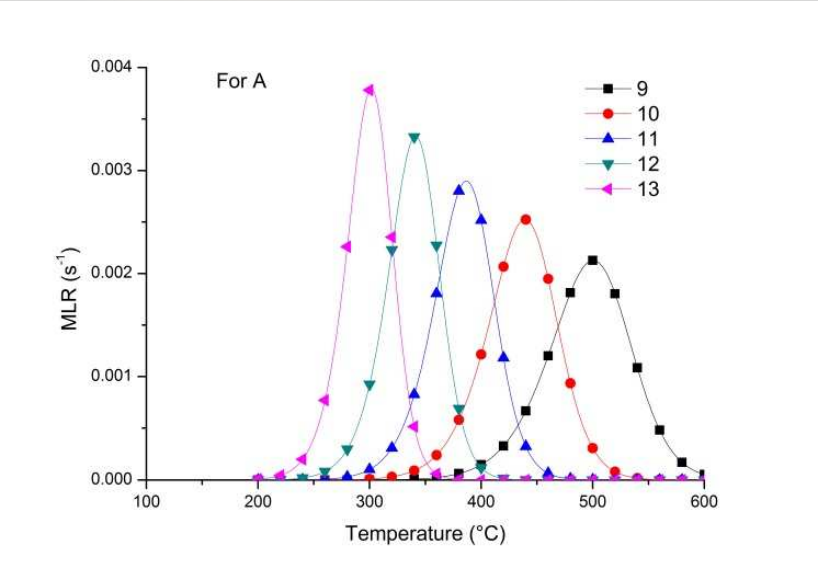


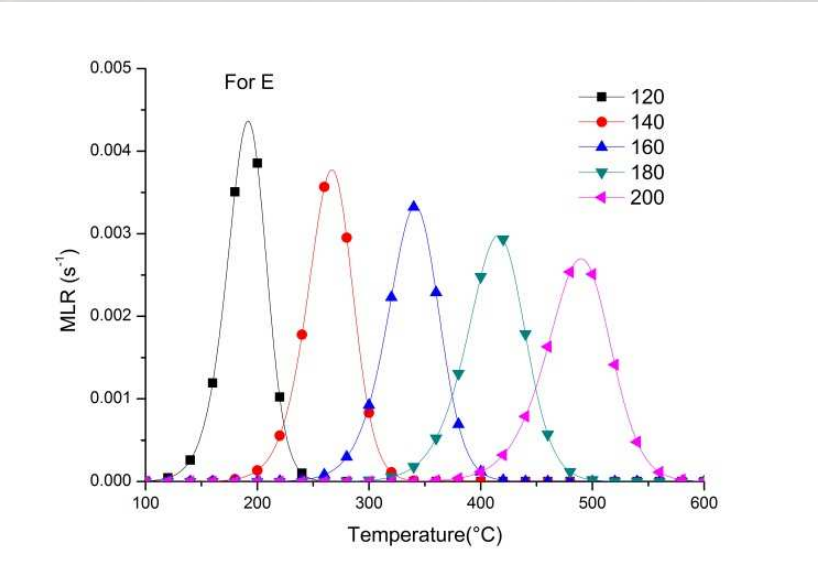
- n modifie l'intensité et surtout la symétrie des courbes de MLR
- *v* modifie seulement l'intensité des courbes

<u>Conclusion</u>

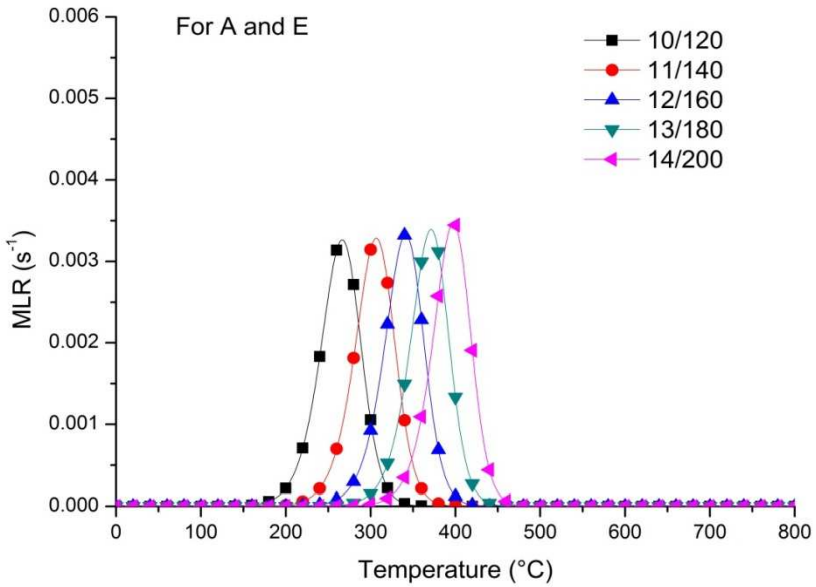
Ces deux paramètres ont une importance relativement faible mais peuvent intervenir pour affiner les résultats de simulation

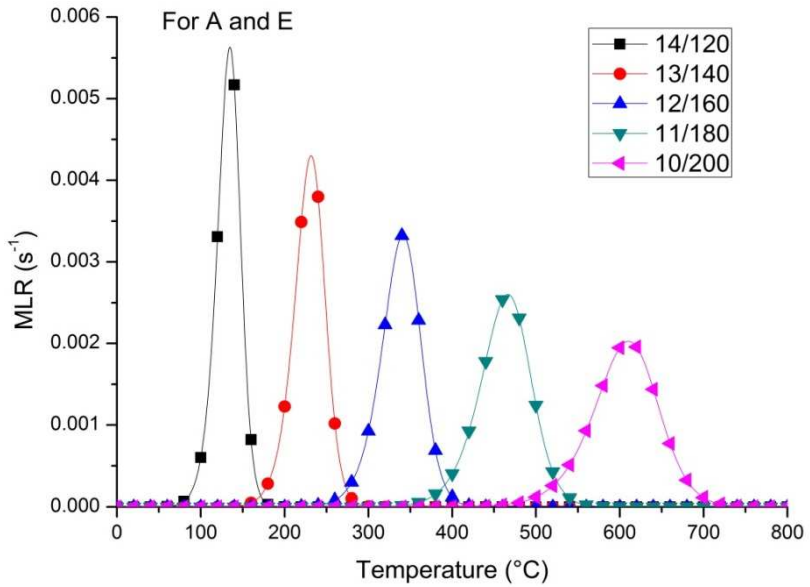
Analyse locale avec A et E





- A et E ont une importance très grande en particulier sur les décalages en température
- Ces deux paramètres suivent des évolutions contradictoires





Augmentation pas-à-pas

Variation contradictoire

Grande importance de la relation entre A et E dans les décalages en température et en intensité.

Analyse globale sur un mécanisme multi-étapes

Cas d'un mécanisme linéaire

Indices	1er ordre		Ordre total			2ème ordre	3ème ordre
	S_1	S_2	ST_1	ST_2	ST_3	S_{12}	S_{123}
Mean	0,56	0,06	0,92	0,43	0,31	0,06	0,31
Max	1,00	0,19	1,00	0,24	0.00	0,27	-0,00
Min	0,69	-0,00	0,73	0.00	-0,16	0,00	-0,22

- Grande importance de la première étape
- Les étapes sont reliées entre elles
  - À cause de la masse consommée
    - Importance donnée aux coefficients stœchiométriques

Analyse globale sur un mécanisme multi-étapes

Cas d'un mécanisme parallèle

Indices	1st order			Total order		
	S_3	S_2	S_1	ST_1	ST_2	ST_3
Mean	0,339	0,324	0,327	0,332	0,329	0,344
Max	0,375	0,332	0,306	0,310	0,338	0,373
Min	0,352	0,322	0,304	0,305	0,321	0,358

- Indices de 1er ordre égaux entre eux et égaux avec les indices totaux
- Les réactions n'ont pas de lien entre elles et ont la même importance ➔ celle-ci est fixée par la quantité de masse dégradée

Conclusion

- Sur les paramètres :
  - Importance de la relation entre A et E
  - N et v influencent peu la variance mais servent en particulier à affiner les courbes simulées

- Sur les types de mécanismes :
  - Deux mécanismes très différents
    - Linéaire : si interactions entre les composants
    - Parallèle : si les composants se dégradent sans interactions entre eux

Merci de votre attention