

Document LNE : G020284 / C672X01 / CEMATE/2

## **Les outils de l'ingénierie de la sécurité incendie**

**Eric GUILLAUME**

Responsable des activités Transports, Meubles Rembourrés, Toxicité et  
Ingénierie de la Sécurité Incendie,  
Division Comportement au Feu,  
Centre Energie, Matériaux, Emballage (CEMATE),  
Laboratoire national de métrologie et d'essais (LNE)

## Remerciements

Nous tenons à remercier la division Comportement au Feu et le service de documentation du LNE, et particulièrement Mme Poirot pour toutes ses recherches. Le service Statistiques, et plus particulièrement Mme Catherine Yardin et M. Nicolas Fischer ont aussi largement contribué à l'élaboration de ce document.

M. Michel Pavageau de l'Ecole des Mines de Nantes, Mme Farzaneh Arefi-Khonsari du laboratoire de Génie des Procédés – Hautes Technologies des Plasmas de Paris VI / ENSCP, Mme Catherine Porte du Conservatoire National des Arts et Métiers et M. Paulo Da Costa, de la SNCF, ont contribué, directement ou indirectement, à l'élaboration de ce document et nous les en remercions.

M. Daniel Joyeux et M. Pascal Van Hulle du CTICM ont fourni des éléments pour la comparaison des outils, permettant de compléter les informations du LNE et de bâtir un document comportant des exemples variés.

Merci à M. Kevin Mc Grattan et M. Walter Jones du NIST, ainsi qu'à M. Dieter Brein, de l'université de Karlsruhe, M. Marc Janssens du SWRI pour leurs contributions personnelles. Les avis de Loïc Chesné ont aussi été profitables et ont permis de construire le document le plus complet possible.

Enfin, nous tenons à remercier tous les relecteurs, en particulier Franck Didieux du LNE et Philippe Fromy du CSTB pour leurs avis et le temps passé à étudier un tel document.

## Table des matières

1	INTRODUCTION	4
2	PRINCIPE DE LA MODELISATION DES INCENDIES	6
2.1	Etat de l'art de la simulation numérique de l'incendie	6
2.2	Modèles de zone	6
2.3	Modèles de champs	9
2.3.1	Généralités	9
2.3.2	Sous-modèle de combustion	9
2.3.3	Sous-modèle de rayonnement	10
2.3.4	Sous-modèle de turbulence	11
2.3.5	Exemple d'outils existants	13
2.4	Modèles d'évacuation	14
2.5	Modèles de comportement des structure	15
3	LA CARACTERISATION DES OUTILS	16
3.1	Généralités	16
3.2	Les étapes de caractérisation d'un modèle	18
3.2.1	Caractérisation des données d'entrée	18
3.2.2	Limitations physiques et numériques	19
3.2.3	Robustesse mathématique et numérique	20
3.2.4	Etudes de sensibilité	22
3.3	La validation des modèles	34
3.3.1	Généralités	34
3.3.2	Méthodes de comparaison	34
3.3.3	Exemples de validations	37
3.4	Exigences relatives à un rapport de simulation	45
3.5	Exemple de benchmark d'outils	46
3.5.1	Présentation d'un cahier d'exigences	46
3.5.2	Évaluation des outils	47
3.6	Références	48
4	LES OUTILS DU LNE	51
4.1	Modèles de zone	51
4.1.1	Modèles mono- et bi-zones	51
4.1.2	Modèles de zone multi-locaux	52
4.2	Modèles champs et simulation tridimensionnelle	56
4.2.1	Caractéristiques du logiciel de simulation	56
4.2.2	Origine des données d'entrée	59
4.2.3	Robustesse, sensibilité, validations et antécédents de FDS	64
4.3	Références	67

**Annexe 1 : Les outils de modélisation zone du LNE – FPE Tools Fire Simulator**

**Annexe 2 : Les outils de modélisation zone du LNE – Ozone**

**Annexe 3 : Les outils de modélisation zone du LNE – CFAST**

**Annexe 4 : L'outil de modélisation champ du LNE : FDS**

**Annexe 5 : Exemple de formulation d'un modèle de flux réactif en  $k - \epsilon$**

# 1 Introduction

L'Ingénierie de la Sécurité Incendie se développe depuis plusieurs années et tend à être introduite dans différents domaines réglementés : bâtiment, transports par exemple. Dans ce cadre, et afin d'assurer son développement en France, un Projet National a été déposé, afin d'harmoniser la démarche et que les différents acteurs puissent échanger leurs connaissances. L'objectif est de passer d'une réglementation descriptive à une possible utilisation d'une démarche à critères de performance.

Dans le cadre du Groupe de Travail n°3 de ce Projet National, le Laboratoire national de métrologie et d'essais (LNE) a été sollicité afin de faire état des outils existants pour caractériser le développement du feu, ainsi que des méthodes de validation des dits outils.

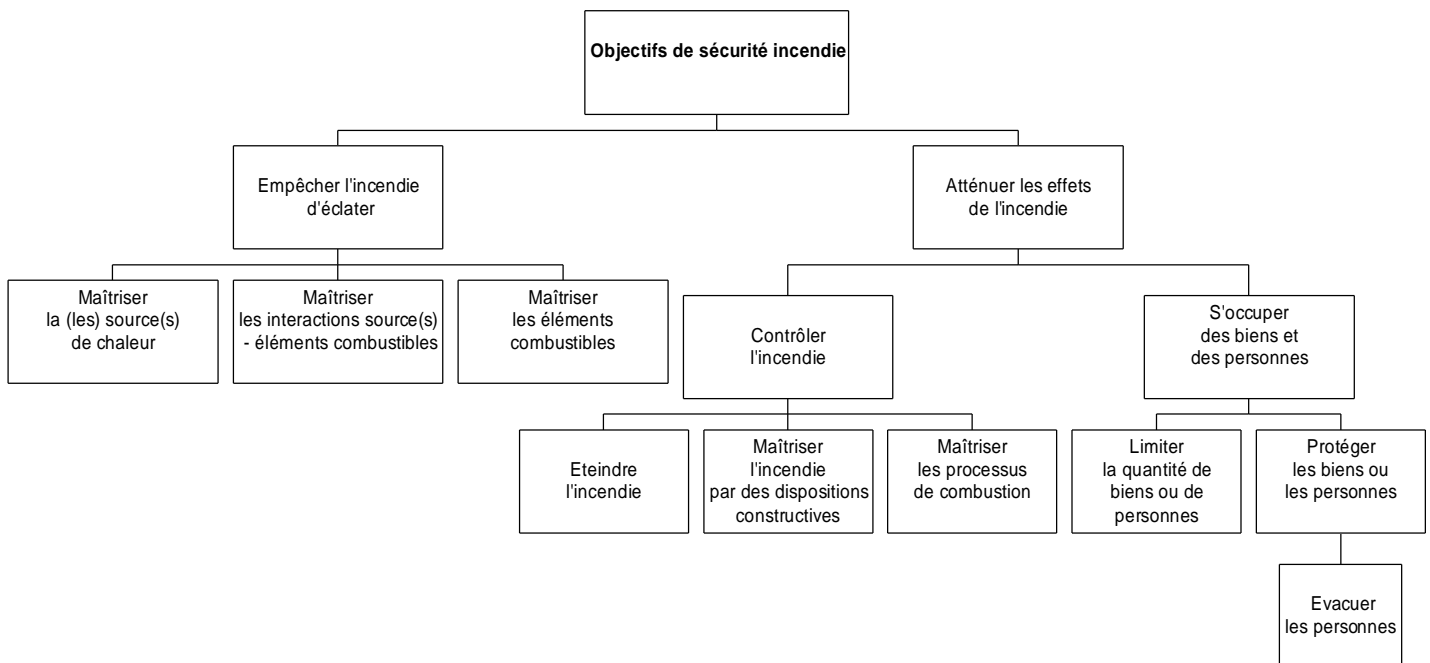
La démarche générale d'Ingénierie de Sécurité Incendie consiste à :

- D'une part rechercher systématiquement tous les enchaînements d'événements susceptibles de constituer un risque. Chaque enchaînement, appelé scénario, est recensé, décrit et associé à une probabilité d'occurrence dans le cas de l'ouvrage, du système de transport ou du bâtiment considéré ;
- D'autre part, parmi tous les outils disponibles, sélectionner, qualifier et utiliser ceux qui sont nécessaires et pertinents pour évaluer les performances de l'ouvrage, des produits et des systèmes étudiés

Elle consiste par ailleurs à :

- Evaluer les effets nuisibles (risques pour les personnes, intégrité structurelle, perte d'exploitation par exemple) générés par la combustion non contrôlée, en fonction de paramètres précis ;
- Caractériser la potentialité d'extension du feu dans des espaces donnés et la dégradation de l'atmosphère interne à ces espaces.

Ces remarques peuvent se résumer sur le diagramme suivant :



A chacune des étapes, les moyens d'action peuvent être des règlements, des essais à échelle réelle ou sur maquettes, ou des simulations numériques. L'avantage des simulations numériques est de pouvoir étudier de nombreuses configurations en un minimum de temps, en s'affranchissant des contraintes liées aux essais systématiques à échelle réelle, bien qu'elles ne puissent s'y substituer totalement.

Le Laboratoire national de métrologie et d'essais a utilisé une démarche complexe afin de qualifier ses outils de simulation numérique. Cette validation concerne des domaines variés correspondant aux domaines spécifiques du laboratoire : transport ferroviaire, marine civile et militaire, bâtiment, meubles rembourrés. Elle utilise les documents récents développés au sein de l'ISO TC 92/SC4, en particulier le projet ISO CD 16730.

Cette validation inclut la robustesse mathématique (mise en équation) et numérique (discrétisation sous informatique), ainsi que la sensibilité aux paramètres d'entrée, et la sensibilité aux paramètres numériques (par exemple la constante de Smagorinsky pour un modèle LES). La méthode numérique (conditions de pas de temps...) et les limitations physique et numérique des modèles ont aussi été déterminées.

De plus, le LNE a développé des modules de post-traitement permettant de calculer des champs de toxicité utilisant les modèles de l'ISO 13344 et de l'ISO 13571. D'autres modules permettent l'extraction des champs de données calculés par les modèles tridimensionnels.

Le présent document établit les différents outils existants, ainsi que les méthodes utilisables pour leur validation et des exemples d'application.

## 2 Principe de la modélisation des incendies

L'objectif de l'Ingénierie de la Sécurité Incendie est d'aider à atteindre un niveau prédit acceptable de la sécurité incendie. Une partie de ce travail suppose l'utilisation de méthodes d'analyse et de calcul permettant de prédire la succession d'événements pouvant potentiellement se produire dans le cas d'un incendie ou en conséquence d'un incendie. Ce travail suppose l'utilisation des méthodes de calcul afin d'évaluer et d'obtenir des justifications permettant d'atténuer les effets nuisibles d'un incendie pour les personnes, les bâtiments et l'environnement. Les principes clés nécessaires à l'établissement de la crédibilité de ces méthodes de calcul sont l'évaluation, la vérification et la validation.

Le présent document ne traitera pas les modèles analytiques (Alpert, Mc Caffrey...), mais s'intéressera aux outils portés sur support informatique du fait de la complexité des calculs mis en œuvre. Il abordera les modèles d'évacuation ou structuraux, mais s'intéressera plus particulièrement aux modèles de zone et champ utilisés, dans l'optique de reproduire les effets de l'incendie et de son développement, et d'évaluer son effet sur les biens et les personnes.

### 2.1 Etat de l'art de la simulation numérique de l'incendie

Les codes de calcul de mouvements d'air ont été développés de longue date pour la météorologie, puis pour la dispersion de polluants et de radioéléments. Néanmoins, l'ajout d'un terme source incendie en est un raffinement récent. La quantité de données à traiter simultanément pour des calculs tridimensionnels de cette nature n'a pu se développer que depuis les 10 dernières années, lorsque les ordinateurs sont devenus assez puissants pour permettre ces calculs dans des temps raisonnables.

Ainsi, si la simulation numérique date des années 1950, il a fallu attendre cette dernière décennie pour voir apparaître des codes de calcul industriels permettant de traiter des problèmes tridimensionnels en aérodynamique. L'objectif étant de reproduire numériquement les phénomènes physiques, différentes étapes de modélisation sont nécessaires. Deux grandes familles de calculs sont utilisées : les modèles zone, traduisant une configuration très simplifiée et les modèles champs, plus complexes, mais restant une simplification importante du monde réel.

De bonnes synthèses des outils existants sont présentées dans les travaux initiaux de Friedman (1992) <sup>[1]</sup>, complétés par les travaux de Olenick en 2002 <sup>[2]</sup>, ainsi que dans le SFPE Handbook of Fire Protection Engineering [20],[21],[22].

### 2.2 Modèles de zone

Un modèle de zone est un programme qui prévoit les effets du développement d'un feu à l'intérieur d'un volume relativement fermé. Dans la plupart des applications, le volume n'est pas totalement fermé, car les portes, les fenêtres, et les ouvertures sont habituellement considérées dans le calcul. Des modèles de zone pour des compartiments ont été développés pour des configurations de simple pièce et de pièces multiples.

La théorie zonale consiste à modéliser le panache d'un feu et la couche de fumée résultante dans un espace confiné. Cette théorie a été développée et appliquée par plusieurs équipes dans les années 70, par exemple Zukoski <sup>[6]</sup>. Dans l'approche zonale, la zone d'intérêt est divisée en un certain nombre de zones, combinées par des relations (portes, circulations...) permettant de définir le domaine complet <sup>[5]</sup>. Dans chacune des zones, les lois de conservation de la physique sont exprimées sous forme d'équations mathématiques (les bilans matière et énergie). La mise en équation de ces modèles est bien présentée par Quintiere, dans la référence [20] et par Janssens, qui en démontre aussi les étapes numériques dans la référence [19].

La méthode consiste donc à découper le volume libre en plusieurs zones supposées isothermes, en définissant préalablement des zones solides intérieures et extérieures isothermes. La résolution des bilans massiques est réalisée entre zones, en prenant en compte les échanges de matière entre ces différentes zones. Le bilan énergétique est alors effectué en prenant en compte les échanges de chaleur (convection, conduction et rayonnement) et éventuellement l'accumulation de chaleur par les solides.

L'espace est habituellement divisé en deux zones distinctes : la couche supérieure chaude de fumée et la couche inférieure d'air plus frais. Le feu et son panache agissent comme une pompe enthalpique entre la couche inférieure et la couche supérieure chaude de fumée. En réalité, selon la taille de pièce et le débit calorifique du feu, l'interface n'est pas parfaitement définie entre la couche supérieure chaude de fumée et la couche inférieure. La couche supérieure chaude de fumée n'est pas non plus à une température uniforme (on observe les températures plus élevées plus près du feu et du panache) ; cependant, l'utilisation de deux zones uniformes reproduit une approximation raisonnable du développement d'un feu dans une pièce dans de nombreuses situations.

Concrètement, ce type de modèles est adapté au bâtiment, où chaque pièce peut définir une zone avec des caractéristiques uniques (de température, de visibilité...), et a trouvé son essor lorsque la puissance de calcul était moindre qu'actuellement. Dans beaucoup de cas d'ingénierie incendie, il se révèle suffisant (cas de l'évacuation des immeubles, par exemple), mais montre ses limites dans la résolution de structures fines comme le développement d'un feu dans une voiture ferroviaire. C'est pourquoi ce type de modèles ne sera pas utilisé dans ce type d'étude.

Un exemple de validation très poussée d'un logiciel de zone est présenté dans la référence [11]. Cette référence présente les travaux de W. Jones sur le logiciel CFAST, validé pour un usage dans le bâtiment. Les différents modèles de zone existants, issus des références [1],[2] et [21] sont repris ci-dessous :

Modèle	Description
ASET ASET-B	ASET est un modèle simplifié pour une seule pièce, développé au NIST. ASET-B est la version Basic de ce programme, ne faisant pas appel au même solveur. Les deux outils permettent d'estimer le temps de tenabilité atteinte dans une pièce dans laquelle le feu se développe. ASET est utilisé par le LNE. (sources et documentations disponibles)
BRANZFIRE	BRANZFIRE est un outil multicompartiments développé en Nouvelle Zélande. Il dispose d'une fonctionnalité intéressante, qui est de posséder un algorithme d'évolution des espèces gazeuses. Il calcule aussi une extension de foyer, à partir de données issues du cône calorimètre.
CCFM.VENTS	CCFM a été développé par le NIST à la fin des années 1980. Cet outil multicompartiments est le précurseur de CFAST. Il gère la ventilation naturelle ou forcée entre les compartiments.
CFAST	CFAST est un modèle de zone multicompartiments développé par le NIST depuis de nombreuses années. Il est maintenant à sa version 6 et possède une interface graphique. Le logiciel a été pleinement validé pour les situations du bâtiment, et de nombreuses comparaisons avec l'expérimentation ont été réalisées. L'outil a un algorithme d'extinction en fonction de la température et de la teneur en oxygène. Il gère le calcul de délai de déclenchement des sprinklers et détecteurs. CFAST est utilisé par le LNE. (sources et documentations disponibles)
CFIRE-X	CFIRE-X est un modèle mono-compartiment spécialement développé pour les feux de flaques d'hydrocarbures. Des foyers additionnels peuvent être activés sur la température, afin de simuler l'extension du feu.
CIFI	CiFi est un modèle développé au CSTB dans les années 1990, afin de traiter le mouvement des fumées dans un milieu compartimenté. Il est capable de traiter des situations multi-locaux, en deux zones + panache. Il est directement issu du code FISBA
COMPBRN-III	COMPBRN-III est un code à zones développé par UCLA spécifiquement pour les études probabilistes. Il est adapté aux phases pré-flashover.
COMPF2	COMPF2 est un modèle de compartiment unique post-flashover développé par Babrauskas <sup>[23]</sup>
CSTBZ1	CSTBZ1 est un programme développé par le CSTB sur la base des équations de COMPF2. Il est destiné aux études post-flashover
DSLAYV	DSLAYV est un modèle simple développé par Hägglung pour des cas de compartiments uniques. La ventilation peut être éventuellement forcée.
FIGARO-II	FIGARO-II est un modèle deux zones développé par T. Heins. Il est capable de gérer les situations mono- et multi-compartiments.
FIRM	FIRM est un modèle de zone permettant de prédire l'environnement d'un compartiment simple ayant une ouverture dans une paroi verticale. La description détaillée de la mise en équation du modèle est donnée dans la référence [19].

Modèle	Description
FIRST	FIRST est le descendant direct de HARVARD-V. Il a été développé à la fin des années 1970 au NIST. Il permet de traiter les feux prescrits et ceux dépendant du flux radiatif incident. Il est possible de définir trois foyers additionnels, basés sur les propriétés thermiques des matériaux.
FMD	FMD est un modèle de zone des années 1990, spécialement développé pour le cas des atriums. Il est capable de traiter les plafonds inclinés, et la ventilation forcée. Ce code a été développé pour permettre d'évaluer la stratification à des distances importantes du plafond.
FPE TOOLS FIRE SIMULATOR	FIRE SIMULATOR est un logiciel de zone inclus dans la suite FPE TOOLS du NIST. Cet outil monocompartment gère les stades pré- et post-flashover, et prend en compte la nature des parois. Il est possible de changer des conditions aux limites au flashover (bris de vitres...). L'outil a un algorithme de production de CO et d'extinction en fonction de la température et de la teneur en oxygène. FIRE SIMULATOR est utilisé par le LNE (documentation détaillée disponible)
HarvardMarkVI	Cet outil, développé à Harvard, gère le multi-compartiments (jusqu'à 10 éléments) et les foyers multiples. Il a été développé au début des années 1980.
LAVENT	LAVENT a été développé pour déterminer le délai de réponse des sprinklers et détecteurs dans des compartiments pouvant être équipés d'ouvrants fusibles.
MRFC	MRFC est un modèle relativement récent, développé en Allemagne (AGB) dans les années 1990. Il est spécialisé dans la détermination de l'élévation de température d'une structure dans les feux multi-locaux. Il gère les matériaux multi-couches et calcule par ailleurs le potentiel toxique des fumées.
MAGIC	MAGIC est un code développé par EDF, à même de traiter jusqu'à 24 compartiments. Le code a été développé pour l'application des réseaux de ventilation des centrales nucléaires.
NAT	NAT a été développé au CSTB pour déterminer la réponse de la structure d'un bâtiment, dans le cas d'un feu développé en compartiment unique. Il travaille avec une seule zone dans le compartiment.
NRCC1 et NRCC2	Ces deux modèles canadiens ont été développés pour calculer la réponse structurelle à des feux mono-compartiments. NRCC1 est un modèle mono-zone et NRCC2 un modèle deux zones.
OZONE	OZONE est un logiciel mono-compartment, utilisé pour déterminer l'impact thermique d'un feu sur une structure. Il a été développé par l'université de Liège. C'est un modèle récent, couplable avec l'outil PFS développé au VTT afin de réaliser des calculs stochastiques. OZONE est utilisé par le LNE. (sources et documentations disponibles)
RADISM	RADSIM est un modèle développé au BRE à la fin des années 1980. Il est adapté à la détermination de la réponse radiale en température à partir d'un panache conique, ainsi qu'à évaluer le temps de réponse des sprinklers.
R-VENT	R-VENT est un outil de zone utilisé pour définir quelle taille d'ouverture permet de maintenir constante la hauteur d'une couche chaude. L'outil a été développé par SINTEF.
SFIRE-4	SFIRE-4 a été développé à l'université de Lund (Suède). Le modèle prend en compte un seul compartiment, plusieurs matériaux de parois et calcule la température interne des parois.
SMKFLW	SMKFLW est un code mono-zone développé pour calculer les chemins d'évacuation, à partir de la théorie des graphes.
SmokePro	SmokePro est un modèle deux zones mono-compartment récent, permettant de calculer l'activation des détecteurs et l'influence des ventilations.
WPI/FIRE	WPI/Fire est le descendant direct de FIRST et HARVARD. Il a été développé au début des années 1990. Une de ses spécificités est de pouvoir calculer le transfert thermique de surfaces et de points chauds.

Le paragraphe 4.1 et les annexes 1, 2 et 3 présentent en détails les outils de zone utilisés au LNE et les équations inhérentes à ce type de modèles.



## 2.3 Modèles de champs

### 2.3.1 Généralités

Le modèle champ calcule en tous points de l'espace les différentes données (concentrations, températures...). Le calcul est basé sur un traitement simultané des équations de Navier-Stokes, qui permettent la résolution des bilans de conservation de masse, d'énergie et de quantité de mouvement. La conduction et la turbulence sont calculées par ailleurs. La référence [26] décrit bien les principes de ces modèles.

Ce type de logiciel utilise les équations de la thermique et de la mécanique des fluides. Les écoulements sont en général turbulents. Le logiciel utilisé lors des études prend en compte :

- Les propriétés de l'air et des fumées : viscosité, dilatation thermique, capacité calorifique, compressibilité...
- La turbulence de l'écoulement.
- Les propriétés thermiques des constituants solides.
- Les caractéristiques géométriques tridimensionnelles de l'environnement et du système de distribution d'air.
- Les conditions climatiques extérieures (froid, chaud, rayonnement solaire).

L'utilisation d'un modèle champ requiert un maillage de qualité. Le maillage retenu doit être assez fin pour qu'une résolution inférieure ne montre pas d'effets significatifs. La taille minimale de la maille doit toutefois être supérieure au millionième de la taille du domaine, pour la représentativité des échelles calculées.

### 2.3.2 Sous-modèle de combustion

Dans tous les cas, le sous-modèle de combustion est un point critique à considérer, car il introduit le terme source de chaleur ainsi que la production de nouvelles espèces chimiques. La modélisation du processus de combustion est une étape délicate. Trois grandes familles de modèles de combustion ont été développées à ce jour :

- Le modèle global (*mixture fractions*). La cinétique des réactions chimiques de la flamme n'est pas prise en compte, les réactions étant présumées instantanées et totales. Pour décrire la répartition des espèces chimiques, on associe alors des coefficients stœchiométriques arbitraires et une enthalpie de combustion unique par matériau. Ces modèles simplifiés utilisent habituellement des lois de type « Arrhenius » et ne peuvent donc décrire des phénomènes violents ou explosifs (réactions radicalaires) ;
- Le modèle « Flammelettes ». Ce modèle décrit la combustion de produits parfaitement connus. Deux calculs préliminaires sont alors nécessaires :
  - o Une première étape consiste à évaluer la composition d'une flammelette laminaire à partir des données d'enthalpie (composition en fonction de la température et du flux thermique du milieu), de fractions molaires de combustible et de comburant et du taux de contrainte, qui décrit les effets de la flamme sur elle-même. Les modèles de Bray-Moss-Libby-Champion ou de la flamme cohérente sont fréquemment utilisés ;
  - o La seconde étape consiste alors à appliquer des fluctuations turbulentes à cette flamme à l'aide de lois probabilistes (en général fonctions Bêta) représentant les variations de la flamme par l'intermédiaire de variations des fractions molaires de comburant et de combustible. A ce stade, l'une des approches est la démarche PPDF (Presumed Probability Density Function), par exemple selon la technique de Dopazo et O'Brien ;
- Les modèles EDM (*Eddy Dissipation Model*) ou EBU (*Eddy Break-Up*). Dans ce cas, la composition chimique de la flamme n'est pas connue. Ce modèle est basé sur la présence de monoxyde de carbone comme intermédiaire (type à deux étapes) ou de monoxyde de carbone et d'hydrogène (type à quatre étapes). Les réactions concurrentes entre  $H_2$ ,  $CO$ ,  $CO_2$  et  $H_2O$ , ainsi que la variation des différentes constantes d'équilibre correspondantes en fonction de la température sont alors considérées.

### 2.3.3 Sous-modèle de rayonnement

Le sous-modèle de rayonnement doit traduire les échanges de chaleur entre mailles concomitantes ou en regard. La flamme est un corps gris défini par sa luminance, son émissivité et sa température moyenne. L'éclairement énergétique qu'elle induit sur toutes les surfaces de l'environnement est alors calculable, et ainsi la température de surface des matériaux (en prenant en compte la chaleur qu'ils évacuent à leur tour). Cette température conditionne leur inflammation, et par là-même le développement de l'incendie.

Les échanges d'énergie par rayonnement thermique dépendent des caractéristiques des différents milieux. Chaque cellule fluide ou solide délimitée par le maillage échange avec toutes les autres cellules du domaine de calcul.

En particulier, les échanges radiatifs pris en compte doivent concerner :

- Les flux radiatifs entre les zones chargées en suie ;
- Les flux radiatifs entre les zones chargées en suie et les éléments solides (parois) ;
- Les flux émis et absorbés entre les éléments solides (parois).

L'équation de base utilisée pour les transferts thermiques radiatifs dans les fluides est l'équation RTE :

$$s \cdot \nabla I_{\lambda}(x, s) = -[\kappa(x, \lambda) + \sigma(x, \lambda)]I_{\lambda}(x, s) + B(x, \lambda) + \frac{\sigma(x, \lambda)}{4\pi} \int_{4\pi} \Phi(s, s') I_{\lambda}(x, s') d\Omega'$$

$s$  représente le vecteur directeur de l'intensité,

$I_{\lambda}(x, s)$  désigne l'intensité du rayonnement à la longueur d'onde  $\lambda$ ,

$\kappa(x, \lambda)$  désigne le coefficient d'absorption local à la longueur d'onde  $\lambda$ ,

$\sigma(x, \lambda)$  désigne le coefficient de diffusion local à la longueur d'onde  $\lambda$ ,

$B(x, \lambda)$  désigne terme-source d'émission à la longueur d'onde  $\lambda$ .

$\frac{\sigma(x, \lambda)}{4\pi} \int_{4\pi} \Phi(s, s') I_{\lambda}(x, s') d\Omega'$  décrit la diffusion provenant des autres directions de l'espace.

La modélisation du rayonnement émis ou reçu peut être réalisée plus simplement par la loi de Stefan-Boltzmann. Dans le cas de la modélisation, une telle formulation simplifiée en  $T^4$  est délicate, particulièrement au sein de la flamme, car une faible erreur sur la température a des effets très importants. Il est préférable de définir le flux radiatif comme une fraction du débit calorifique ramené au volume de chaque maille interne à la flamme.

Deux modèles sont alors à distinguer : une formulation locale, apte à traiter le rayonnement au niveau de la flamme et une formulation apte à traiter le rayonnement au niveau des fumées. Les absorptions et émissions de rayonnement par les surfaces solides ne doivent en outre pas être négligées. Pour les parois, une émissivité moyenne hémisphérique équivalente peut être considérée.

Pour les cellules fluides, un coefficient d'absorption dépendant de la fraction massique de suie peut être introduit. L'émissivité des suies peut alors être assimilée à celle du coke en suspension dans un gaz (données de la littérature). En fait, un modèle plus détaillé peut prendre en compte les effets des différentes espèces présentes sur le rayonnement. En particulier, l'eau et le dioxyde de carbone peuvent avoir une importance considérable dans le bilan radiatif.

Plusieurs méthodes de résolution de l'équation de rayonnement existent :

- la méthode de Monte-Carlo, qui fait appel à des rayons tirés entre cellules de manière aléatoire ;
- la méthode des volumes finis (FVM), qui dissipe l'énergie émise par un point dans une direction selon un angle solide prédéfini ;
- les méthode de flux, qui répartissent sommairement le flux dans les directions du maillage.

### 2.3.4 Sous-modèle de turbulence

Le sous-modèle de turbulence traduit la principale évacuation de matière. Il permet de caractériser à grande échelle les mouvements tourbillonnants et à plus petite échelle la dissipation d'énergie cinétique. Plusieurs types de modèles existent. Les modèles de type  $\kappa$ - $\epsilon$  sont adaptés à des écoulements canoniques (écoulement cisailé, aérodynamique) et ont été développés depuis de nombreuses années. Les modèles LES (*Large Eddy Simulation*), d'origine universitaire et en fort développement, semblent mieux traduire les écoulements turbulents dans les cas considérés.

Pour modéliser correctement une combustion, le modèle de turbulence doit intégrer un terme source dans l'équation de l'énergie turbulente lié à la flottabilité (ou poussée d'Archimède). Une sous-évaluation des mouvements turbulents peut entraîner une stratification des champs thermiques qui modifie la description du tirage thermique.

Les équations de Navier-Stokes traduisent trois phénomènes physiques fondamentaux :

- La conservation de la masse et des espèces.
- La conservation de la quantité de mouvement.
- La conservation de l'énergie totale.

Dans le cas d'un écoulement tridimensionnel, la forme conservative de ces équations s'exprime par:

$$\frac{\partial \xi}{\partial t} + \frac{\partial \chi}{\partial x} + \frac{\partial \psi}{\partial y} + \frac{\partial \delta}{\partial z} = S$$

$$\text{Avec : } \xi = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho w \\ \rho T \end{pmatrix}, \quad \chi = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + P \\ \rho uv \\ \rho uw \\ \rho uT \end{pmatrix} P, \quad \psi = \begin{pmatrix} \rho v \\ \rho uv \\ \rho v^2 + P \\ \rho vw \\ \rho vT \end{pmatrix}, \quad \delta = \begin{pmatrix} \rho w \\ \rho uw \\ \rho vw \\ \rho w^2 + P \\ \rho wT \end{pmatrix},$$

$$S = \begin{pmatrix} 0 \\ \mu \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right) + S_x \\ \mu \left( \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} \right) + S_y \\ \mu \left( \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} \right) + S_z \\ \frac{\lambda}{C_p} \left( \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right) + S_T \end{pmatrix}$$

$\rho$  désigne la masse volumique

$u$ ,  $v$  et  $w$  sont les composantes de vitesse selon les axes  $x$ ,  $y$  et  $z$

$P$  représente la pression totale

$T$  représente la température

$\lambda$  et  $\mu$  sont les coefficients de viscosité de Lamé

$C_p$  est la capacité calorifique à pression constante.

$S_x$ ,  $S_y$ ,  $S_z$  et  $S_T$  sont des termes liés à des sources comme la convection naturelle.

Les équations de Navier-Stokes peuvent être :

- moyennées (*RANS : Reynolds-Averaged Navier-Stokes*) : La diffusivité interne à la maille n'est pas calculée. Dans les équations de Navier-Stokes, on fait ainsi apparaître le tenseur de Reynolds :
  - modèles  $\kappa$ - $\varepsilon$ <sup>1</sup>, adaptés aux écoulements à turbulence bien développée, supposant un profil de vitesse au-niveau des interfaces. En général, les modèles  $\kappa$ - $\varepsilon$  font appel à de nombreuses constantes numériques ;
  - modèles  $\kappa$ - $\varepsilon$  Bas-Reynolds, adaptés pour traiter les détails de l'écoulement aux interfaces fluide/solide ;
  - modèles RNG, variantes des modèles  $\kappa$ - $\varepsilon$  pour les forts gradients de vitesses ;
  - modèles  $\kappa$ - $\omega$ <sup>2</sup>, basés sur une fréquence de turbulence. Ces modèles sont adaptés aux parois, en particulier pour traiter les échauffements par convection, mais inadaptés au sein du fluide ;
  - modèles SST (*Shear Stress Transport*) et RSM (*Reynolds Stress models*), ajoutant encore des niveaux de finesse aux modèles  $\kappa$ - $\varepsilon$ .
- filtrées : c'est la technique des simulations grandes échelle (SGE ou LES). Dans ce cas, les échelles de turbulence sont toutes résolues, hormis celles relatives à la dissipation d'énergie cinétique qui sont modélisées. Cette technique requiert des puissances de calcul relativement importantes. Dans ce cas, diffusion turbulente et viscosité sont reliées à la composition et la température des mailles par une grandeur numérique. Deux grandes familles de modèles de LES sont développés actuellement :
  - les modèles LES à constante de Smagorinsky. Dans ce cas, la grandeur permettant de relier la viscosité du milieu d'une maille à la densité de celle-ci, et par là-même à sa composition et sa température prend la forme d'une constante, dont la valeur est comprise entre 0,10 et 0,23. Une telle formulation permet de définir la diffusivité interne à la maille, et donc les turbulences de faible amplitude, à cette viscosité et donc à la température et la composition de la maille<sup>[37][38]</sup>.
  - Les modèles plus récents peuvent utiliser une variable numérique et non une constante pour la grandeur définie par Smagorinsky. Dans ce cas, la variable permet d'ajuster le taux de diffusion des espèces et la viscosité en fonction de la divergence de l'écoulement<sup>[39]</sup>.
- résolues sans autres hypothèses : c'est la Simulation Directe ou DNS. Dans ce cas, la viscosité et la diffusion turbulente ne sont pas dépendantes. Les dimensions spatiales et temporelles étant très petites, la viscosité d'une maille est fonction de la somme des viscosités partielles des espèces présentes dans cette maille. La diffusion turbulente est calculée d'une espèce dans l'autre en fonction d'intégrales de collision, c'est à dire de fonctions arbitraires de la température et de la forme des molécules constituant le mélange. Pour simplifier, en général, l'estimation est faite dans la combustion que toutes les espèces diffusent dans le diazote. Outre la qualité du maillage, en DNS, le calcul impose une équation de transport par espèce chimique considérée. Cette méthode est donc la plus gourmande en calcul. De ce fait, à l'heure actuelle, elle n'est applicable qu'à de très petites structures.

D'autres techniques de traitement de la turbulence se développent actuellement, combinant les avantages de la LES et des modèles RANS. C'est par exemple le cas des modèles DES (*Detached Eddy Simulation*), qui traitent les couches limites comme un modèle RANS et les tourbillons en LES quand le maillage est suffisamment fin et décollé des surfaces solides<sup>[40]</sup>.

Les équations de Navier-Stokes peuvent être :

- discrétisée à partir de leur forme conservative (conservations des grandeurs aérodynamiques à travers des discontinuités de type choc ou surface de glissement) ;
- intégrées à partir de leur forme conservative par une technique de volumes finis et ensuite discrétisées ;
- résolues dans l'espace de Fourier ;
- résolues par la méthode des éléments finis.

<sup>1</sup>  $\kappa$  désigne l'énergie cinétique de la turbulence et  $\varepsilon$  son taux de dissipation.

<sup>2</sup>  $\omega$  désigne la fréquence de turbulence de l'énergie cinétique.

Néanmoins, aucun des modèles de turbulence ne permet de calculer dans toutes les situations et à toutes les échelles les effets des tourbillons dans le cas de la combustion. La modélisation de la turbulence est encore très élémentaire. Par exemple, dans le cas de la combustion, si un modèle  $\kappa$ - $\epsilon$  est choisi, il est souhaitable d'utiliser un modèle de turbulence de type  $\kappa$ - $\epsilon$  bas Reynolds afin de bien modéliser l'écoulement près des parois. Il faudra en outre avoir conscience que, dans les mailles gazeuses, la diffusion turbulente interne aux mailles n'est pas calculée.

### 2.3.5 Exemple d'outils existants

Un exemple de validation d'un outil champ est présenté dans la référence [10], suite aux travaux de l'IRSN sur le code ISIS. D'autres codes, comme FDS, suite aux travaux du NIST, ont subi de nombreuses validations dans le domaine du bâtiment. Celles-ci sont présentées ultérieurement. Les différents outils disponibles sur le marché sont présentés ci-dessous, suite à l'analyse des données présentes dans les références [1], [2] et [22] :

Modèle	Description
ALOFT-FT	ALOFT est un outil maillé développé par le NIST pour étudier le comportement d'un panache de feu en extérieur en fonction du vent dans des conditions de terrain plat. [24] ALOFT est utilisé au LNE pour la dispersion atmosphérique.
CFX	CFX est un logiciel de mécanique des fluides d'usage universel, applicable à la dispersion, à l'incendie et à l'explosion dans les environnements ouverts ou fermés. Il fait appel à des modèles type RANS ou $\kappa$ - $\epsilon$ .
FDS	FDS a été développé au NIST pour répondre aux problèmes d'écoulement spécifiques du feu couplés avec la prise en compte de la propagation surfacique des matériaux. Il travaille en DNS ou en LES et est décrit plus précisément dans la suite du document. FDS est utilisé au LNE pour les calculs CFD de feux en bâtiments, et transports. Des fonctions additionnelles ont été développées.
FIRE	FIRE est un code de CFD multi-grilles pour des situations bidimensionnelles ou tridimensionnelles de combustion. Il peut être appliqué aux solides, liquides ou gaz.
FLUENT	Fluent est un logiciel de CFD général, fréquemment utilisé en génie des procédés. Il travaille habituellement avec des écoulements canoniques, en RANS ou en $\kappa$ - $\epsilon$ , mais permet la LES depuis peu (« Smagorinsky tools »).
JASMINE	JASMINE est un modèle développé au BRE depuis plus de 20 ans. Il travaille en $\kappa$ - $\epsilon$ . L'outil a été validé à de nombreuses reprises dans des situations de bâtiments. JASMINE résout la partie CFD à l'aide de PHOENICS. Il dispose de nombreux sous-modèles développés pour répondre à une multitude de situations.
KAMELEON	KAMELEON est un modèle champ tridimensionnel développé par SINTEF. Il dispose d'algorithmes de suppression et peut être couplé à des outils de structure comme USFOS
KOBRA-3D	KOBRA est un modèle de CFD tridimensionnelle permettant le calcul du transfert thermique, développé en Allemagne. Il gère les sources prescrites, mais pas la propagation calculée.
MEFE	MEFE est un logiciel de CFD développé au Portugal. Il traite des comportements de feu dans un ou deux compartiments. Le calcul est basé sur la flottabilité et la turbulence est traitée en $\kappa$ - $\epsilon$

Modèle	Description
PHOENICS	PHOENICS est un logiciel de CFD général, très utilisé en génie des procédés pour les calculs de transport fluide ou d'échanges de chaleur. Il dispose d'une grande variété de modèles de turbulence, incluant la LES ou les $\kappa$ - $\epsilon$ , mais ne possède pas de modèle de combustion solide.
RMFIRE	RMFIRE est un modèle bi-dimensionnel assez ancien développé au Canada. Les équations sont établies de manière à considérer les environnements irréguliers.
SMARTFIRE	SMARTFIRE est développé à l'Université de Greenwich. L'outil réalise la modélisation tridimensionnelle d'environnements multi-locaux. Il traite des algorithmes simples pour la pression et traite la turbulence en $\kappa$ - $\epsilon$ . Le logiciel a déjà été couplé au logiciel d'évacuation EXODUS.
SOFIE	SOFIE est un code anglais développé à l'université Cranfield. Le logiciel résout les équations moyennées RANS dans des situations complexes. La prise en compte de la pyrolyse des matériaux est en cours de développement. Les données issues du cône calorimètre peuvent être utilisées directement.
SOLVENT	SOLVENT est un logiciel spécialement créé pour traiter la situation des tunnels. Le code est adapté aux ventilations longitudinales et transversales.
STAR-CD	STAR-CD est un logiciel générique de CFD, applicable aux situations de combustion. Il dispose de plusieurs sous-modèles de turbulence : $\kappa$ - $\epsilon$ , $\kappa$ - $\epsilon$ non linéaires, LES par exemple, et dispose de modèles de combustion (EBU et PPDF)

Le paragraphe 4.2 et l'annexe 4 présente les détails du logiciel FDS. L'annexe 5 présente la formulation générale d'un modèle de type  $\kappa$ - $\epsilon$ .

## 2.4 Modèles d'évacuation

Les modèles d'évacuation prévoient le temps mis par les occupants d'une structure pour évacuer celle-ci. Un certain nombre de modèles d'évacuation sont couplés à des modèles de zone, afin de déterminer le délai nécessaire à l'obtention de conditions insoutenables et ne permettant pas l'évacuation. D'autres outils ne s'occupent que d'évacuation. Les modèles d'évacuation peuvent être des modèles d'écoulement ou des modèles maillés, et avoir différents degrés de prise en compte du comportement humain. Ils peuvent être déterministes ou probabilistes.

Les modèles d'évacuation sont souvent employés à l'étranger dans des analyses de performance lors de la conception alternative d'un bâtiment, afin de déterminer les zones de congestion pendant la sortie. Plusieurs de ces modèles sont basés sur des méthodes informatiques uniques et sophistiquées. Certains intègrent ainsi les effets psychologiques ou physiologiques des fumées<sup>[8][9]</sup>. Plusieurs de ces modèles ont également des interfaces graphiques utiles pour visualiser le mouvement des personnes dans un bâtiment.

Deux types de comportement sont à modéliser :

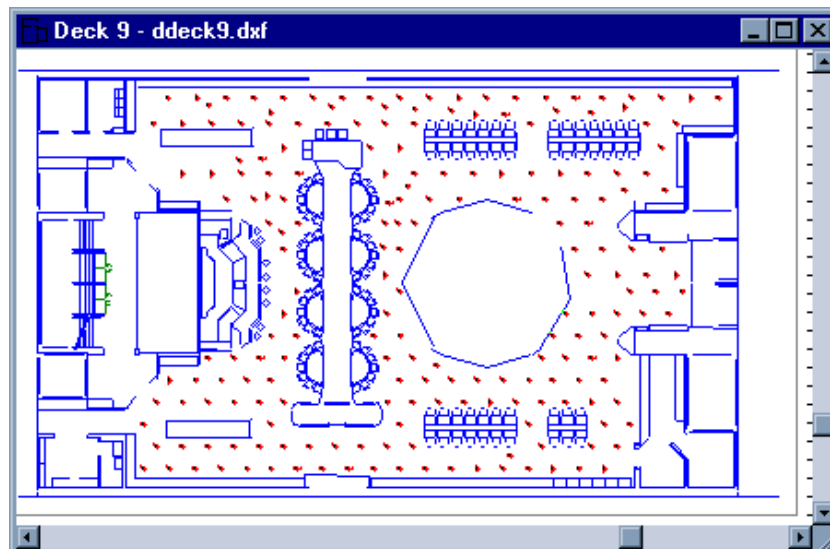
1. Le comportement global :
  - L'attractivité des sorties pour les personnes
  - Les comportements spécifiques non rationnels ou en sens inverse (par exemple l'effet du mouvement d'un Sapeur-Pompier à contre-courant dans une foule)
2. Le comportement local : les effets des interactions personnes - personnes, des obstacles, et dans l'idéal des fumées sur les personnes par exemple.

Entre 1992 et 2002 (références [1] et [2]), le nombre de modèles d'évacuation en situations d'incendie a plus que quadruplé. Cette tendance est encore due au fait que des ressources d'informatique améliorées permettent à des modèles d'évacuation d'être utilisés pour des géométries de plus en plus complexes, gérant le mouvement de groupes de personnes plus importants. Cette tendance est également due à la

démarche qui a été entreprise vers la conception alternative des bâtiments basée sur les performances et donc l'évacuation des occupants en cas de géométries inhabituelles et de scénarios de feu variables.

Un excellent exemple de validation d'un modèle de zone est donné par Rita Fahy dans la référence [3]. Une vue globale des modèles d'évacuation peut être issue de l'analyse des références [1], [2] et [13]. Un certain nombre d'excellentes présentations sur les modèles d'évacuation sont disponibles à l'université de Greenwich, à l'adresse suivante : <http://fseg.gre.ac.uk/fire/lectures/index.html>

Les principaux logiciels utilisés, par ordre alphabétique, sont : ALLSAFE, ASERI, EXODUS, EESCAPE, EGRESS, ELVAC, EVACNET, EXIT89, EVACS, EXITT, SIMULEX et WAYOUT. Les références [1] et [2] donnent une description de certains d'entre eux.



*Figure 1 : Capture d'écran du logiciel Simulex*

## **2.5 Modèles de comportement des structure**

Les modèles de résistance au feu simulent la réponse des éléments structuraux de bâtiment à l'exposition au feu. Certains de ces modèles sont autonomes et les données d'exposition sont rentrées après calcul par un outil zone ou champ, alors que d'autres sont incorporés aux modèles de zone ou de champ. Le concept des modèles de résistance du feu est identique à celui des modèles de champ. L'objet structural est divisé en petits volumes, et les équations de transfert thermique et de comportement mécanique des solides sont résolues pour déterminer de quelle manière la structure est affectée par l'incendie. Typiquement, les propriétés des matériaux et les conditions aux frontières d'exposition au feu sont les données saisies.

Ces modèles peuvent être très utiles pour déterminer quand un faisceau ou une colonne se déformera ou se rompera, et pour résoudre la courbe température temps à une certaine profondeur à l'intérieur de l'élément structural. Puisque beaucoup d'éléments structuraux sont construits différemment, ont différents dispositifs, et ont différentes applications pratiques, l'adéquation du modèle choisi avec la situation étudiée est primordial.

De nombreux outils existent, mais ne sont pas présentés dans ce document, car ils ne sont pas traités par le présent groupe de travail du projet national.

## 3 La caractérisation des outils

### 3.1 Généralités

La CFD requiert de bons outils, et un utilisateur possédant une bonne compétence scientifique dans de nombreux domaines. La facilité croissante d'utilisation et les interfaces graphiques des outils de modélisation ne doivent pas faire oublier les besoins considérables de formation des utilisateurs. La personne qui mène une simulation doit posséder avant tout une excellente connaissance de la physique et de la chimie du système étudié. De plus, elle doit maîtriser certains aspects numériques, car des choix doivent être faits quant aux méthodes de résolution des équations ou aux constantes numériques. Enfin, elle doit connaître parfaitement les limites de ses outils, et éventuellement l'effet « falaise » si les simulations sont réalisées à proximité de ces limites. En effet, dépasser la limite d'un outil peut avoir peu de conséquences ou des effets énormes selon la variable considérée.

Les premiers documents relatifs à la validation des outils sont principalement la norme ASTM E 1355 : *Standard Guide for Evaluating the Predictive Capability of Deterministic Fire Models*. Cette norme est un guide générique fournissant une méthodologie pour évaluer les possibilités prédictives d'un modèle du feu pour un usage spécifique. L'intention est de couvrir la gamme entière des modèles numériques déterministes pouvant être employés pour évaluer les effets des feux dans et sur des structures. La méthodologie est présentée en quatre secteurs d'évaluation :

- Définition du modèle et des scénarios pour lesquels l'évaluation doit être conduite ;
- Vérification de la convenance de la base théorique scientifique et des approximations inhérentes au modèle étudié ;
- Vérification de la robustesse mathématique et numérique du modèle ;
- Mesure de l'incertitude et de l'exactitude des résultats du modèle dans la prévision du cours des événements dans des scénarios semblables du feu.

Cette norme ne prétend pas répondre à toutes les situations liées à son utilisation. Il est de la responsabilité de l'utilisateur d'établir les pratiques appropriées et de déterminer l'applicabilité et les limitations de cette norme avant son utilisation. Elle n'est pas adaptée pour fournir des mesures quantitatives.

La norme ISO 16730 - *Fire safety engineering - Assessment, verification and validation of calculation methods*, a été développée au sein de l'ISO TC92 SC4 « Fire Safety Engineering ». Cette norme est en cours de parution, et détaille les différents aspects relatifs à la caractérisation d'un modèle. Elle permet en outre une appréciation quantitative des écarts entre modèles ou entre des modèles et des données expérimentales. La norme ISO 16730 précise le contenu devant accompagner un logiciel de simulation :

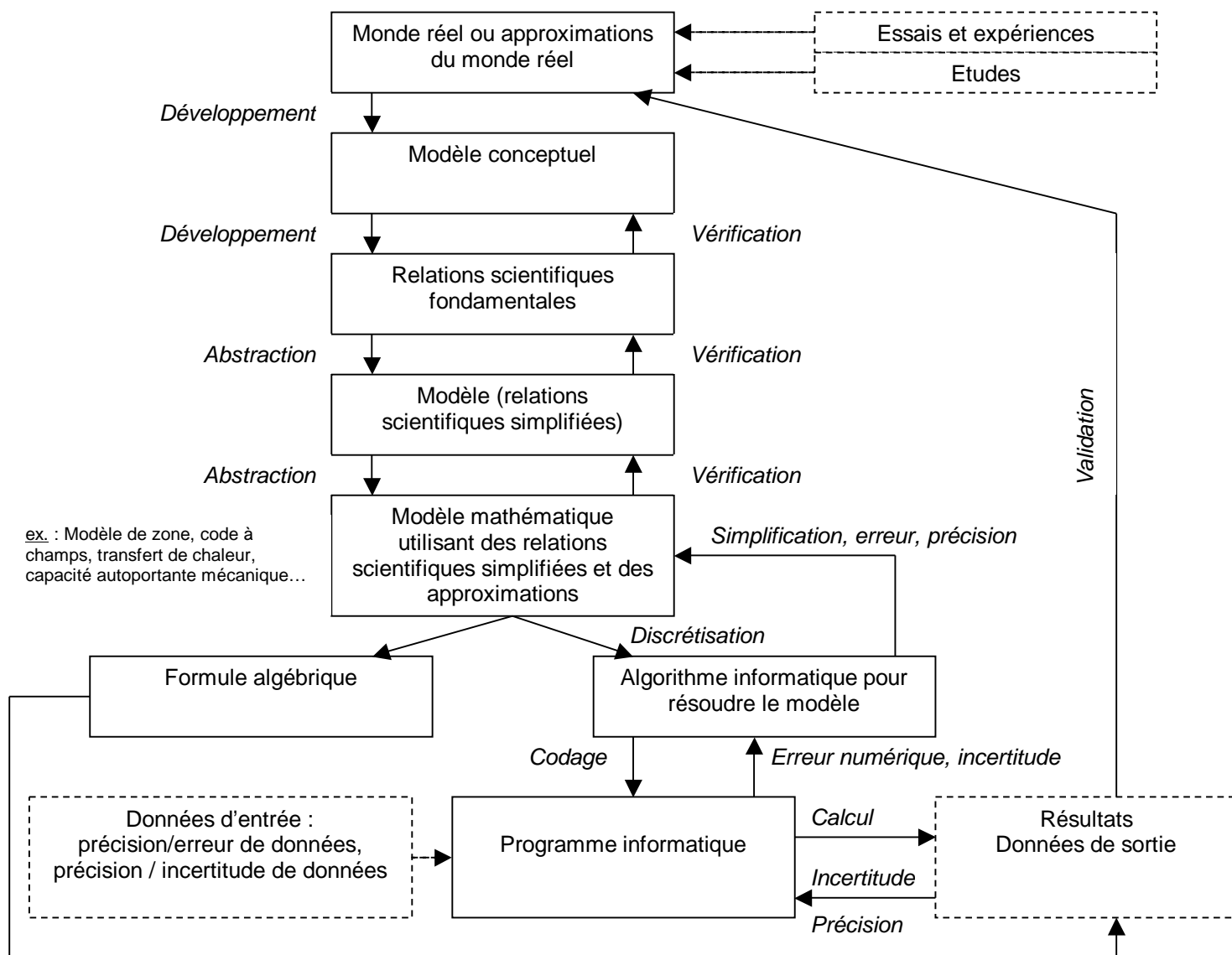
- La documentation technique, constituant la base scientifique du modèle, est primordiale. Celle-ci doit comporter les éléments suivants :
  - Les équations de base ainsi que les méthodes utilisées pour les discrétiser ;
  - Les choix de modélisation et les simplifications inhérentes,
  - Les justifications scientifiques de ces équations et choix de modélisation ;
- Un guide de l'utilisateur, devant comporter les éléments suivants :
  - La mise en œuvre de l'outil ;
  - Les options de compilation ;
  - Les données d'entrée nécessaires, ainsi que les bornes pour lesquelles celles-ci sont acceptables ;
  - Des exemples variés d'utilisations.
- La description des étapes de robustesse mathématique et numérique, ainsi que les vérifications
- Des exemples de validation, et d'études de sensibilité pour des cas représentatifs des utilisations courantes. Cette étape est à réaliser pour toute nouvelle famille d'utilisation. Par exemple, l'utilisation dans un train d'un logiciel validé pour le bâtiment nécessite de revalider cet outil dans une situation représentative d'un train. La sensibilité de l'outil aux paramètres y est de plus vraisemblablement différente.
- Les exigences d'assurance qualité quant à la réalisation des simulations ;



- La sauvegarde et l'archivage, la traçabilité des simulations, et la conservation du code source de l'outil. Ce dernier n'est néanmoins pas toujours disponible, mais le posséder est un atout indéniable, car il permet des adaptations éventuelles d'un outil à des besoins spécifiques.

En outre, les produits évoluant très rapidement, il faut également être attentif à la capacité du développeur à assurer son développement régulier, des tests de validation et une assistance auprès de l'utilisateur.

Ces différents points font l'objet des paragraphes suivants. Le schéma suivant présente schématiquement les étapes de cette validation :



Pour le développement du logiciel en lui-même, des conventions d'écriture et de validation peuvent être obtenues dans les normes ISO/IEC 25000<sup>[28]</sup>, ISO/IEC 9126-1<sup>[29]</sup> et ISO/IEC 14598-1<sup>[30]</sup>.

D'autres documents génériques sur la validation des modèles sont disponibles, mais ne s'appliquent pas nécessairement aux situations d'incendie. Parmi ces documents, les références [16], [17] et [18] sont par exemple très détaillées et utilisées à des fins militaires.

Par ailleurs, pour les aspects génériques de la preuve par le calcul et les essais, des documents ont été développés en France par la commission de normalisation X B50 « Essais et autres démonstrations »<sup>[31][32]</sup>. En particulier, ce groupe a développé la partie 3 de la norme NF X 50-141 « Relations clients-fournisseurs – Qualité des démonstrations (essais, calculs, simulations, etc.) – Lignes directrices pour demander et réaliser les calculs ou les simulations ». Cette norme donne un canevas général des étapes à respecter pour le prescripteur et le bureau d'études. Elle prend en considération les aspects techniques et économiques, les étapes de validation essentielles.

## 3.2 Les étapes de caractérisation d'un modèle

### 3.2.1 Caractérisation des données d'entrée

Dans toute simulation, les données d'entrées sont primordiales et conditionnent bien souvent la qualité des simulations. Il n'y a pas de bonne simulation sans bonnes données d'entrée, c'est pourquoi celles-ci doivent être sélectionnées avec soin. Dans les outils de simulation de combustion, les données d'entrée vont servir à décrire l'environnement du feu. Elles ont deux origines différentes :

- Soit elles proviennent de sources bibliographiques et théoriques. Dans ce cas, il convient de bien veiller à leur adéquation avec la situation étudiée.
- Soit elles sont issues de données expérimentales spécifiques. Des essais couramment employés sont par exemple le cône calorimètre.

Les données disponibles dans la littérature sont les plus facilement accessibles et présentent un avantage économique certain. Néanmoins, et en particulier dans les domaines du feu et des matériaux réels, il est souvent difficile d'être certain de leur adéquation. L'incertitude sur ces données, tant issues de la littérature que d'essais, est fondamentale<sup>[12]</sup>.

Il est ainsi fréquent de confirmer des données bibliographiques par des essais de vérification. Certaines données sont par ailleurs difficiles à obtenir par expérimentation. Quand leur influence sur le résultat (la sensibilité du modèle à ces données) est relativement faible, elles peuvent alors être issues de corrélations expérimentales ou de tables génériques. Les travaux de l'ISO TC92/SC4/WG8 "*Data needed for Fire Safety Engineering*" sont relatifs aux données d'entrée et un document est en préparation à ce sujet (ISO CD 16731 : *Fire Safety Engineering — Guidance for data needed for FSE*).

Le tableau ci-dessous présente un extrait des tables de ce document, relatif aux différentes données d'entrée nécessaires, ainsi que les moyens de les obtenir :

Data element	Application (model or other engineering methods)	Source and availability (No or yes and which?)	Suitability of data provided by the source for the application (direct use or through additional tools)	Additional comments
Emissivity	Radiative Field model	Databases or direct measurement	Temperature dependant	Use for solid heat transfer and not for gases and soot
Molecular weight (to calculate number density)	Field and zone model	-	-	-
Horizontal / vertical flame spread coefficient (rate)	-	-	-	-
Specific heat (temp. dependence)	Field model	-	-	-
Thermal conductivity	Field model	Direct or indirect measurement	-	(temp. dependence)
Pyrolysis temperature	Field model	-	-	-
Heat of gasification (solids) or vaporization (liquids) heats of liquefaction (thermoplastics)	Field and zone model	DSC, cone calorimeter	-	-

### 3.2.2 Limitations physiques et numériques

Avant toute utilisation ou validation d'un outil de simulation numérique, il convient d'en connaître les limitations physiques ou numériques.

#### 3.2.2.1 Limitations physiques

Les limitations physiques sont des conditions pour lesquelles la validité de certaines formules change, les résultats sont tronqués ou un changement de formule est opéré. Les conditions de ces limitations sont inscrites au sein du code de calcul, ou sont spécifiées par l'utilisateur. Dans les modèles de combustion, un exemple classique est la teneur limite en oxygène permettant la combustion.

Par exemple, dans le logiciel CFAST, la combustion est possible dans des conditions spécifiées d'alimentation en oxygène. Si celle-ci passe au-dessous de 10 % par défaut, la combustion s'arrête. Cette valeur peut être spécifiée par l'utilisateur. La relation déterminant la quantité de combustible pouvant être brûlé est définie par :

$$\dot{m}_{\text{Combustible}} = \dot{m}_{\text{Oxygene}} \cdot \frac{E}{H_c}$$
$$\dot{m}_{\text{Oxygene}} = \min(\dot{m}_{\text{Oxygene disponible}}, \dot{m}_{\text{Oxygene requis}})$$

Avec  $E$  désignant le facteur de Thornton (13,1 MJ/kg O<sub>2</sub>) et  $H_c$  l'enthalpie de combustion du produit (MJ/kg)

Le débit-masse d'oxygène disponible est calculé de la manière suivante :

$$\dot{m}_{\text{Oxygene disponible}} = \dot{m}_e Y_{O_2} \cdot \frac{\tanh(800(Y_{O_2} - Y_{LOL}) - 4) + 1}{2}$$

$\dot{m}_e$  désigne le débit d'entraînement d'air par la flamme,  $Y_{O_2}$  désigne la fraction massique d'oxygène et  $Y_{LOL}$  désigne la limite retenue de concentration en oxygène.

Cela permet de faire décroître le taux de combustion progressivement, par l'intermédiaire d'une fonction tangente hyperbolique, dès que le taux d'oxygène disponible est au-dessous du taux requis par la stœchiométrie. Une seconde condition de même type est basée sur la température.

De tels algorithmes constituent les limitations physiques de la combustion. Des dispositifs similaires existent dans d'autres outils. FDS présente par exemple le même type de limitations, basée sur la température et la teneur en oxygène des cellules gazeuses.

#### 3.2.2.2 Limitations numériques

Les limitations numériques sont des algorithmes de vérification interne ou externe du calcul et permettent de s'assurer de la validité des calculs. Souvent, ils bloquent un paramètre à une valeur seuil en fonction de divers paramètres.

Une des limitations numériques usuelles est par exemple une limite haute de température, permettant de plafonner le maximum. Une autre, très utilisée, est le nombre de Froude du feu. Le nombre de Froude du feu est un nombre adimensionnel traduisant la puissance pouvant être libérée par la combustion en fonction des caractéristiques de son environnement. Pour un feu libre, la puissance est nécessairement limitée par la géométrie du foyer (si celui-ci ne possède pas de quantité de mouvement initiale).

Ce nombre est calculé par la formule suivante :

$$Q^* = \frac{Q}{\rho \cdot C_p \cdot T \cdot D^2 \cdot \sqrt{g \cdot D}}$$

Q représente le débit calorifique,

D représente une longueur caractéristique de combustible (Pour un feu de flaque, D représente le diamètre équivalent de la source),

T représente la température ambiante,  $C_p$  et  $\rho$  respectivement la capacité thermique massique et la densité de l'air.

Dans beaucoup de logiciels, cette valeur est plafonnée. Par exemple, dans le logiciel SOFIE, le débit calorifique Q est limité de telle sorte que  $Q^*$  reste inférieur à 2,5. Une limitation similaire existe dans le modèle de combustion de FDS et est présentée en annexe, partie 4.2. Ce type de limitation n'est applicable que s'il n'existe pas de force externe au fluide, par exemple que le combustible n'est pas un gaz sortant d'un brûleur à une vitesse importante.

D'autres sont des données géométriques de la flamme. Une des relations usuelles est l'équation de Heskestead, relation empirique reliant le rapport hauteur / diamètre d'un feu à ce nombre de Froude. En effet, pour un feu donné sans vitesse initiale, un feu d'un diamètre donné dans un milieu donné a nécessairement une hauteur de flamme limitée. Cette relation est une relation empirique, basée sur l'expérimentation, mais a été éprouvée à de nombreuses reprises. La relation est la suivante :

$$\frac{H}{D} = 3,7Q^{*2/5} - 1,02$$

$Q^*$  représente le nombre de Froude du feu,

H représente la hauteur de la flamme,

D représente le diamètre du feu.

Souvent, d'autres limitations existent, par exemple l'assimilation de la flamme à un cône limite l'aire des flammes à une valeur limitée par la taille au sol du feu et la hauteur des flammes. Des limitations similaires existent dans de nombreux logiciels.

### 3.2.3 Robustesse mathématique et numérique

#### 3.2.3.1 Généralités

La robustesse mathématique caractérise la qualité des opérations nécessaires à la mise en équation du modèle. Certaines approximations mathématiques sont réalisées pour rendre les équations solubles, ou pour disposer de solutions analytiques ou numériques. Un exemple courant est l'utilisation de formes particulières des équations de Navier et Stokes, ou la recherche de racines numériques dans les équations de transfert thermique à partir de méthodes itératives.

La robustesse numérique correspond à l'influence de la transformation de ces équations continues en équations utilisant des variables discrètes dans le code. Elle est en général réalisée par le théorème de Gauss, puis mise en forme sous le langage informatique retenu. Cette étape nécessite de prendre garde aux ordres des opérations réalisées, et aux racines incertaines. Par exemple, l'ordre des opérations par l'ordinateur peut engendrer des divisions par zéro, ou des divisions de nombres trop grands par des nombres petits. A cette étape, la qualité du code, mais aussi du compilateur sont essentielles.

Des tests de robustesse sont nécessaires : Les techniques de calcul sont à l'origine d'un terme source d'erreur (formules, discrétisation, compilation, arrondis...). Par exemple, dans la plupart des logiciels champ, le modèle hydrodynamique est du second ordre tant spatialement que temporellement. Ainsi :

- Le terme d'erreur associé à l'approximation de la discrétisation spatiale est de l'ordre du carré de la taille de la cellule
- L'approximation due à la discrétisation temporelle est de l'ordre du carré du pas de temps

Ainsi, plus le maillage est fin, plus l'erreur due à la discrétisation diminue, et meilleure est la modélisation des mouvements fluides. Le pas de temps est souvent calculé en fonction des vitesses d'écoulement et des tailles de maille, à l'aide de la méthode de Courant-Friedrich-Lewy (condition CFL) :

$$\delta t \max \left( \frac{\delta x}{u}, \frac{\delta y}{v}, \frac{\delta z}{w} \right) < 1$$

A celle-ci, s'ajoute, dans le cas des grilles numériques fines, la condition de Von Neumann :

$$2 \max \left( v, D, \frac{k}{\rho c_p} \right) \delta t \left( \frac{1}{\delta x^2} + \frac{1}{\delta y^2} + \frac{1}{\delta z^2} \right) < 1$$

Cette condition se rencontre particulièrement en DNS, où les maillages sont par définition très raffinés et donc cet effet sur le pas de temps prépondérant devant la condition CFL.

### 3.2.3.2 Caractéristique des schémas numériques

Pour une méthode donnée, il est possible de regarder de manière très fine l'évolution des résidus issus de leur utilisation. Les résidus obtenus ainsi que les erreurs au niveau du bilan de masse et au niveau du bilan de quantité de mouvement doivent être très petits ( inférieur à 0,01 voire 0,001 ). La convergence des variables (vitesse et pression) doit être analysée en des points au dessus de la flamme, dans la couche de gaz chaud et aux sources de ventilation. En cours de calcul, la convergence des écoulements est un paramètre essentiel à suivre, afin de s'assurer de la pertinence des calculs.

En cas de convergence non atteinte, il convient de vérifier, à partir des résultats proposés, que les bilans matière et énergie globaux sont corrects. Si les résidus n'arrivent pas à diminuer suffisamment, l'instabilité observée oblige à revenir aux étapes précédentes (choix des modèles, conditions de frontière, maillage), voire à simplifier le problème<sup>3</sup>.

La notion du temps intervient dans le schéma par la discrétisation temporelle d'une équation de type

$$\frac{du}{dt} + f(u) = 0.$$

Il existe deux familles de schémas : les schémas implicites et explicites. Un schéma implicite donne la discrétisation au temps N+1 de la forme suivante :

$$\frac{U^{n+1} - U^n}{\Delta t} + f(U^{n+1}) = 0$$

Un schéma explicite donne la discrétisation suivante au temps N+1 :

$$\frac{U^{n+1} - U^n}{\Delta t} + f(U^n) = 0$$

Les schémas implicites ou semi-implicite sont préférables aux schémas explicites, gourmands en temps de calcul et beaucoup plus instables. Néanmoins, dans tous les cas, la robustesse du code vis à vis du pas de temps doit être obligatoirement testée, car l'influence du schéma numérique peut être considérable et constitue un choix de modélisation essentiel.

<sup>3</sup> Il est également possible que l'écoulement puisse être instationnaire alors que l'on cherche à atteindre une solution stationnaire.

De même, lors de la résolution de l'équation de pression la vorticit  barocline est souvent n glig e devant la vorticit  due   la flottabilit  c'est   dire :

$$\nabla \cdot \left( \frac{1}{\rho} \nabla P \right) = \frac{1}{\rho_0} \nabla^2 P$$

Il est int ressant de ne pas faire cette approximation et de calculer  $\nabla \cdot \left( \frac{1}{\rho} \nabla P \right)$  de la mani re suivante :

$$\nabla \cdot \left( \frac{1}{\rho} \nabla P \right) = \nabla \cdot \left( \frac{\nabla P}{\bar{\rho}} \right) + \nabla \cdot \left( \left( \frac{1}{\rho} - \frac{1}{\bar{\rho}} \right) \nabla \tilde{P} \right)$$

avec  $\bar{\rho} = 2 \frac{\rho_{\min} \cdot \rho_{\max}}{\rho_{\min} + \rho_{\max}}$  et le gradient de pression du second terme du membre de droite  valu    partir du pas de temps pr c dent

### 3.2.4 Etudes de sensibilit 

#### 3.2.4.1 G n ralit s

La sensibilit  du mod le consiste    valuer l'influence de l'incertitude et des gammes de variation des param tres d'entr e sur les param tres de sortie dans les conditions  tudi es.

Les param tres d'entr e du mod le peuvent  tre :

- Les propri t s physiques des solides et gaz, les conditions aux limites, les conditions initiales par exemple
- Des param tres exclusivement num riques, comme la qualit  du maillage ou des constantes num riques du mod le.

Par exemple, une technique utilisable pour tester la sensibilit  du solveur des mouvements fluides dans un logiciel champ est d'augmenter la qualit  du maillage jusqu'  ce que la solution n' volue plus : c'est la convergence.

Les  tudes de sensibilit  et de validation sont fonction de l'outil et du sc nario retenu. Elles doivent donc  tre conduites pour les diff rentes situations d'utilisation du mod le. Une validation d'un outil dans une situation ne signifie pas forc ment sa validation dans d'autres situations, en particulier si certaines grandeurs d'entr e, conditions fronti res ou a rauliques diff rent de mani re importante.

L'analyse de sensibilit  d'une m thode de calcul est une  tude sur la fa on dont des changements apport s   des param tres d'entr e affectent les donn es de sortie. Les r sultats des simulations peuvent  tre sensibles   plusieurs param tres :

- les incertitudes sur les donn es d'entr e,
- la rigueur de la mod lisation de la physique et de la chimie concern es,
- l'ad quation des traitements num riques utilis s.

Une analyse de sensibilit  sert   :

- identifier les variables dominantes dans les m thodes de calcul ;
- d finir la plage acceptable de valeurs pour chaque variable d'entr e ;
- d montrer la sensibilit  des variables de sortie par rapport aux  carts dans les donn es d'entr e ;
- informer et avertir tous les utilisateurs potentiels, du degr  et du niveau d'attention   apporter   la s lection des entr es ainsi qu'au fonctionnement du mod le ;
- fournir des informations quant aux param tres qu'il convient de ma triser dans des exp riences   grande  chelle.

Or, certaines propriétés des modèles informatiques rendent l'analyse difficile :

- Il existe de nombreuses variables d'entrée et de sortie ;
- Des discontinuités peuvent exister dans le comportement du modèle ;
- Des corrélations peuvent exister parmi les variables d'entrée et les lois de distribution des données suivent de nombreuses lois statistiques ;
- Des prédictions de modèles sont des fonctions non linéaires, à plusieurs variables, dépendantes du temps et des variables d'entrée ;
- L'importance relative des variables d'entrée individuelles est fonction du temps.

En outre, des équations de sensibilité ont des propriétés similaires. Pour un résultat et une entrée de modèle donnés, il peut y avoir des périodes de temps où le résultat est sensible à l'entrée et des périodes de temps où le résultat est insensible au même paramètre.

De nombreux modèles exigent un nombre important de données d'entrée et génèrent des prédictions pour de nombreuses variables de sortie sur une période de temps simulée. La technique d'analyse de sensibilité retenue dépend des objectifs de l'étude, des résultats exigés, des ressources disponibles et de la complexité du modèle analysé.

Deux méthodes de base existent pour obtenir des informations sur la sensibilité :

- Des méthodes locales produisent des mesures de sensibilité pour un ensemble particulier de paramètres d'entrée et doivent être répétées pour une plage de paramètres d'entrée afin d'obtenir des informations sur la performance globale d'un modèle.
- Des méthodes globales qui produisent des mesures de sensibilité moyennées sur la plage entière des paramètres d'entrée. Les méthodes globales exigent une connaissance des fonctions de densité de la probabilité des paramètres d'entrée, ce qui, dans le cas des modélisations de feu, est généralement inconnu.

Ces méthodes font appel à des déterminations probabiliste ou déterministe des jeux de valeurs prenant les paramètres à étudier. L'approche probabiliste de la référence [4] présente un exemple d'étude de sensibilité et de validation d'un logiciel simple.

Tous les aspects de la sensibilité doivent être abordés dans ce cas. En particulier, certains aspects semblent purement géométriques dans les essais ont une grande influence dans les modèles. Par exemple, la sensibilité des modèles multi-locaux au nombre de locaux entre un local cible et un local en feu est un facteur primordial, car les erreurs de chaque transfert de masse et d'énergie s'additionnent de local en local. Des problèmes de sensibilité sur le débit calorifique peuvent provenir de résultats influencés par l'utilisation d'un facteur de Thornton inadapté en expérimentation, en calcul ou pour les deux.

#### 3.2.4.2 Approche probabiliste

Pour une étude de sensibilité selon cette méthode, il convient alors de fixer les valeurs de chaque paramètre d'entrée, mais aussi sa plage de variations possibles (ou son incertitude) et la loi de distribution correspondante. Le logiciel va alors tirer au hasard un grand nombre de jeux de paramètres d'entrée dans l'intervalle de confiance indiqué, et dont la probabilité individuelle correspond à la loi programmée.

Toutes ces situations sont ensuite calculées et l'influence des paramètres d'entrée sur les paramètres de sortie apparaît alors sous forme de nuage de distribution. Ce type de technique est très puissant, car il permet d'évaluer l'influence du modèle et la sensibilité de tous les paramètres d'entrée sur chacun des paramètres de sortie. Toutefois, il requiert un nombre élevé de tirages aléatoires, en général plusieurs dizaines de milliers. De ce fait, et du fait de la puissance de calcul disponible, cette technique est utilisable pour les outils simples comme les logiciels de zone, mais peut difficilement être étendue aux logiciels champ, si ce n'est pour déterminer l'influence d'un seul paramètre d'entrée, pour lequel le nombre de situations à étudier peut être réduit.

L'exemple ci-dessous présente l'influence des conditions ambiantes et limites de combustion sur deux paramètres de sortie d'un logiciel de zone. Le logiciel est CFAST et les travaux ont été réalisés au LNE à l'aide de Matlab et CrystalBall 7.2. La méthode utilisée est la méthode de Monte-Carlo : un grand nombre de jeux de paramètres d'entrée sont générés aléatoirement. L'influence de chacune des situations est ainsi directement évaluée et les covariances sont prises en compte. Trois étapes ont été réalisées :

- Premièrement, le cas de référence a été établi.
- Deuxièmement, 500 tirages indépendants de chacune des données d'entrée étudiée ont été réalisés, suivant différentes lois de distribution. L'objectif est alors de déterminer la sensibilité de l'outil aux différentes données d'entrée et l'effet des lois de distribution sur les données de sortie.
- Troisièmement, plus de 25000 tirages ont été réalisés en faisant varier toutes les données d'entrée simultanément, afin de déterminer la combinaison globale des lois de sortie.

La situation de référence étudiée est un feu dans une simple pièce avec porte ouverte. La pièce fait 6 m par 4 m, pour une hauteur sous plafond de 2,4 mètres et des parois plâtrées. La porte fait 0,8 m de largeur et 2 m de haut. Le foyer est composé d'un feu de lits superposés, issu de la bibliothèque de CFAST. Aucune covariance n'est estimée dans les données d'entrée. La vérification de la génération aléatoire des variables est réalisée par comparaison de la moyenne, de l'écart-type du tirage et d'un test du Khi-2.

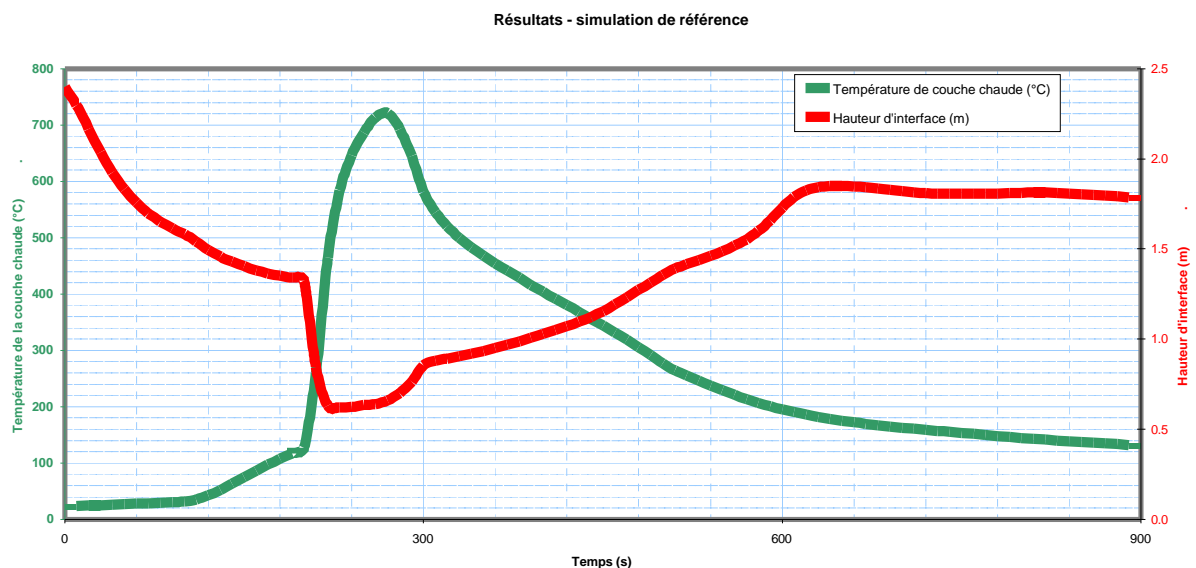
Les variables d'entrée sont les suivantes :

Variable	Valeur moyenne	Variation	Loi de distribution
Température ambiante (°C)	23	± 5	Normale à 95%
Température extérieure (°C)	15	± 15	Normale à 95%
Pression ambiante (Pa)	101 325	± 10 000	Normale à 95%
Humidité relative (%)	50	± 50	Normale à 95%
Limite O <sub>2</sub> de combustion (%)	10	± 5	Uniforme

Les variables de sortie exploitées dans l'exemple sont la température maximum atteinte par la couche chaude et la hauteur minimale d'interface. Le paramètre de coupure de la combustion en fonction de la teneur en oxygène est un paramètre numérique de l'outil, décrit précédemment (paragraphe 3.2.2). En l'absence de connaissance de cette valeur, sa variation sera considérée comme uniforme sur l'intervalle 5 à 15 % d'oxygène (valeur par défaut de CFAST : 10 %)

### **Première étape : cas de référence**

La situation de référence, c'est à dire avec les valeurs moyennes précédentes, donne les résultats suivants :



Température maximale atteinte : 721,1 °C  
 Hauteur minimale de l'interface : 0,622 m



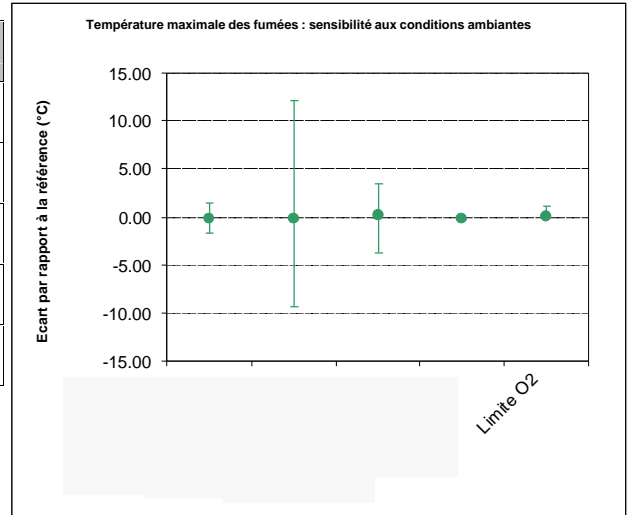
**Seconde étape : effet de la variation d'un paramètre**

La seconde étape donne de nombreux résultats, résumés ci-dessous :

**Température maximale de la couche chaude :**

	Minimum	Moyenne	Maximum	Ecart-type	
Température ambiante	719,43	720,90	722,48	0,50	0,07%
Température extérieure	711,74	720,95	733,15	4,25	0,58%
Pression atmosphérique	717,33	721,25	724,45	2,16	0,30%
Humidité ambiante	720,84	720,95	721,03	0,04	0,01%
Limite O <sub>2</sub>	720,94	721,09	722,14	0,29	0,04%

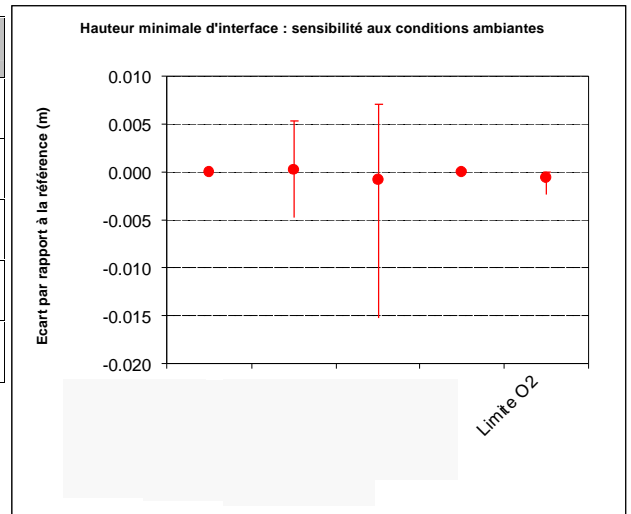
Dans le cas présent, le paramètre le plus influent est la température extérieure, pouvant engendrer des écarts de plus de 10°C sur la température maximum de la couche chaude.



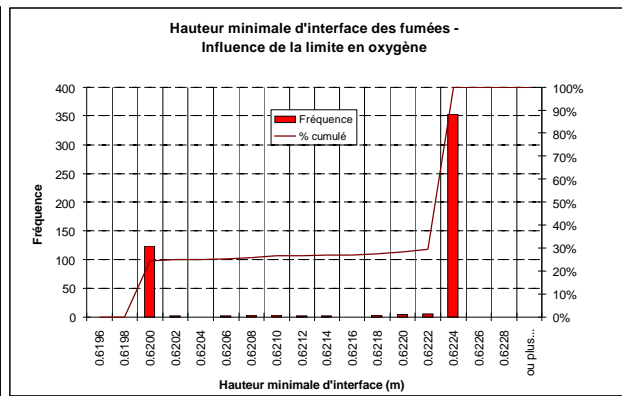
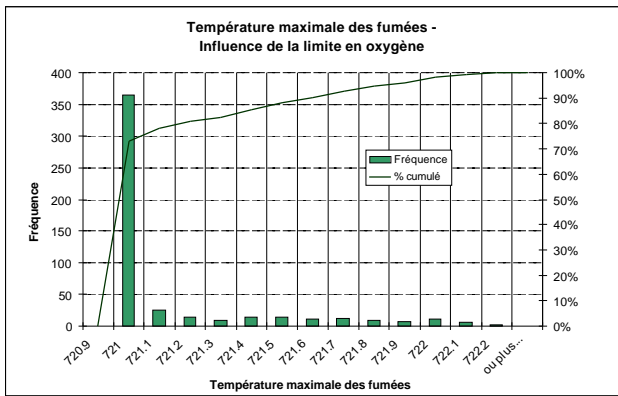
**Hauteur minimale d'interface :**

	Minimum	Moyenne	Maximum	Ecart-type	
Température ambiante	0,622	0,622	0,622	0,000	0,00%
Température extérieure	0,617	0,622	0,628	0,001	0,18%
Pression atmosphérique	0,607	0,621	0,629	0,004	0,67%
Humidité ambiante	0,622	0,622	0,623	0,000	0,02%
Limite O <sub>2</sub>	0,620	0,622	0,622	0,001	0,16%

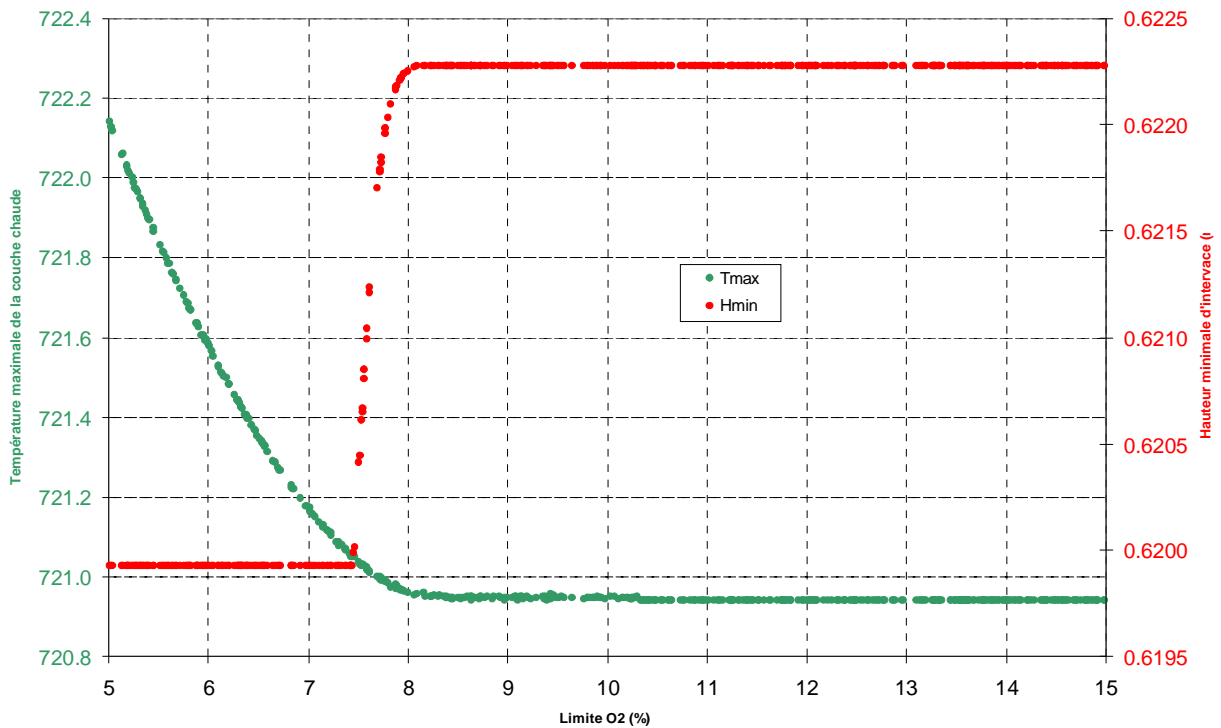
Les sensibilités observées sur la hauteur minimale d'interface sont nettement inférieures. Le principal paramètre influençant celle-ci est la pression atmosphérique, mais l'amplitude de l'influence est de l'ordre de 2 cm.



Les lois de distribution prises par les valeurs de sortie observées en fonction des lois d'entrée pour un paramètre montrent des différences importantes. Le paramètre correspondant à la limite en oxygène pour la combustion montre le comportement le plus atypique dans la situation étudiée, du fait du principe de cette limitation numérique (voir paragraphe 3.2.2). Son comportement est détaillé graphiquement ci-après.



**Effets de la limite en O<sub>2</sub> pour la combustion**



Typiquement, dans le cas étudié, l'influence de ce paramètre se fait sentir pour une valeur comprise entre 7 et 8 %. L'influence est faible en amplitude, mais sa forme est caractéristique d'un comportement discret. La loi de distribution des données de sortie est ainsi non déterminable. Pour la hauteur d'interface, elle s'approche même d'une distribution de Bernouilli.

### Troisième étape : variation simultanée de l'ensemble des paramètres

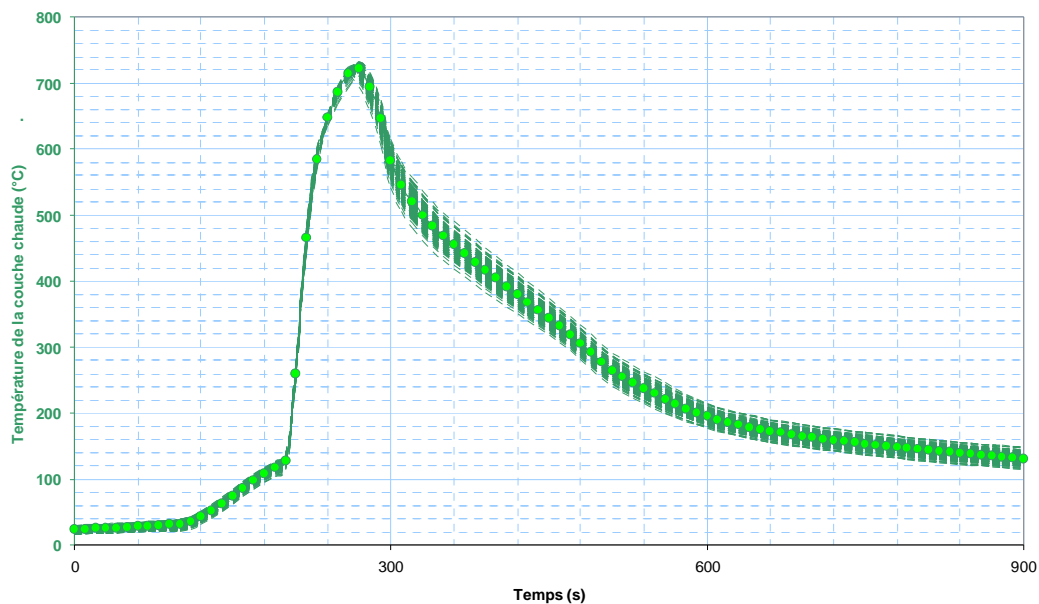
L'analyse détaillée des données de sortie étudiées est reprise ci-après. Afin de rechercher les lois de distribution les plus à-même de traduire les variations observées, trois tests statistiques sont réalisés :

- le test d'ajustement de Kolmogorov-Smirnov, dont le résultat correspond essentiellement à la plus grande distance verticale entre les deux distributions cumulatives. Généralement une valeur moins de 0,03 indique un bon ajustement ;
- le test d'ajustement du Chi-carré (Khi-deux), indiquant l'accord général en décomposant la distribution en secteurs d'égale probabilité et en comparant le nombre d'observations dans ce secteur à celui théorique du secteur. Une valeur supérieure à 0,5 indique un accord du modèle ;
- le test d'Andersen-Darling, proche du test de Kolmogorov-Smirnov mais donnant plus d'importance aux valeurs extrêmes qu'aux valeurs centrales. Une valeur du test de moins de 1,5 indique un ajustement correct.

#### Température maximum de la couche chaude :

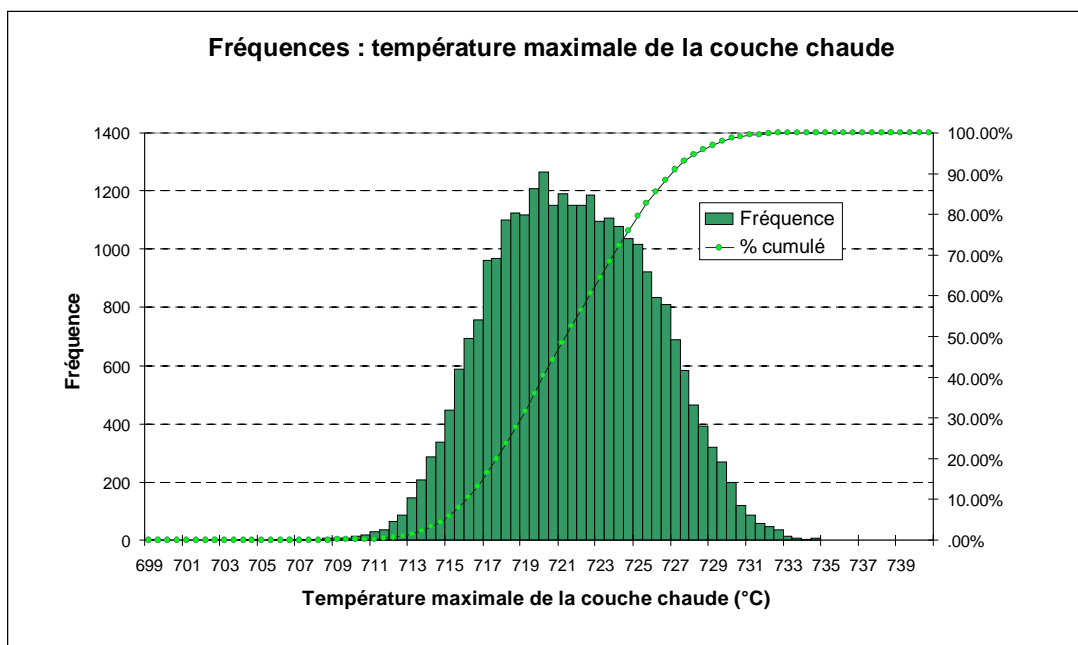
Nombre tirages :	28531	
Valeur minimale :	672,61°C	
Valeur maximale :	738,52°C	
Valeur moyenne :	721,28°C	
Ecart-type :	4,20°C	soit 0,58 %
Valeur de référence	721,07°C	
Ecart moyenne / référence	0,21,	soit 0,029 %

Température de la couche chaude - Résultats

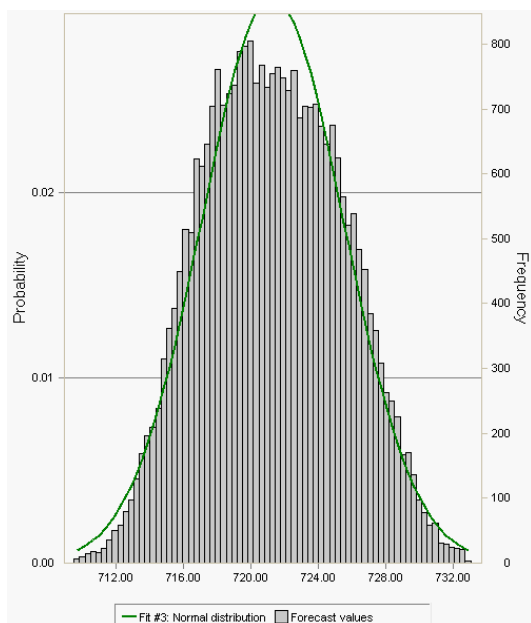


Les résultats graphiques montrent que le point pour lequel les variations les plus importantes sont observées n'est pas le point du maximal de température. Ces résultats montrent que, à certains temps, l'influence des différentes conditions étudiées est notable et s'observe principalement dans la phase de refroidissement.

Note : Sur la représentation graphique, seules les 256 premiers calculs sont présentés.



Recherche de lois de distribution :



Distribution	A-D	Chi-Square	K-S
Beta	34.16	616.37	.02
Lognormal	35.27	628.65	.02
Normal	36.26	633.07	.02
Student's t	39.95	913.55	.02
Logistic	86.58	1719.19	.03
Gamma	147.88	1563.35	.04
Weibull	319.31	4178.72	.07
Triangular	8624.40	40000.80	.46
Pareto	11030.85	226125.19	.55
Exponential	12936.94	2977716.56	.62
Uniform	13831.90	94499.56	.60
Min Extreme	113672.59	1594061.24	.78
Max Extreme	976600.55	3195246.01	1.00

AD : Andersen-Darling  
K-S : Kolmogorov-Smirnov

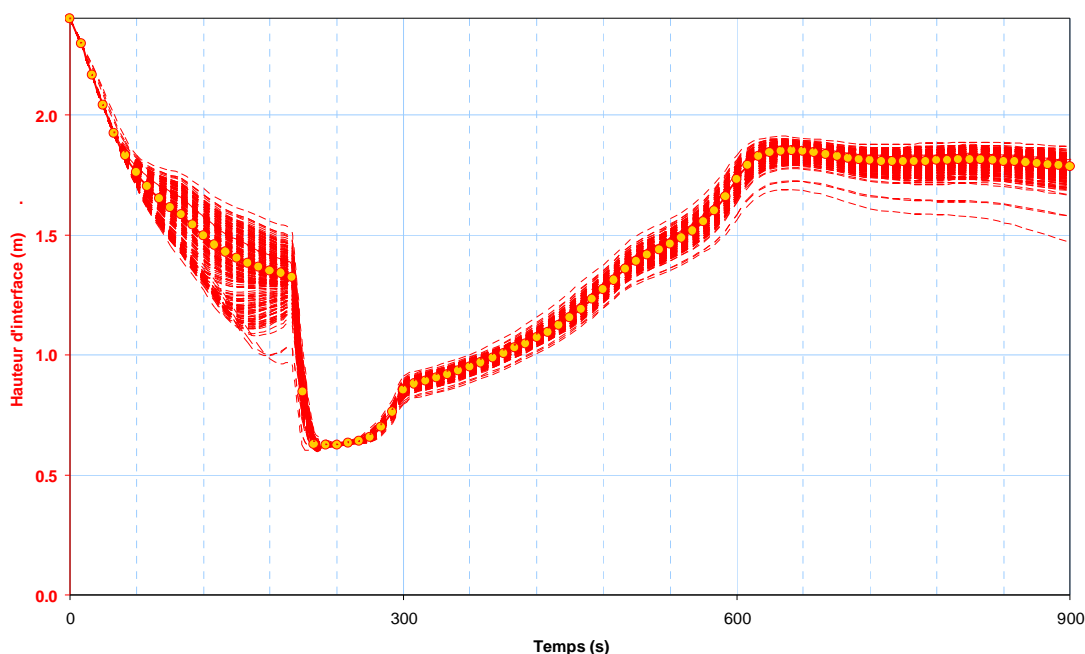
La loi normale donne un agrément non parfait, mais suffisant, tout comme les lois bêta, lognormale ou Student, plus difficiles à utiliser. Les paramètres de sortie donnent une moyenne de 721,28°C et un écart-type de 4,20°C. Dans le cas étudié, si les conditions ambiantes ne sont pas connues, la température maximale des fumées est donc :

$$T_{\max} = (721,28 \pm 8,40) \text{ °C à } 95\% (k=2)$$

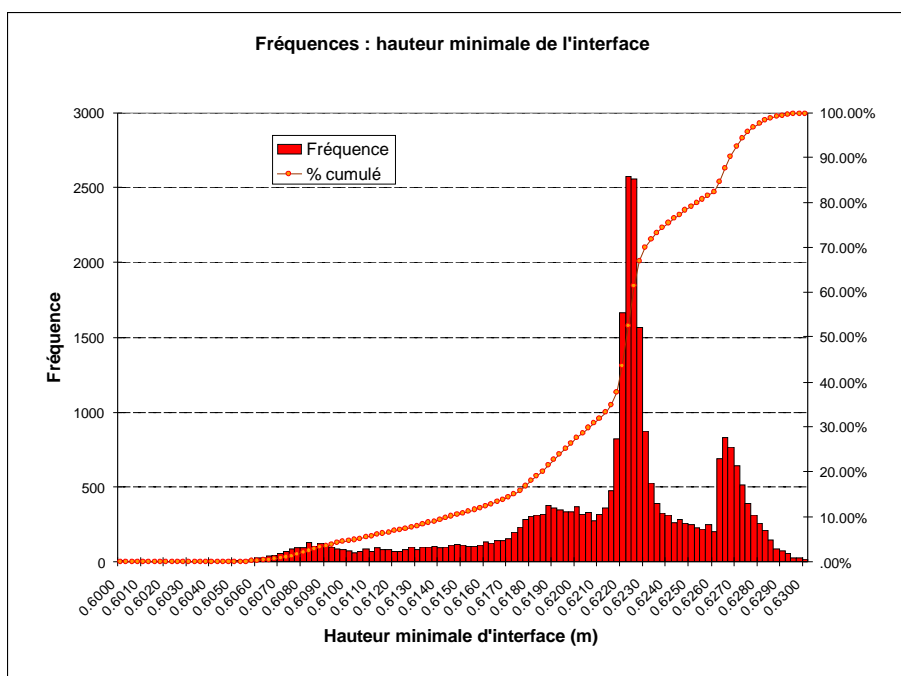
Hauteur minimale de l'interface de fumées

Nombre tirages : 28531  
 Valeur minimale : 0,5785  
 Valeur maximale : 0,6334  
 Valeur moyenne : 0,6213  
 Ecart-type : 0,0048 soit 0,77 %  
 Valeur de référence : 0,6223  
 Ecart moyenne / référence - 0,001, soit 0,16 %

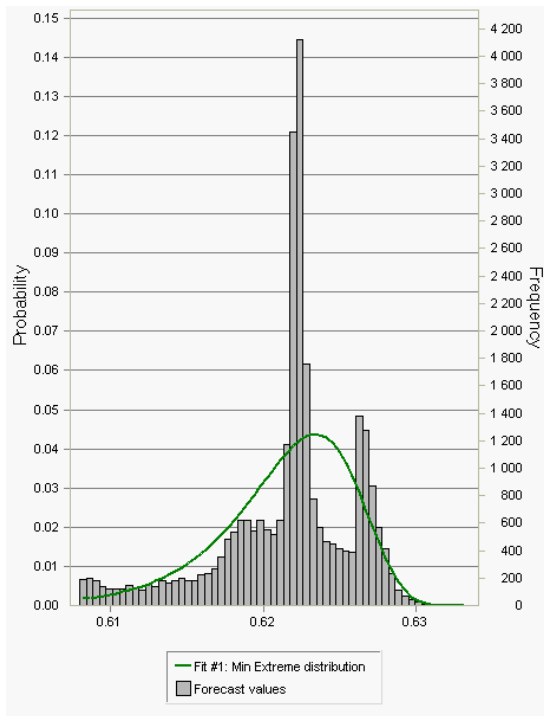
Hauteur d'interface - Résultats



Les résultats graphiques montrent que le point pour lequel les variations les plus importantes sont observées n'est pas le point du minimum de hauteur d'interface. Ces résultats montrent que, à certains temps, l'influence des différentes conditions étudiées est primordiale, en particulier en début de sinistre. En particulier, dans le cas étudié, le temps d'atteinte d'une hauteur de couche chaude donnée peut varier de plus de deux minutes pour des hauteurs de l'ordre de 1,5 m.



## Recherche de lois de distribution :



Distribution	A-D	Chi-Square	K-S
Min Extreme	401.42	19835.48	.11
Weibull	465.91	21500.47	.12
Student's t	485.61	21313.57	.08
Logistic	618.27	24838.38	.12
Beta	694.01	22337.57	.14
Normal	932.28	29913.34	.17
Lognormal	954.64	30240.76	.17
Gamma	1167.20	33458.98	.18
Triangular	8845.38	82448.69	.42
Pareto	10630.63	373855.03	.48
Exponential	12904.84	2569147.88	.62
Uniform	16317.59	164365.68	.56
Max Extreme	976453.31	3195020.03	1.00

AD : Andersen-Darling  
K-S : Kolmogorov-Smirnov

La distribution observée ne correspond à aucune des lois classiques. Elle est asymétrique et produite par la somme de nombreuses lois de natures différentes. En l'absence de loi déterminable, l'effet des paramètres d'entrée est estimé global. Dans le cas étudié, si les conditions ambiantes ne sont pas connues, la hauteur minimale de l'interface des fumées est donc :

$$H_{\min} = \left( 0,6213 \begin{matrix} +0,0121 \\ -0,0428 \end{matrix} \right) m$$

Naturellement, ces conclusions ne sont valables que dans la situation étudiée. Néanmoins, pour des situations proches en termes de géométrie, conditions ambiantes et débit calorifique, ces résultats peuvent être considérés fiables.

### 3.2.4.3 Approche déterministe

Pour comparer les différentes méthodes numériques employées et leur efficacité à simuler les propagations d'incendie, il convient de réaliser un benchmark, avec le même maillage, le même modèle turbulent et le même cas d'incendie. Du fait de la spécificité des modèles, un benchmark complet est souvent impossible.

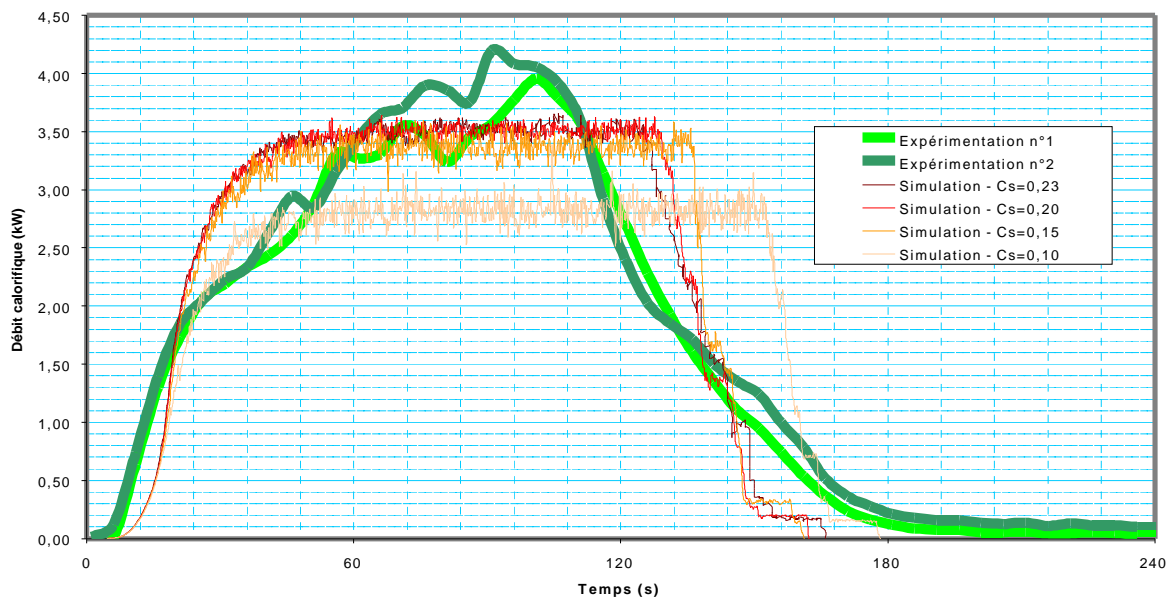
L'approche déterministe consiste alors à étudier, par paramètre et scénario, l'influence que peuvent prendre les données de sortie à partir des données d'entrée choisies. Si les paramètres de sortie étudiés varient de la même manière que le paramètre d'entrée, sans extremum, l'étude peut ne concerner que les effets des valeurs extrêmes de ces paramètres.

Un exemple présenté ci-dessous concerne l'influence de la constante de Smagorinsky, paramètre numérique par excellence, sur une simulation LES simplifiée d'essai au cône calorimètre, réalisée avec le logiciel FDS. La constante de Smagorinsky, reliant la diffusion gazeuse à la viscosité, peut varier entre 0,10 et 0,23 d'après la littérature. La valeur par défaut de l'outil est 0,20.

Validation globale sur le débit calorifique :

	Expérimentation	Calcul			
		0,10	0,15	0,20	0,23
Constante de Smagorinsky	-	0,10	0,15	0,20	0,23
Débit calorifique maximum (kW)	4,1	3,39	3,66	3,64	3,66
Energie totale dégagée (kJ)	≈ 400	387	412	411	412
Délai d'inflammation (s)	≈ 10	9,4	9,2	9,4	9,2
Délai d'extinction (s)	≈ 180	178	161	162	166

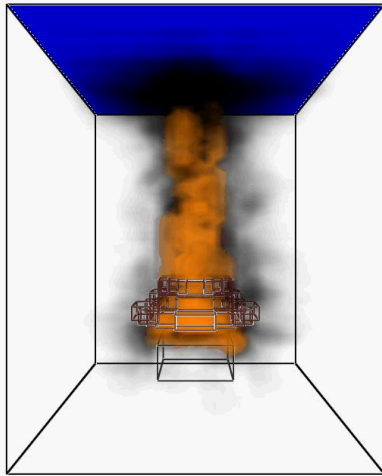
Influence de la constante de Smagorinski sur le débit calorifique



Pour une constante de Smagorinsky de 0,10, la courbe de débit calorifique diffère fortement des autres calculs. Pour les autres valeurs, la simulation converge de manière relativement satisfaisante.

La courbe expérimentale de débit calorifique n'est pas parfaitement reproduite dans ce modèle simplifié, mais le maximum et le dégagement de chaleur totale correspondent et l'approximation peut être satisfaisante dans certaines situations.

Validation locale sur la turbulence de la flamme :



Valeur de la constante de Smagorinsky :

$$Cs = 0,10$$

Le régime est très turbulent et éloigné de la réalité

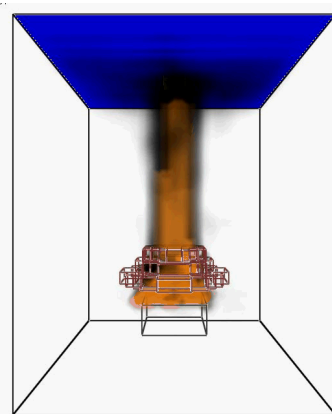
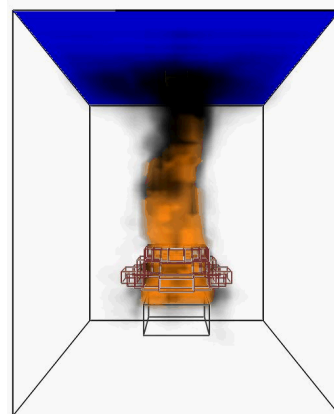
La diffusion des fumées est exagérée par rapport aux observations. La forme de la flamme est alors gouvernée par la diffusion et non par sa flottabilité. La fumée s'échappe en partie latéralement.

Valeur de la constante de Smagorinsky :

$$Cs = 0,15$$

Le régime reste encore très turbulent par rapport aux observations.

La diffusion des fumées est encore importante et se caractérise par un élargissement de la flamme en partie haute. Les fumées se dirigent bien vers le haut et ont un comportement gouverné par leur flottabilité.



Valeur de la constante de Smagorinsky :

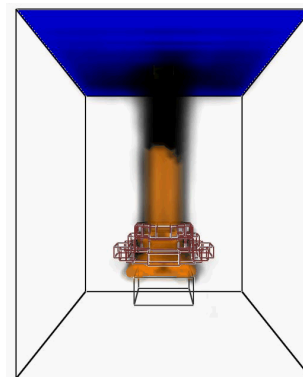
$$Cs = 0,20 \text{ (valeur par défaut)}$$

Le régime est proche des observations. La flamme se resserre au-dessus du four et présente une forme relativement prévisible, avec une partie basse et une partie haute turbulentes. Les fumées diffusent peu.

Valeur de la constante de Smagorinsky :

$$Cs = 0,23$$

Le régime paraît plus laminaire qu'en réalité. La flamme devient une flamme « jet » laminaire et s'écarte des observations. Les fumées ne diffusent pas.



Cet exemple montre ainsi que, dans le cas considéré, des valeurs de la constante de Smagorinsky situées entre 0,15 et 0,23 permettent une étude de sensibilité globale, mais que seule la valeur de 0,20 permet à la fois la validation globale et locale. Il est néanmoins important de considérer que cette détermination de la sensibilité à la constante de Smagorinsky n'est valable que dans le cas étudié.



#### 3.2.4.4 Influence des conditions aux limites

Les conditions aux limites décrivent et fixent les champs de température et de vitesse aux frontières du domaine étudié. Ce peut être par exemple un mur ou une source de fluide. La description d'un élément ou véhicule en mouvement se fait par l'intermédiaire d'un coefficient d'échanges convectif avec l'extérieur et d'une vitesse d'air extérieur. Plus l'élément se déplace rapidement, plus le coefficient d'échange convectif est élevé et donc plus l'élément est refroidi. Comme ce coefficient est empirique, il est souhaitable d'en analyser l'influence.

Plusieurs précautions doivent être prises si on veut modéliser des effets des conditions aux limites, comme le bris d'une vitre et l'apport d'oxygène correspondant. Les conditions aux limites fixées à l'extérieur de l'élément étudié (qui peut être un véhicule en mouvement) doivent engendrer un apport réaliste d'oxygène à l'intérieur.

#### 3.2.4.5 Influence du maillage

Dans les modèles maillés de CFD des codes à champs, comme dans tout calcul de mécanique des fluides, la qualité du maillage est primordiale. L'étape du maillage est une étape clé pour s'assurer de la validité des simulations. C'est l'étape de découpage du volume étudié en petits volumes élémentaires. Le maillage en général n'est pas régulier : les mailles doivent être plus petites dans les zones où les gradients de vitesse, de température ou de concentration vont être les plus importants. Si ces zones ne peuvent pas être prédites, il convient de faire quelques essais itératifs avec ajustement du maillage. En général, les codes de calculs proposent des moyens spécifiques pour mailler les zones de couche limite dans les calculs de transfert thermique.

Une étude de sensibilité au maillage est impérative. Cela consiste à faire des simulations avec un nombre de mailles différent, par exemple 30 % de plus dans les 3 axes du repère. Si les résultats de simulation dépendent du maillage, il convient de resserrer celui-ci jusqu'à obtenir une indépendance entre maillage et solution, c'est à dire la convergence. En effet, pour un maillage pas assez dense, certains phénomènes locaux ne sont pas capturés et l'influence sur les paramètres globaux peut être importante, en particulier lorsque la simulation est utilisée pour des calculs de propagation de front de flamme.

L'utilisation d'un modèle de paroi de turbulence impose d'avoir un  $y^+$  (longueur normée par une unité pariétale) compris entre 30 et 200. On peut néanmoins admettre un nombre maximal égal à 2% de mailles ayant un  $y^+$  inférieur à 15 et un nombre maximal égal à 5% de mailles ayant un  $y^+$  supérieur à 200.

La qualité du maillage se juge également par le rapport d'aspect. Il définit le rapport entre deux longueurs de maille dans une direction quelconque. Il influence directement la stabilité et la convergence d'un calcul. Les précédentes études numériques ont montré que pour avoir un bon calcul, le rapport d'aspect doit être inférieur à 20. Dans tous les cas il doit être inférieur à 50.

A l'heure actuelle, la simulation multi-échelles est impossible du fait de la limitation des puissances de calcul. La taille minimale de maille doit ainsi être supérieure à  $10^{-6}$  fois la taille du domaine. Ainsi pour un domaine de longueur 13 m, la longueur minimale de maille doit être 0,013 mm.

L'un des problèmes majeurs de l'exercice est la variété des échelles. Les structures fluides qu'il convient de représenter avec précision ont une taille qui varie de quelques centimètres (définition de la structure interne de la flamme) à quelques dizaines de mètres.

## 3.3 La validation des modèles

### 3.3.1 Généralités

Le point déterminant pour la validation de modèles de feu est la capacité de mesurer la différence entre des prédictions d'un modèle et des données expérimentales ou entre deux prédictions du modèle ou deux bases de données expérimentales. Les techniques suivantes <sup>[14]</sup> sont utilisées pour comparer des modèles et des expériences, ou comparer des modèles entre eux <sup>[15]</sup> :

- En comparant les résultats fournis par un modèle à des formulations explicites de la physique. Ce type de validation peut être réalisé localement, mais est limité aux modèles les plus simples, pour lesquels une solution analytique est calculable. La solution analytique doit être trouvée à l'aide d'une formule ayant démontré son adéquation avec la situation ou étant d'un niveau physique fondamental.
- En comparant les résultats d'outils entre eux. Si les résultats obtenus à l'aide d'un outil sont en adéquation avec ceux fournis par un autre outil basé sur des modèles et des méthodes de résolution différentes, il est probable que la solution réelle soit proche de ce résultat. Naturellement, une telle comparaison demeure sujette à validation expérimentale, mais la confiance entre les résultats des simulations est accrue. Il est possible de comparer les outils par rapport à un outil déjà validé pour considérer une extension de cette validation.
- En comparant les résultats de l'outil avec des données expérimentales. Dans ce cas, l'incertitude sur les données expérimentales est essentielle, au-moins aussi importante que celle sur les données calculées. Jansen présente dans la référence [12] l'importance de cette incertitude sur les résultats d'essais. L'incertitude sur les données d'entrée a quant à elle fait l'objet de l'étape d'étude de sensibilité du modèle.

La comparaison peut être qualitative, s'attacher à des données fixes, comme un bilan thermique ou un bilan matière, globaux ou locaux. Une méthode plus précise consiste à retenir des points de comparaison locaux et globaux et à réaliser une analyse fonctionnelle des données. Cette analyse permet de comparer des données vectorielles entre elles et permet donc la validation au point considéré durant toute la durée de la simulation. Une technique numérique utilisable est présentée dans le paragraphe suivant, avant de s'intéresser à des exemples d'application.

### 3.3.2 Méthodes de comparaison

#### 3.3.2.1 Principe de l'analyse fonctionnelle

Les moyens utilisés pour comparer des données vectorielles sont issus d'une technique mathématique appelée analyse fonctionnelle. L'analyse fonctionnelle est une généralisation de l'algèbre linéaire, analytique, et géométrie. C'est un champ d'étude qui est apparu en 1900 du travail de Hilbert. Les problèmes sont décrits dans une notation vectorielle et les opérations sur ces vecteurs peuvent être définies pour autoriser une analyse quantitative des propriétés du système physique. Les opérations vectorielles fondamentales sont la norme, une mesure de la longueur d'un vecteur, et produit interne, une mesure de l'angle entre deux vecteurs.

Le produit vectoriel se définit par  $\langle x, y \rangle$ , qui définit une relation fondamentale entre deux éléments  $x$  et  $y$  appartenant à un espace de Hilbert et  $\mathfrak{R}$ . La norme se définit par un nombre associé à un vecteur : les propriétés sont les suivantes :

	Produit vectoriel	Norme
I	$\langle x, x \rangle \geq 0$	$\ x\  \geq 0$
II	$\langle x, x \rangle = 0 \Leftrightarrow x = 0$	$\ x\  = 0 \Leftrightarrow x = 0$
III	$\langle \alpha x, y \rangle = \alpha \langle x, y \rangle$	$\ \alpha x\  =  \alpha  \ x\ $
IV	$\langle x + y, z \rangle = \langle x, z \rangle + \langle y, z \rangle$	$\ x + y\  \leq \ x\  + \ y\ $
V	$\langle x, y \rangle = \overline{\langle y, x \rangle}$	

La représentation symbolique qui relie les normes au produit vectoriel s'écrit ainsi :

$$\|x\| = \sqrt{\langle x, x \rangle}$$

Et on définit le cosinus de deux vecteurs par :

$$\cos(x, y) = \frac{\langle x, y \rangle}{\|x\| \|y\|}$$

Ainsi un cosinus de 0.99 signifie que les vecteurs seront pratiquement colinéaires.

Pour obtenir une comparaison de deux courbes en fonction du temps ou d'un autre paramètre, la comparaison des points uniques ou scalaire est étendue à celle des points multiples. Chacune de ces courbes peut être représentée comme un vecteur multidimensionnel, avec chaque point définissant une dimension supplémentaire. Dans ce cas,  $x$  est la notation pour le vecteur  $n$ -dimensionnel  $(x_1, x_2, x_3, \dots, x_{n-2}, x_{n-1}, x_n)$ .

Toutes les données issues d'un essai peuvent aussi être représentés par un vecteur de valeurs mesuré à chaque point du temps,  $E$ . Les prédictions du modèle aux mêmes points du temps peuvent être représentés par un vecteur  $m$ . La distance entre deux vecteurs est simplement la longueur du vecteur qui résulte de la différence de deux vecteurs  $\|E - m\|$ . Il est commode de normaliser ceci comme une

différence relative aux données expérimentales soit :  $\frac{\|E - m\|}{\|E\|}$ .

### 3.3.2.2 Définition dans les espaces discrets des normes utilisées

La norme la plus généralement employée est la norme euclidienne :

$$\|x\| = \sqrt{\sum_{i=1}^n x_i^2}$$

De même, on définit le produit vectoriel associé par  $\langle x, y \rangle = \sum_{i=1}^n x_i y_i$

Nous pouvons également introduire des produits vectoriels d'Hellinger des espaces pour des fonctions où  $x(0)=0$

$$\langle x(t), y(t) \rangle = \int_0^T x'(t) y'(t) dt$$

où  $x'$  et  $y'$  sont les dérivées premières des fonctions  $x$  et  $y$  en notation vectorielle. Cela donne, sur la base des différences du premier ordre :

$$\langle\langle x, y \rangle\rangle^{\mathbf{r}} = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - x_{i-1})(y_i - y_{i-1})}{(t_i - t_{i-1})}$$

Il est également possible d'utiliser les courbures des courbes :

$$\langle\langle x(t), y(t) \rangle\rangle = \int_{pT}^T \frac{(x(t) - x(t - pT))(y(t) - y(t - pT))}{(pT)^2} dt$$

avec  $0 < p < 0,5$ . Quand  $p$  tend vers 0 on retrouve l'intégrale précédente.  $p$  représente la puissance de lissage utilisée pour la comparaison. Pour une résolution vectorielle ou dans un espace discret, on trouve la forme suivante de la norme dite sécante ou de courbure :

$$\langle\langle x, y \rangle\rangle^{\mathbf{r}} = \frac{\sum_{i=1,s}^n (x_i - x_{i-s})(y_i - y_{i-s})}{t_i - t_{i-s}}$$

Pour  $s=1$  on retrouve le produit vectoriel d'Hellinger. La valeur de  $s$  donne un filtrage de la fonction étudiée et permet d'étudier les macro-évolutions. Cela permet de filtrer les signaux contenant du bruit à petite échelle. On peut également prendre la somme de deux normes (c'est une norme) et les pondérer. On obtient le produit ou norme hybride suivante :

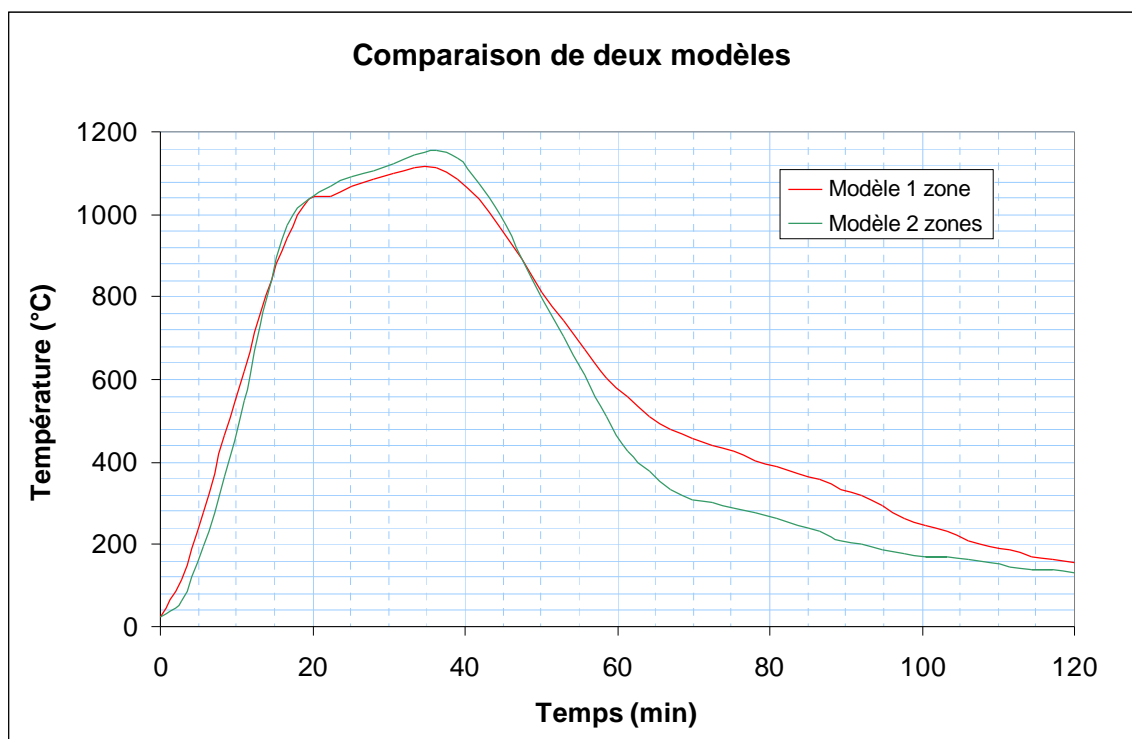
$$\langle\langle x, y \rangle\rangle^{\mathbf{r}} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i y_i + \frac{1}{n-s} \frac{\sum_{i=1,s}^n (x_i - x_{i-s})(y_i - y_{i-s})}{t_i - t_{i-s}}$$

En général, le cosinus calculé avec la norme euclidienne ne fournit pas beaucoup de différenciation entre les prédictions des modèles. Les normes Hellinger et les normes Hybride fournissent une gamme de cosinus plus large puisqu'elles comparent spécifiquement les formes de l'expérience et les modèles. Pour une comparaison pondérée des courbes et des valeurs, la norme hybride est la plus adaptée.

### 3.3.3 Exemples de validations

#### 3.3.3.1 Comparaison d'outils pour des études simplifiées

Le présent exemple présente la validation d'outils entre eux. Il a été présenté dans la référence [34]. Les deux outils concernés sont un modèle une zone et un modèle 2 zones dans une situation de feu développé. Les données issues des deux calculs sont présentées ci-dessous :



L'analyse fonctionnelle a été réalisée pour différentes normes. Dans l'analyse, le vecteur  $\vec{x}$  désigne les données issues du modèle à une zone et le vecteur  $\vec{y}$  les données issues du modèle à deux zones. Les résultats sont résumés dans le tableau suivant :

Nombre de points de comparaison : 43

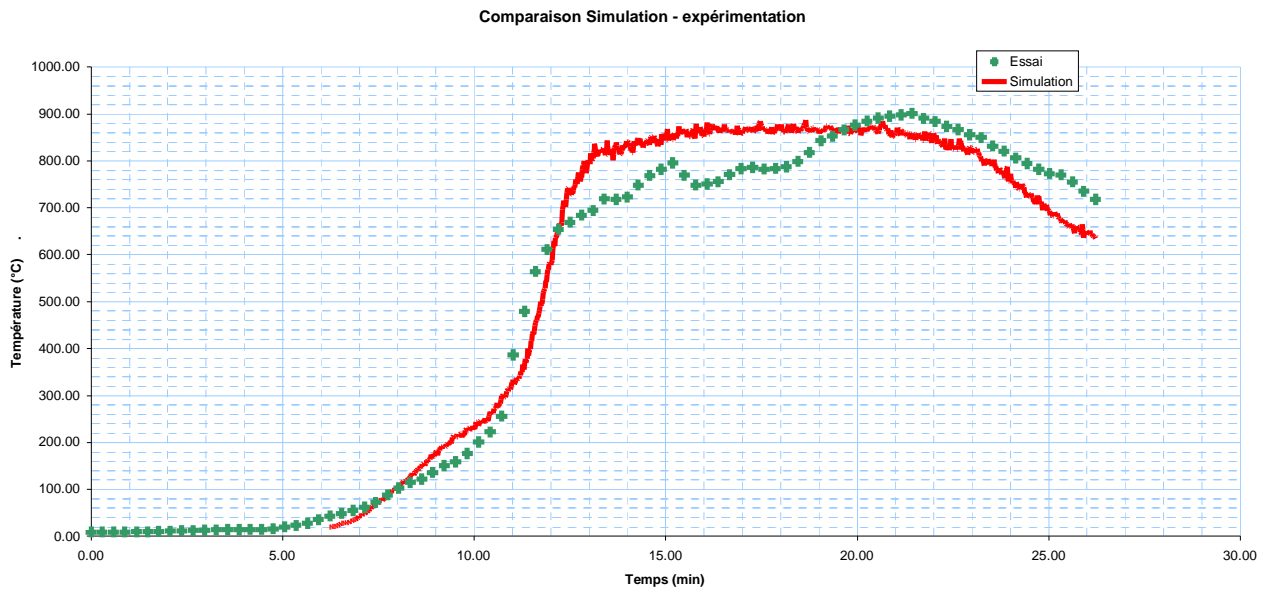
Grandeur	Norme Euclidienne	Norme Hellinger	Norme Sécante s=5	Norme Hybride
$\vec{x}$	4355	34,53	71,15	672
$\vec{y}$	4220	38,28	75,15	651
Ecart relatif (%)	3,1 %	- 10,8 %	- 6,4 %	3,1 %
Cos( $\theta$ )	0,993	0,975	0,985	0,993

Pour l'ensemble des normes, l'écart relatif reste faible et le déphasage proche de 1. Les deux courbes montrent donc une reproduction du phénomène correcte.

### 3.3.3.2 Validation d'un modèle champ sur un foyer prescrit

Les données présentées proviennent d'essais réalisés au CTICM, afin de valider une situation de feu développé de chambre d'hôtel, en comparant les données expérimentales obtenues en calorimétrie à grande échelle sur une maquette à l'échelle 1 avec une simulation champ à source prescrite<sup>[35] [36]</sup>. L'analyse des données a été réalisée au LNE. Dans l'analyse, le vecteur  $x$  désigne les données expérimentales et le vecteur  $y$  les données issues du calcul.

La comparaison porte sur les données suivantes :



Nombre de valeurs analysées : 499  
 Etendue de l'analyse : de 376 à 1550 s

Grandeur	Norme Euclidienne	Norme Hellinger	Norme Sécante s=5	Norme Hybride
$\ x\ $	11 927,6	10,74	11,53	597,9
$\ y\ $	12211,1	8,40	12,10	612,1
Ecart relatif (%)	-2,4 %	21,8 %	-4,9 %	-2,4 %
Cos( $\theta$ )	0,996	0,252	0,744	0,996

Les résultats obtenus par la norme euclidienne montrent que la reproduction des valeurs est bien réalisée sur l'ensemble de la courbe.

Les résultats obtenus sur la norme Hellinger ne sont pas significatifs, car les données issues du calcul sont nombreuses, bruitées et en plateau, ce qui engendre des perturbations dans les niveaux et les positions des courbures. Un tel niveau de bruit n'est pas reproduit par la mesure du fait de l'inertie des thermocouples.

La norme sécante, permettant de caractériser les courbures après lissage, ne montre pas de résultats idéaux : un écart significatif est observé sur l'écart relatif et le cosinus n'est pas bon, ce qui montre que les points d'inflexion des courbes sont globalement séparés. En effet, les maximum sont décalés, et la courbe calculée ne montre qu'un seul point d'inflexion sur la courbe, alors que plusieurs sont observés expérimentalement. Plus la valeur du filtrage augmente et moins cet effet est sensible, les inflexions locales étant minorées.

La norme hybride permet de pondérer ces deux phénomènes (courbures et valeurs). Dans ce cas, l'accord entre les valeurs a nettement plus de poids que celui sur les courbures et la pondération montre que, globalement, les résultats sont bien corrélés, en moyenne à 5 % environ ( $\sigma=2,4$  %). La validation est tout à fait satisfaisante devant les incertitudes expérimentales et les résultats du modèle pour ce paramètre et cette situation peuvent être utilisés en toute confiance.

### 3.3.3.3 Validation d'un modèle champ sur une attaque thermique

L'exemple ci-dessous montre l'illustration la validation d'une attaque thermique lors de l'essai au SBI selon la norme EN 13823 pour les produits de construction.

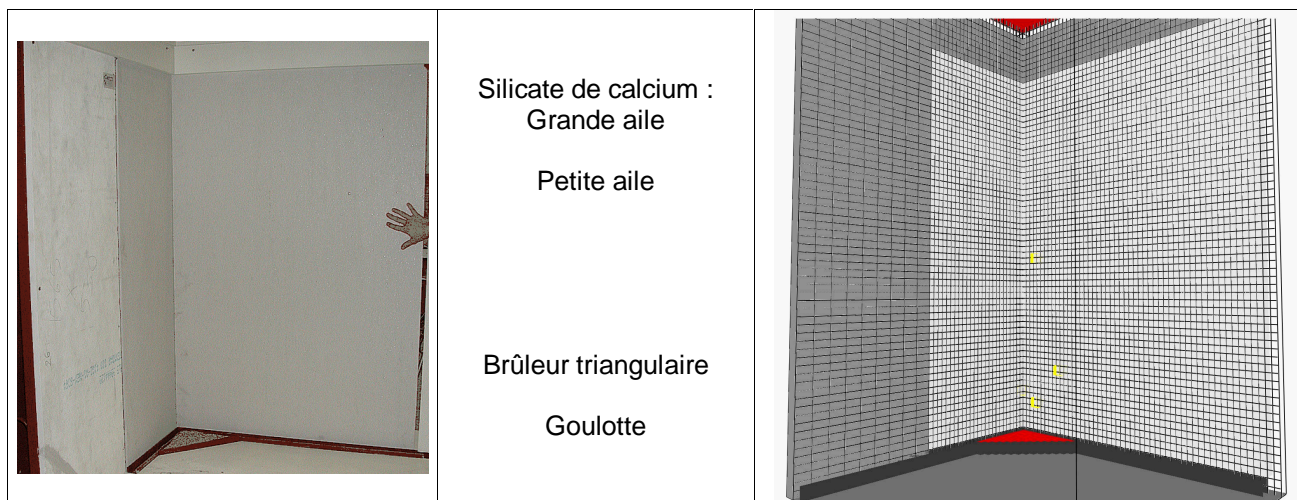
#### Modélisation du système étudié

L'objectif est de modéliser la source constituée par un brûleur de 30,7 kW au propane, et de valider l'attaque thermique produite par cette flamme sur un support inerte de silicate de calcium. Le domaine considéré représente un volume de 1,04 m x 1,04 m x 1,75 m pour 139 968 mailles. Dans la zone de combustion, les mailles sont raffinées pour atteindre la taille de cubes de 2 cm de côté. L'outil numérique est le logiciel FDS.

Les principales difficultés d'une telle modélisation sont :

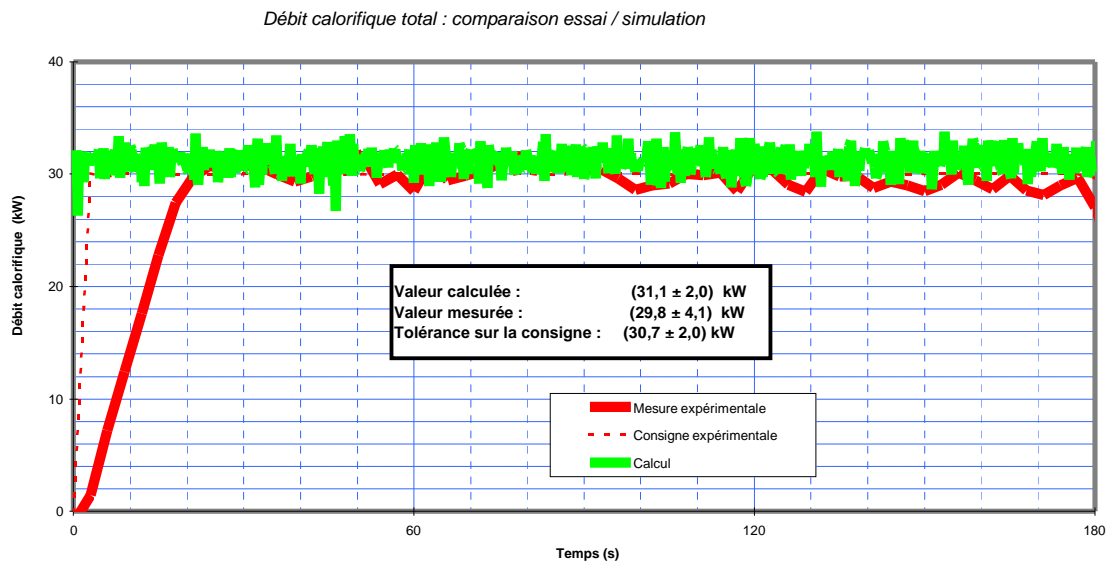
- l'appel d'un modèle mixture fraction dans une situation détaillée de flamme, qui peut rendre difficile la résolution spatiale de la flamme de diffusion de propane ;
- l'utilisation d'une grille parallélépipédique pour reproduire la forme triangulaire du brûleur de la norme EN 13823

La modélisation de l'espace est présentée ci-dessous :



## Validation globale

Une première validation globale est réalisée sur les bilans énergie et matière. Le brûleur doit reproduire une attaque dont la valeur moyenne est dans l'intervalle de  $(30,7 \pm 2,0)$  kW. Les résultats sont présentés ci-dessous :



Dans le calcul comme dans le cas expérimental, la valeur moyenne obtenue est dans la tolérance exigée par la norme. Expérimentalement, la valeur moyenne obtenue après stabilisation est de  $(29,8 \pm 4,1)$  kW. Le calcul donne une valeur de  $(31,1 \pm 2,0)$  kW. La cinétique de montée en puissance observée expérimentalement est liée au principe de mesure (consommation d'oxygène) et à la diffusion du gaz entre le point d'émission de la flamme et le point de mesure. Elle correspond à un artéfact expérimental et seules les valeurs en régime stabilisé sont considérées dans le calcul.

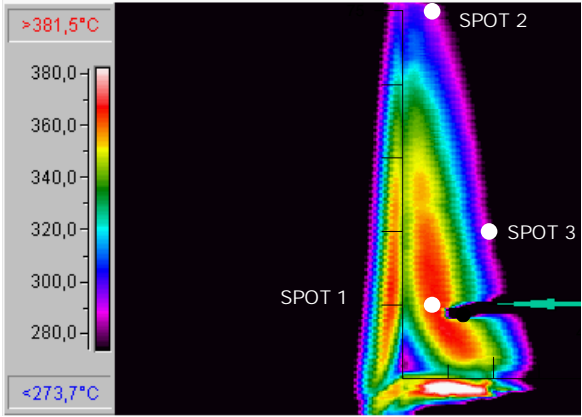
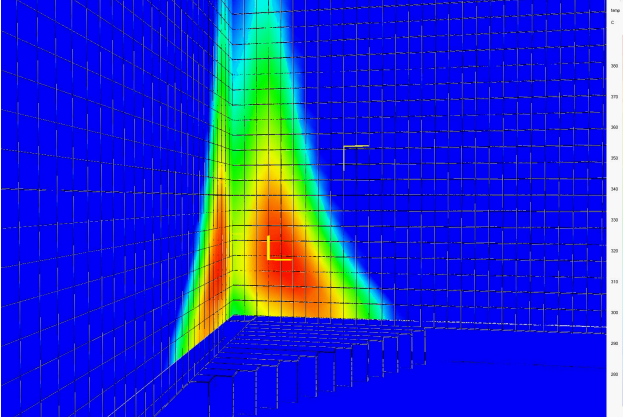
Une fois ce niveau atteint, la validation locale est réalisée d'une part sur les températures de surface de la plaque de silicate de calcium recevant le flux, et d'autre part sur des mesures de flux thermique à plusieurs points de mesure ou de comparaison. Ces points sont placés sur la grande aile en essai de la manière suivante :

- Le point 1 est situé à 8 cm horizontalement et à 16 cm verticalement (point de mesure) ;
- Le point 2 est situé à 8 cm horizontalement et à 75 cm verticalement (point de mesure) ;
- Le point 3 est situé à 20 cm horizontalement et à 30 cm verticalement (point de mesure) ;
- Le point 4 est situé à 8 cm horizontalement et à 30 cm verticalement (point de comparaison) ;
- Le point 5 est situé à 8 cm horizontalement et à 45 cm verticalement (point de comparaison).

La validation locale sur les températures de surface est réalisée à l'aide d'une caméra infrarouge calibrée, en spécifiant l'émissivité du support afin de travailler en température vraie. La mesure a été réalisée après extinction du brûleur, 30 secondes après un échauffement de 5 minutes.



La comparaison est présentée ci-dessous :

Données expérimentales	Données calculées
 <p>Les graduations verticales sont placées tous les 15 cm. Les graduations horizontales sont placées tous les 10 cm.</p>	
<p><u>Mesures aux points</u></p> <p>Point 1 :        <math>(370 \pm 10) ^{\circ}\text{C}</math>                    (spot 1)            Point 2 :        <math>&lt; 280 ^{\circ}\text{C}</math>                                (spot 2)            Point 3 :        <math>&lt; 280 ^{\circ}\text{C}</math>                                (spot 3)</p> <p>Point 4 :        <math>(350 \pm 10) ^{\circ}\text{C}</math>            Point 5 :        <math>(330 \pm 10) ^{\circ}\text{C}</math></p>	<p><u>Calculs aux points</u></p> <p>Point 1 :        <math>377,5 ^{\circ}\text{C}</math>            Point 2 :        <math>233,5 ^{\circ}\text{C}</math>            Point 3 :        <math>177,0 ^{\circ}\text{C}</math></p> <p>Point 4 :        <math>350^{\circ}\text{C}</math>            Point 5 :        <math>320^{\circ}\text{C}</math></p>
<p><u>Observations :</u></p> <p>La zone froide dans l'angle, au niveau du brûleur est liée à l'absence d'air d'alimentation, et donc de flamme dans cet espace. Elle est bien reproduite par le calcul</p>	

La validation sur les flux thermiques est reprise pour trois points de mesure. Les données expérimentales proviennent d'essais interlaboratoires et intègrent ainsi la reproductibilité. Elles correspondent à une moyenne de flux net d'un capteur refroidi par eau à 20°C sur les mesures de la 4<sup>ème</sup> à la 5<sup>ème</sup> minutes de l'échauffement de 5 minutes.

	Données expérimentales	Données calculées
Point 1	$(54,8 \pm 7,2) \text{ kW/m}^2$	56,6 kW/m <sup>2</sup>
Point 2	$(21,0 \pm 4,2) \text{ kW/m}^2$	17,1 kW/m <sup>2</sup>
Point 3	$(14,0 \pm 2,7) \text{ kW/m}^2$	10,1 kW/m <sup>2</sup>

L'incertitude inhérente au modèle dans cette validation est inférieure à l'intervalle de confiance considéré.

### 3.3.3.4 Validation d'un modèle de pyrolyse sur une simulation d'essai à petite échelle

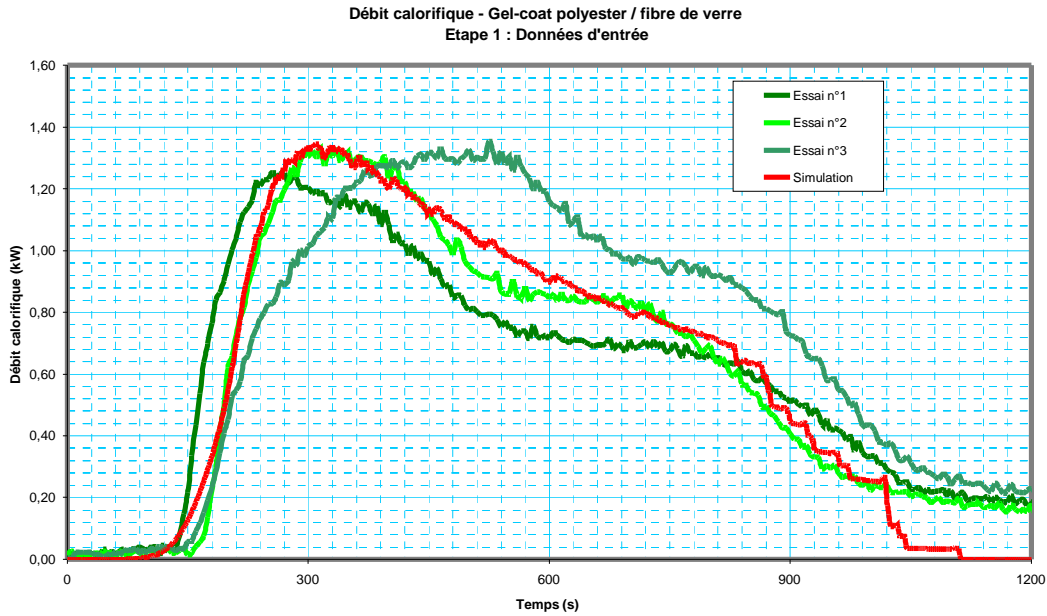
L'exemple ci-dessous montre l'illustration la validation d'un modèle de pyrolyse d'outil champ selon la norme ISO 16730, où des données de simulation sont comparées avec un jeu de données expérimentales. Les données expérimentales sont issues de trois essais au cône calorimètre, sur un produit générant une courbe de débit calorifique complexe. Les résultats du calcul proviennent d'une modélisation sous FDS du même essai, à partir de données d'entrée issues de caractéristiques fondamentales du produit. La validation est étudiée sur le bilan énergie global.

#### 1) Paramètres de simulation

Le matériau étudié est un Gel-coat polyester / verre. Les données d'entrée, issues de caractérisations expérimentales, sont présentées dans le tableau suivants :

	Paramètre	Valeur
<b>Réaction chimique</b>	Coefficient stœchiométrique du combustible	1
	Coefficient stœchiométrique de CO <sub>2</sub>	50
	Coefficient stœchiométrique de H <sub>2</sub> O	35
	Coefficient stœchiométrique de O <sub>2</sub>	62
	Masse molaire du combustible (g/mol)	846
	Ratio radiatif	0,302
	Taux de production de suies (g/g)	0,032
<b>Paramètres produit</b>	Epaisseur (mm)	8
	Densité (kg/m <sup>3</sup> )	2000
	Capacité thermique massique moyenne (kJ/kg.K)	1,1
	Conductivité thermique moyenne (W/m.s)	0,6
<b>Données du modèle de combustion</b>	Emissivité	0,8
	Température d'inflammation pilotée (°C)	488
	Débit critique de perte de masse (kg/m <sup>2</sup> .s)	0,02
	Teneur en combustible	25 %
	Teneur en eau	5 %
	Enthalpie de gazéification (kJ/kg)	3000
	Enthalpie de combustion (kJ/kg.K)	18000
	Modèle de combustion appelé	CHAR
	Densité des charbons (kg/m <sup>3</sup> )	100
	Capacité thermique massique des charbons (kJ/kg.K)	0,68 à 20°C
		1,50 à 400°C
		1,80 à 900°C
	Conductivité thermique des charbons (W/m.s)	0,077 à 20°C
		0,16 à 900°C

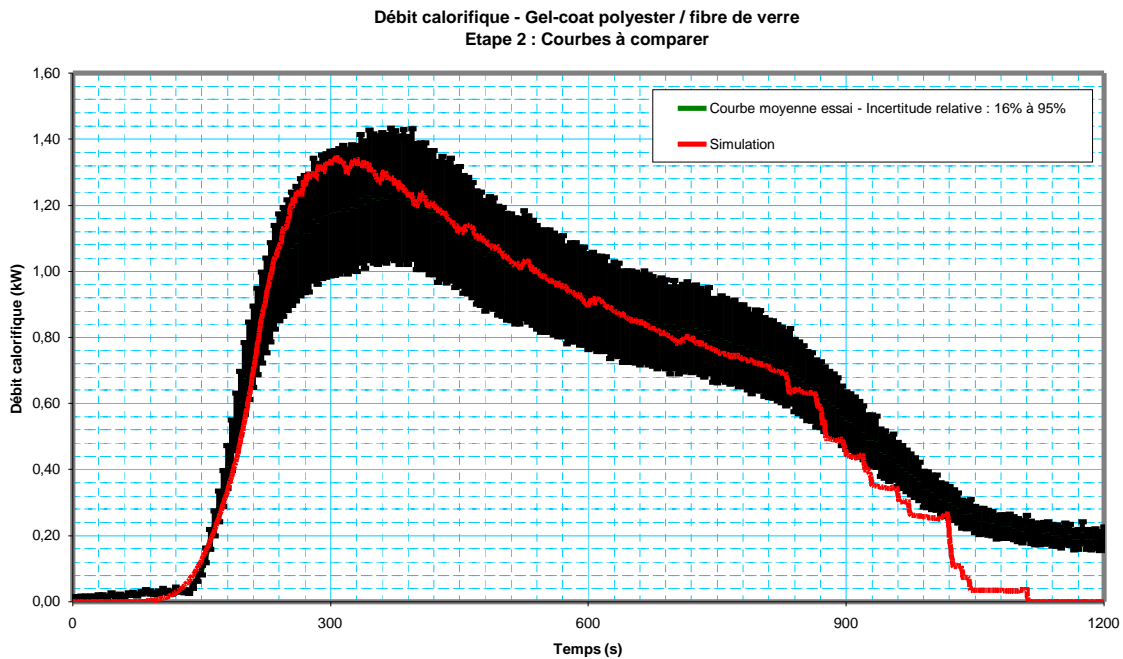
## 2) Données à analyser : trois courbes expérimentales et un résultat de calcul



## 3) Traitement des données à comparer

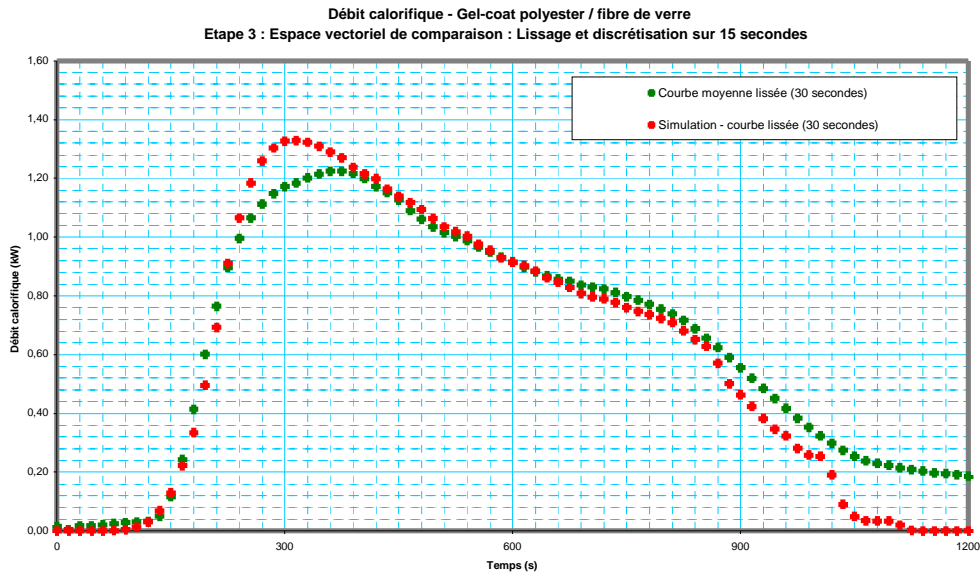
Une courbe expérimentale moyenne est calculée. Son incertitude inclut les incertitudes expérimentales individuelles et l'écart-type entre les trois valeurs obtenues à chaque pas de temps.

Note : Une dérive expérimentale est visible dans le cas présent. Celle-ci n'est pas considérée dans l'exemple de calcul.



#### 4) Discrétisation des données à comparer

La comparaison doit comparer des espaces vectoriels équivalents. Un pas de temps commun est alors choisi et les vecteurs à comparer sont constitués chacun comme étant à n dimensions, n désignant le nombre de valeurs discrétisées.



#### 5) Calculs des paramètres

Dans les différents espaces vectoriels, les calculs sont réalisés afin de déterminer les normes et produits scalaires, et de déterminer les quantités représentées par le cosinus et la différence relative entre les valeurs. Le cosinus représente la colinéarité des vecteurs, c'est à dire dans ce cas l'accord de forme des courbes. La différence relative traduit l'écart en valeurs entre les deux courbes. Ces deux paramètres permettent une comparaison fiable.

Le tableau ci-dessous reprend les résultats obtenus :

Grandeur	Norme Euclidienne	Norme Hellinger	Norme Hybride
$\ x\ $	6,79	0,108	0,75
$\ y\ $	6,86	0,125	0,76
Ecart relatif (%)	-1,02 %	-15,98 %	-1,02 %
$\text{Cos}(\theta)$	0,992	0,92	0,992

Dans le cas présent, en considérant la norme hybride, on constate une très bonne colinéarité des vecteurs, donc des courbes très proches en forme et en valeur. La norme Euclidienne traduit cet accord en valeurs et la norme Hellinger celle en courbures. L'écart relatif est extrêmement faible et montre un désaccord entre valeurs de l'ordre de 1 %.

### 3.4 Exigences relatives à un rapport de simulation

Un rapport d'étude par simulation doit contenir tous les éléments nécessaires à une contre-expertise et un avis sur étude. Des modalités sont reprises dans les documents de la commission de normalisation X B50 « Essais et autres démonstrations »<sup>[31][32]</sup>.

Entre autres, le rapport de calcul doit préciser les données d'entrée, à savoir :

- La géométrie complète des environnements et des dispositifs de ventilation ;
- Les débits de ventilation, de soufflage ;
- Les propriétés des matériaux et produits constituant les combustibles (foyers) ;
- Les propriétés des matériaux et produits constituant l'environnement et pouvant absorber ou ré-émettre de la chaleur (parois...) ;

Les paramètres numériques et techniques sur les modèles employés doivent aussi figurer :

- Les modèles de turbulence employés ;
- Les modèles de transfert de chaleur gaz-solide, convectif et conduit ;
- Les modèles de radiation pour les flammes, les solides et les fumées (multi-bande, corps gris...) ;
- Le modèle de production de gaz et de suies, son lien avec le modèle de production de chaleur (courbe de débit calorifique, de débit fumigène, propagation calculée...) ;
- Toutes les relations mathématiques utilisées peuvent être présentées en annexe ;

A partir des données décrites précédemment, le destinataire du rapport doit être capable de comprendre :

- La manière dont les simulations sont recalées par rapport aux essais ;
- Le modèle de combustion et éventuellement le modèle de pyrolyse et leurs futurs développements ;
- Les effets de sensibilité et d'incertitude sur les résultats, afin de connaître les limites de la validité des conclusions et la confiance à laquelle elles sont soumises.

## 3.5 Exemple de benchmark d'outils

### 3.5.1 Présentation d'un cahier d'exigences

L'exemple de comparaison des outils se base sur les réponses techniques à un cahier des charges et des résultats de simulation réalisée en aveugle sur un cas expérimental. Ce cahier des charges a pour but de réaliser des calculs de CFD dans des environnements ferroviaires, avec les ventilations réelles reproduites, à l'aide d'outils comportant un modèle de pyrolyse. Du fait de la confidentialité des données expérimentales considérées, celles-ci et les résultats définitifs ne sont pas présentés.

Les critères d'exigence retenus sont résumés dans le tableau suivant :

Critère	Exigence	Flexibilité
Spécification sur les données d'entrées	Les données d'entrées issues d'essais réalisés sur les matériaux sont utilisées en priorité. Le recours aux valeurs issues de la littérature est limité.	Négociable
Spécification sur le modèle d'écoulement fluide	Les équations de Navier-Stokes, ainsi que les équations de conduction dans les solides devront être résolues dans les conditions caractéristiques d'un incendie. La méthode de simulation est aussi importante que le résultat final attendu. Cette partie reprend les schémas directeurs pour correctement modéliser une combustion solide. Elle détaille la manière dont doivent être utilisés : <ul style="list-style-type: none"> <li>• les données d'entrées</li> <li>• le modèle d'écoulement fluide</li> <li>• le modèle de turbulence</li> <li>• le modèle de combustion</li> <li>• le modèle de radiation</li> <li>• les suies</li> <li>• les spécifications de la méthode numérique</li> <li>• les caractéristiques des données de sortie</li> <li>• les critères pour valider les calculs</li> </ul>	Non négociable  Le choix du type de résolution de la turbulence reste à la discrétion de l'utilisateur
Spécification du modèle de combustion	Des équations de bilan sont résolues pour les solides combustibles et pour la concentration en oxygène. Pour chaque produit combustible, un modèle de pyrolyse dépendant de la teneur en oxygène et de la température est introduit. Dans l'équation locale du bilan d'énergie, un terme de production de chaleur sera introduit pour chaque produit combustible.	Non négociable
Spécification du modèle de radiation	Le modèle doit tenir compte de tous les échanges radiatifs, en particulier de celui lié à la présence de suies. Si une formulation en $T^4$ est utilisée, le modèle doit différencier le rayonnement à l'intérieur de la flamme de celui externe à la flamme.	Non négociable
	Une formulation locale dans la flamme basée sur le ratio de débit calorifique est souhaitable	Négociable
Spécifications des produits de combustion et des suies	L'équation de transport peut être résolue en considérant un terme de production des espèces proportionnel au taux de combustion Une équation de transport par espèce est souhaitable Une équation de conservation doit être résolue pour la production et le transport du carbone imbrûlé (suie). Le taux de production de suies peut être proportionnel au taux de combustion, et dépendant du matériau considéré	Négociable  Non négociable
Spécification des conditions aux limites	Les conditions aux limites doivent pouvoir évoluer.	Non négociable
	La simulation d'un bris de glace doit demeurer possible	Négociable
Spécification sur les données de sorties	Les données de sortie doivent comporter les caractéristiques globales et locales sur les flux thermiques, les températures et les données aérodynamiques. Elles doivent comporter les informations sur les espèces présentes dans les mailles gazeuses	Non négociable
	La visibilité et la toxicité doivent être modélisables	Négociable
Critères de validation des résultats obtenus	Des critères de validation des résultats doivent être prévus (Température limite, nombre de Froude, Divergence)	Non négociable
	Les bilans massiques sont bien vérifiés (en particulier la ventilation)	Non négociable
Spécifications sur les rapports	Les éléments présents dans les rapports doivent permettre la validation, la tierce expertise et la conduite de nouvelles simulations	Négociable
Spécification sur le logiciel	La viabilité des codes est un paramètre essentiel et une proposition de maintien doit être réalisée à ce sujet	Négociable
	Les codes doivent rester compatibles avec les évolutions	Non négociable

### 3.5.2 Évaluation des outils

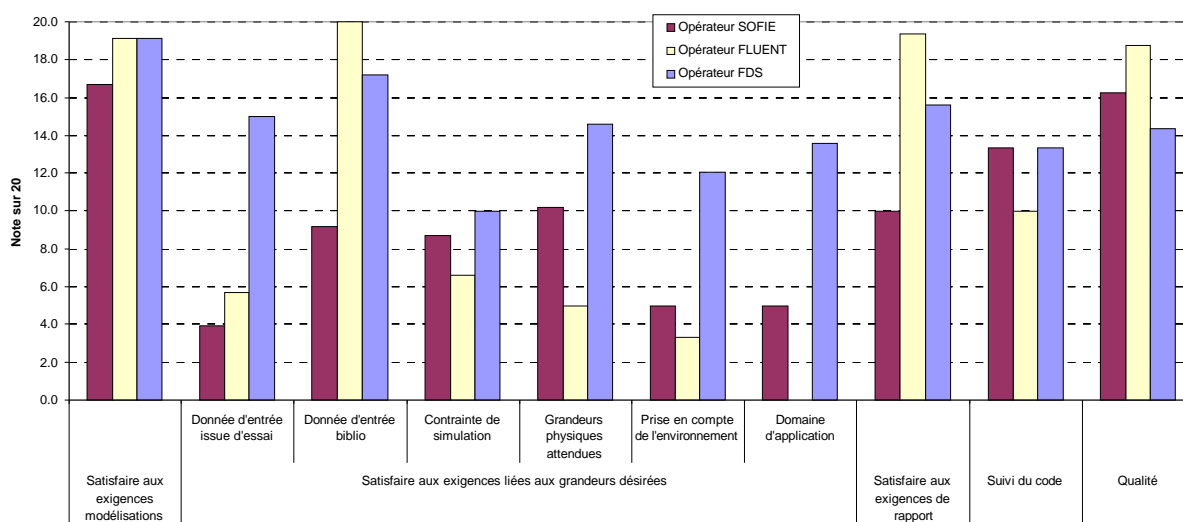
Les outils soumis au Benchmark sont SOFIE/JASMINE, FDS et FLUENT. Les résultats considérés ne sont valables que dans la situation spécifiée, en considérant non seulement les outils, mais aussi les capacités de mise en œuvre de chacun d'entre eux. Ainsi, pour une autre application ou un autre besoin dans la même configuration, voire pour un même logiciel avec différents utilisateurs, les résultats obtenus auraient été différents.

Les résultats du benchmark sont repris ci-dessous :

#### Grille d'évaluation :

		Pondération	Opérateur SOFIE	Opérateur FLUENT	Opérateur FDS
<b>Exigences modélisations</b>		1	16.7	19.2	19.2
<b>Exigences liées aux grandeurs</b>	Donnée d'entrée issue d'essai	5	3.9	5.7	15.0
	Donnée d'entrée bibliographiques	1	9.2	20.0	17.2
	Contrainte de simulation	4	8.7	6.6	10.0
	Grandeurs physiques attendues	5	10.2	5.0	14.6
	Prise en compte de l'environnement	3	5.0	3.3	12.1
	Domaine d'application	3	5.0	0.0	13.6
<b>Exigences de rapport</b>		2	10.0	19.4	15.6
<b>Suivi du code</b>		1	13.3	10.0	13.3
<b>Qualité</b>		1	16.3	18.8	14.4
<b>Note globale</b>			<b>8.10</b>	<b>7.56</b>	<b>13.62</b>

Comparaison des outils et opérateurs / Benchmark spécifique pour calcul de propagation de combustion en milieux spécifiques



#### Tableau de synthèse

Logiciels de calcul utilisés	SOFIE	Fluent	FDS
Logiciels de post-traitement	Josefine	Fluent	Smokeview
Principal point fort dans la situation étudiée	Utilisation d'un logiciel codant la propagation du feu sur un matériau et éprouvé dans d'autres domaines	Très bon maillage sous Fluent et qualité de la résolution de la dispersion	Codage de propagation multimatériaux et calcul de turbulence en LES
Principal défaut pour la situation étudiée	Ne prennent en compte que la combustion d'un matériau	Pas de modèle de pyrolyse	Une seule réaction chimique moléculaire est affectée à tous les matériaux, bien que ceux-ci aient des propriétés thermiques différentes
	Le comportement des suies est mal représenté (effets sur l'opacité, le rayonnement...)	Le comportement des suies est mal représenté (effets sur l'opacité, le rayonnement...)	

L'analyse des résultats montre qu'aucun des outils ne remplit totalement les critères exigés. Fluent présente des qualités numériques quant au maillage et aux exigences de simulation, mais ne dispose pas de modèle de pyrolyse satisfaisant par rapport au besoin exprimé. SOFIE permet le calcul de pyrolyse, mais ne considère qu'un seul matériau du point de vue chimie de la combustion et énergie. FDS présente une bonne réponse quant aux aspects turbulence et pyrolyse, bien qu'une seule réaction chimique soit prise en compte. Il considère néanmoins bien des enthalpies de vaporisation, de combustion et des propriétés thermiques propres à chaque matériau et semble le plus adapté des trois outils étudiés pour cette situation.

Il est essentiel de bien considérer que ces différences sont liées aux exigences exprimées et ne sont en aucun cas systématiques. Le principe de ce benchmark est un exemple d'évaluation d'outils et n'a pas pour objet de hiérarchiser ceux-ci.

### 3.6 Références

- [1] An International Survey of computer Models For Fire and Smoke, R. Friedman, FMRC Norwood, Journal of Fire Protection Engineering, vol. 4(3), 1992, pp 81-92
- [2] An Updated International Survey of Computer Models for Fire and Smoke, S. M. Olenick, D. J. Carpenter, Combustion Science & Engineering, Inc. , Columbia, MD 21045, USA, Journal of Fire Protection Engineering, Vol. 13 - May 2003, pp 87-110
- [3] Assessment of an Evacuation Model for a Large Occupant Population : EXIT89 - Rita F. Fahy, ISO/TC92/SC4 Workshop on Assessment of Calculation Methods in FSE, April 10, 2006 , Southwest Research Institute, USA
- [4] Evaluation of the Computer Fire Model DETACT-QS - Morgan J. Hurley, SFPE - ISO/TC92/SC4 Workshop on Assessment of Calculation Methods in FSE, April 10, 2006 , Southwest Research Institute, USA
- [5] Compartment Fire Modelling, Combustion Fundamentals of Fire , G. Cox, Academic Press, 1995, p. 334.
- [6] Development of a Stratified Ceiling Layer in the Early Stages of a Closed- Room Fire, E. E. Zukoski , Fire and Materials, Vol. 2, No. 2, 1978.
- [7] Simulation of Oil Tank Fires, H.R. Baum, K.B. McGrattan, *In*: Proceedings of the Interflam '99 Conference, Vol. 2, Edinburgh, Scotland, 1999.
- [8] Technical Reference Guide for the HAZARD I Fire Hazard Assessment Method, Volume 2, NIST Handbook 146/II, R. W. Bukowski, R. D. Peacock, W. W. Jones, C. L. Forney, National Institute of Standards and Technology, June 1991.
- [9] BuildingEXODUS V3.0 User Guide and Technical Manual, Doc Rev 3.0. University of Greenwich, May 2000.
- [10] Verification and Validation of the ISIS CFD Code for Fire Simulation, S. Suard, L. Audouin, F. Babik, L. Rigollet, J.C. Latchée, ISO/TC92/SC4 Workshop on Assessment of Calculation Methods in FSE, April 10, 2006 , Southwest Research Institute, USA
- [11] Assessment of CFAST, W. W. Jones, ISO/TC92/SC4 Workshop on Assessment of Calculation Methods in FSE, April 10, 2006 , Southwest Research Institute, USA
- [12] The Role of Measurement Uncertainty in the Validation of Calculation Methods for Fire Safety Engineering, M.L. Janssens, ISO/TC92/SC4 Workshop on Assessment of Calculation Methods in FSE, April 10, 2006 , Southwest Research Institute, USA
- [13] Review of 28 Egress Models, Erica Kuligowski, National Institute of Standards and Technology



- [14] Kreyszig, E., "Introductory Functional Analysis with Applications," John Wiley and Sons, New York, 1989, 63-64.
- [15] ISO DIS 16730 : Fire Safety Engineering – Assessment, verification and validation of calculation methods - D. Brein, ISO TC92 SC4 WG7, Workshop on Assessment of Calculation Methods in FSE – 10 avril 2006. Southwest Research Institute, San Antonio, TX, USA
- [16] DoD. Dod directive no. 5000.59: Modeling and simulation (M&S) management. Defense Modeling and Simulation Office, Office of the Director of Defense Research and Engineering, 1996. available at: [www.dmsomil/public](http://www.dmsomil/public).
- [17] DoD. Verification, Validation, and Accreditation (VV&A) – Recommended Practices Guide. Defense Modeling and Simulation Office, Office of the Director of Defense Research and Engineering, 1996. available at: [www.dmsomil/public](http://www.dmsomil/public)
- [18] DoD. Dod instruction 5000.61: Modeling and Simulation (M&S) - Verification, Validation, and Accreditation (VV&A). Defense Modeling and Simulation Office, Office of the Director of Defense Research and Engineering, 2003. available at: [www.dmsomil/public](http://www.dmsomil/public).
- [19] An Introduction to Mathematical Fire Modeling, 2<sup>nd</sup> edition, M.L. Janssens, Technomic Publishing Co, 2000, ISBN 1-56676-920-5
- [20] Compartment Fire Modeling, J.G. Quintiere, in SFPE Handbook of Fire Protection Engineering, Second edition (1995) , ISBN 0-87765-354-2, Chapter 3.5.
- [21] Zone Computer Fire Models for Enclosures, W.D. Walton, in SFPE Handbook of Fire Protection Engineering, Second edition (1995) , ISBN 0-87765-354-2, Chapter 3.7.
- [22] Using Field Modeling to Simulate Enclosure Fires, D.W. Stroup, in SFPE Handbook of Fire Protection Engineering, Second edition (1995) , ISBN 0-87765-354-2, Chapter 3.8.
- [23] COMPF2 – A program for Calculating Post-Flashover Fire Temperatures, V. Babrauskas, National Bureau of Standards, NBS TS 991, 1979
- [24] Smoke Plume Trajectory from In Situ Burning of Crude Oil in Alaska – Field Experiments and Modeling of Complex Terrain, K.B. McGrattan, H.R. Baum, W.D. Walton, J. Trelles, NISTIR 5958, National Institute of Standards and Technology
- [25] Royal Institute of Technology (DK) : Numerical methods in Energy technologies (4A1624)
- [26] Mécanique des fluides numérique, D.F. Fletcher, C. Xuereb, *in*. Techniques de l'Ingénieur, J 1 050
- [27] Flamme de diffusion laminaire, D. Veynante, *in*. Techniques de l'Ingénieur, BE 8 320
- [28] ISO/IEC 25000, Software engineering – Software product – Quality – Requirements and Evaluation (SquaRE) – Guide to Square.
- [29] ISO/IEC 9126-1, Software engineering – Product quality – Part 1: Quality model.
- [30] ISO/IEC 14598-1, Information Technology – Software product evaluation – Part 1: General overview.
- [31] NF X 50-141-1 : Relations clients-fournisseurs – Qualité des démonstrations (essais, calculs, simulations, etc.) – Bases de la démarche et choix du type de démonstration
- [32] NF X 50-141-3 : Relations clients-fournisseurs – Qualité des démonstrations (essais, calculs, simulations, etc.) – Lignes directrices pour demander et réaliser les calculs ou les simulations
- [33] The Design Fire Tool OZone V2.0 - Theoretical Description and Validation On Experimental Fire Tests - Juin 2001- J.F. Cadorin, D. Pinteau, J.M. Franssen - Université de Liège, département M&S, Rapport interne SPEC/2001\_01

- [34] L'ingénierie de la sécurité incendie : Naissance, évolution actuelle, perspectives futures – D. Joyeux (CTICM), E. Guillaume (LNE), Journée technique LNE n°518 – Paris, 6 décembre 2005.
- [35] Use of a Numerical Tool to Assess the Impact of the Means of Measurement on Fire, S. Desanghere, D. Joyeux, A. Coppalle, Communication personnelle
- [36] Performance assessment of external Structure Protection by CFD, D. Joyeux, P. Van Hulle, S. Desanghere, Interflam conference 2004.
- [37] Shear-Improved Smagorinsky Model for Large-Eddy Simulation of Wall-Bounded Turbulent Flows, E. Lévêque, F. Toschi, L. Shao, J-P. Bertoglio, J. Fluid Mech. 2006.
- [38] Computational Fluid Dynamics and Fire Modeling - Présentation de Kevin Mc Grattan – NIST 2001
- [39] Eddy-viscosity-type subgrid-scale model with a variable Smagorinsky coefficient and its relationship with the one-equation model in large eddy simulation, A. Yoshizawa, Physics of Fluids A : Fluid Dynamics, vol.3 pp 2007-2009, Août 1991.
- [40] Étude de l'approche DES (Detached Eddy Simulation) pour prévoir les écoulements instationnaires à grande échelle, D. Guénot, B. Aupoix (ONERA), 16<sup>ème</sup> congrès français de mécanique, Nice, 1-5 sept. 2003

## 4 Les outils du LNE

### 4.1 Modèles de zone

Les modèles de zone permettent les études préliminaires des domaines stratifiés. Une approche utilisable est de les appliquer selon une méthode stochastique, afin de trier les situations les plus critiques. Ils s'emploient néanmoins avec prudence, car il convient de les utiliser uniquement dans des domaines où la stratification est probable.

En données d'entrée, ils nécessitent la connaissance des courbes de débits calorifiques pré-flashover (courbes issues d'essais, courbes NFPA ou courbes calculées), les propriétés thermiques des matériaux et les géométries et ouvertures. En stade post-flashover, ils nécessitent en plus de connaître la charge calorifique des locaux étudiés.

#### 4.1.1 Modèles mono- et bi-zones

Deux logiciels simples de zones sont utilisés au LNE : le logiciel FPE Tools Fire Simulator du NIST et le logiciel OZONE, de l'université de Liège. Ces deux logiciels gèrent les échanges de matière et d'énergie entre deux zones complémentaires stratifiées, l'une représentant la fumée et l'autre l'air sain. Les zones sont considérées homogènes en tous points (températures, concentrations en gaz, énergie). En cas de feu développé, les deux logiciels permettent de passer d'un modèle bi-zones à un modèle mono-zone où l'ensemble de l'espace gazeux de l'environnement est alors à une température unique. Ces logiciels ne permettent que de traiter des cas de pièces uniques.

##### 4.1.1.1 Fire Simulator (FPE tools)

Fire Simulator est un outil simplifié de résolution des bilans massique et énergétique dans le cas d'une pièce simple. Il permet d'estimer le volume de fumées et la température générées par un foyer donné dans un environnement simple. Cet outil permet d'évaluer les quantités de fumées sortant par les portes et fenêtres, et de changer les conditions de ventilation et de combustible au flashover. Ce dernier est spécifié par une température critique, généralement 600°C.

L'outil permet en outre de déterminer la réponse des détecteurs ou sprinklers et d'estimer les teneurs en monoxyde et en dioxyde de carbone, en visibilité. La teneur en dioxygène est elle-aussi suivie et a un effet sur la combustion.

La validation de cet outil est reprise dans les références [15] et [16]. Il est présenté en détails en annexe 1.

##### 4.1.1.2 Ozone

Le logiciel Ozone a été développé par l'université de Liège. Il est utilisé pour déterminer l'impact thermique d'un feu sur une structure. Il résout les bilans matière et énergie, et le transfert thermique dans des zones localisées. Il dispose de deux jeux d'équations, en fonction de l'état de développement. La première traduit les situations stratifiées en deux zones et la seconde les situations à une zone en cas de feu développé. Le logiciel permute d'un mode à l'autre en fonction de quatre critères différents, le principal étant basé sur la température de la couche chaude (500°C). Les critères sont décrits dans la référence [33], paragraphe 8.

Le logiciel Ozone permet en outre d'estimer la résistance des structures métalliques à proximité du foyer, et d'estimer la probable ruine d'un bâtiment. Les équations inhérentes au modèle sont présentées dans la référence [33]. La validation fait partie du paragraphe 11 de cette référence. Une comparaison avec l'outil NAT du CSTB a ainsi montré une concordance forte entre les deux outils.

Des validations expérimentales ont par ailleurs été réalisées et ont montré une concordance entre de nombreuses situations stratifiées et les calculs. Ces validations ont aussi porté sur l'échauffement de structures acier protégées ou non. Les résultats montrent une sous-estimation d'environ 10% sur les températures par l'outil, mais il semble que ce phénomène soit dû à un biais expérimental, du fait de l'inertie thermique des thermocouples. Le détail sur l'outil est présenté en annexe 2.

#### 4.1.1.3 Autres considérations

Ces deux outils peuvent tous deux être utilisés en approche stochastique, ce qui permet de faire varier rapidement l'ensemble des paramètres influents et de caractériser des situations variées d'utilisations. Cette technique permet en outre l'étude paramétrique de sensibilité.

### 4.1.2 Modèles de zone multi-locaux

Un logiciel multi-zones est par ailleurs utilisé au LNE. Ce logiciel, CFAST 6 du NIST, gère comme précédemment les échanges de matière et d'énergie entre deux zones complémentaires stratifiées, l'une représentant la fumée et l'autre l'air sain. CFAST est employé pour calculer l'évolution de la distribution de la fumée, des effluents gazeux du feu et de la température dans tous des compartiments d'un bâtiment pendant un feu. Cet outil peut être utilisé sur des espaces de l'ordre de  $1 \text{ m}^3$  à des grands espaces sur l'ordre de  $1000 \text{ m}^3$ . Les algorithmes détaillés du modèle font l'objet de l'annexe 3.

#### 4.1.2.1 Description générale du modèle

Les zones sont considérées homogènes en tous points (températures, concentrations en gaz, énergie). Ce logiciel permet par ailleurs d'enchaîner les zones, ce qui permet par exemple de caractériser une pièce et un couloir attenant, puis les autres pièces donnant dans ce couloir. Dans chacune de ces pièces, les hauteurs de stratification sont calculées. Ce logiciel peut par ailleurs être utilisé en approche stochastique, ce qui permet de faire varier rapidement l'ensemble des paramètres influents et de caractériser des situations variées d'utilisations

La première version publique de CFAST était la version 1.0, apparue en juin 1990. Elle est issue de l'amélioration de l'outil FAST pour inclure les éléments apportés par le retour de l'utilisation du code CCFM. En particulier, les modifications et évolutions du modèle se sont avérées nettement plus simples lorsque certaines routines sont séparées du solveur. La version 2 a été diffusée comme composante de l'outil HAZARD 1.2 de 1994.

La version 3 a été publiée en 1995 et a comporté un algorithme de diffusion verticale de la flamme, les impacts au plafond et de ce fait la prise en compte d'un terme non uniforme de perte de chaleur par le plafond. Cette version comportait aussi la possibilité de placer des cibles pour le transfert thermique, ainsi que l'introduction de foyers et objets en feu multiples. L'allumage de ces objets était alors basée sur des critères de flux ou de température critiques.

La version 4 a été publiée en 2000. Elle comportait en plus la conduction horizontale de la chaleur par des murs et l'écoulement horizontal de fumée dans les couloirs. La version 5 a amélioré la chimie de combustion. La version actuelle (CFAST 6) inclut une interface utilisateur et des améliorations au modèle et aux fichiers d'entrée.

#### 4.1.2.2 Données d'entrée et de sortie

Toutes les données d'entrée du modèle sont contenues dans un fichier de données d'entrées, et des bases de données sont utilisées pour les foyers et les propriétés thermophysiques des surfaces solides. Le fichier d'entrée contient :

- des informations sur la géométrie des bâtiments (tailles de compartiment, matériaux de construction) ;
- les raccordements entre les compartiments (ouvertures horizontales d'écoulement telles que des portes, des fenêtres, des ouvertures verticales d'écoulement dans les planchers et les plafonds, et des raccordements de ventilation mécanique) ;
- les propriétés du feu (taille du feu et taux de production d'espèces en fonction de temps) ;
- les caractéristiques des détecteurs éventuels, des sprinklers ;
- les cibles pour le calcul de transfert thermique (position, taille, caractéristiques de transfert thermique).

Les matériaux sont définis par leur conductivité thermique, leur capacité thermique, leur densité, leur épaisseur, et leur comportement en combustion.

Les données de sorties de CFAST sont les variables nécessaires pour évaluer l'environnement du un bâtiment soumis à un feu. Celles-ci incluent :

- les températures des couches supérieures et inférieures de gaz dans chaque compartiment ;
- les températures du plafond, des murs et du plancher dans chaque compartiment ;
- la fumée et les concentrations évidentes d'espèces de gaz dans chaque couche ;
- les températures des cibles et le délai d'activation des détecteurs et des sprinklers.

Plusieurs données de sorties du modèle de CFAST sont relativement peu sensibles à l'incertitude des entrées pour une large gamme des scénarios. Un exemple de sensibilité aux conditions initiales est présenté au paragraphe 3.2.4.2. Cependant, plus le scénario est défini plus avec précision, plus les résultats seront plus précis. Le débit calorifique est la variable la plus importante, parce que ce paramètre fournit la force d'entraînement pour des écoulements induits par le feu. D'autres variables liées à la géométrie des compartiments (taille des compartiments ou des ouvertures), sont aussi sensibles mais en général mieux définies dans une étude de situations déterminées.

#### 4.1.2.3 Hypothèses et limitations

Les équations sont résolues pour la conservation de la masse et de l'énergie. L'équation de mouvement n'est pas résolue explicitement, excepté par l'utilisation de l'équation de Bernoulli pour la vitesse d'écoulement aux ouvertures. Deux hypothèses sont définies :

- Un nombre restreint de zones par compartiments doit être à même de modéliser la situation physique (zone chaude, froide et éventuellement panaches)
- l'ensemble des équations doit être bouclé sans emploi du bilan quantité de mouvement au sein des compartiment. Cette simplification filtre les problèmes d'ondes acoustiques dans et entre les compartiments.

Le concept de modèle de zone est applicable pour les environnements dans lesquels la stratification est observable. En particulier, les longueurs et largeur doivent être relativement proches et les volumes limités à environ 1000 m<sup>3</sup>. Pour traiter le cas des couloirs, un algorithme adapté est appelé. Celui-ci permet de traiter la variation de la hauteur de fumée en fonction de la distance dans le couloir.

Le modèle est très dépendant de la compétence et du soin apportés aux données d'entrée. Les prédictions du modèle se sont ainsi avérées fiables à 10 à 25 % par rapport à l'expérimentation dans un grand nombre de situations et de scénarios.

#### 4.1.2.4 Vérification du code source

Le code source de CFAST est un code totalement libre. Le NIST emploie pour sa validation une combinaison de revues internes et externes à chaque modification :

- La revue interne des modifications apportées au code est réalisée par au moins deux personnes non impliqués dans le processus de développement, avec pour objectif de s'assurer qu'un changement proposé demeure sans conséquences au reste du code de CFAST et est mis en application correctement. Le NIST maintient l'historique des versions du code depuis 1989.
- La revue externe est réalisée par des diffusions et des revues par les pairs dans la littérature scientifique. De nombreux laboratoires externes au NIST travaillent par ailleurs sur le code et diffusent en retour de nombreuses informations.

Deux méthodes sont employées pour vérifier le programme et sa compilation :

- L'utilisation des méthodes standard pour vérifier la structure et l'interface, telle que les méthodes FLINT et LINT. Trois aspects du modèle sont vérifiés par ce procédé : l'exactitude des informations transmises par l'interface, la non- définition ou la mauvaise utilisation des variables et constantes, et la qualité des boucles de calcul itératif.
- L'emploi d'une variété de plate-formes pour compiler et exécuter le code. Les compilateurs Fortran et C mis en œuvre diffèrent d'une plate-forme et d'un système à un autre, engendrant un contrôle numérique ou syntaxique différent. CFAST a été compilé et testé pour des stations Sun (Solaris), Silicon Graphics (SGI Irix), des PC standards type Windows (utilisation des compilateurs Lahey Fortran, Digital Fortran et Intel Fortran)

CFAST s'est révélé donner les mêmes résultats dans toutes les compilations et sur toutes les plateformes.

#### 4.1.2.5 Vérifications et validations du modèle

##### Validation par comparaison avec des données expérimentales

De nombreuses validations de l'outil ont été réalisées par le NIST et des organismes tiers. Ces comparaisons peuvent être regroupées en quelques familles :

- Comparaisons avec les essais à grande échelle effectués spécifiquement pour l'évaluation du modèle : 13 exemples sur le site du logiciel
- Comparaisons avec des essais de la littérature ouverte précédemment réalisés (en grande partie par le NIST) : 10 exemples, comparaison avec des expériences documentées : 5 exemples
- Comparaison avec des expériences qui couvrent des situations spécifiques :
  - Installations nucléaires (2 exemples)
  - Essais à petite échelle (3 exemples)
  - Géométrie peu commune et algorithmes spécifiques (9 exemples)

Des exemples de validation complète par rapport à des situations multilocaux à l'aide des outils de la norme ISO 16730 et de l'analyse fonctionnelle sont présentés dans la référence [20]. Ces résultats montrent que l'erreur augmente avec le nombre de compartiments de manière significative.

### Validation par comparaison avec des données expérimentales

Les différences entre le modèle et les expériences sont évidentes dans les comparaisons réalisées, mais la plupart de celles-ci peuvent être expliquées par :

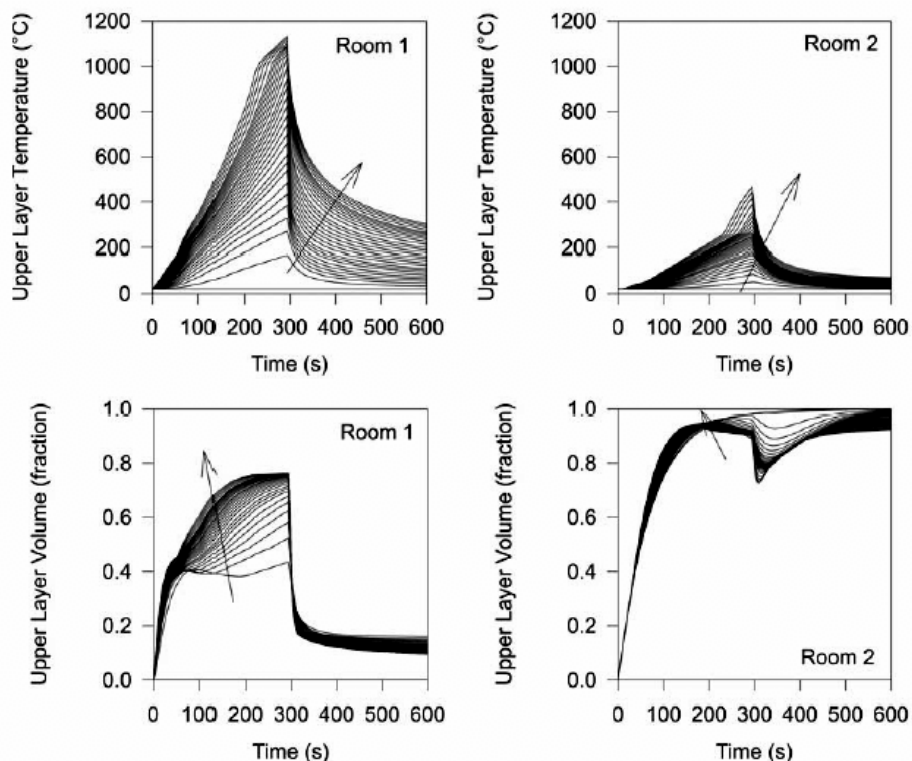
- des limitations du modèle :
  - hypothèses simplificatrices,
  - supposition d'une stratification parfaite,
  - température uniforme des deux couches de gaz
- des limitations expérimentales :
  - incertitude des données mesurées
  - effets d'inertie des capteurs, mesure de température et de rayonnement combinée aussi bien que des expériences.

La stabilité numérique et la robustesse de la solution ont elles aussi été étudiées. Les détails des algorithmes du logiciel CFAST sont présentés en annexe 3. Les validations de l'outil sont réalisées depuis de nombreuses années par W. Jones du NIST et détaillées dans la référence [20].

#### 4.1.2.6 Sensibilité du modèle

Un exemple de sensibilité du modèle aux données d'entrée est présenté au paragraphe 3.2.4.2. Cet exemple montre la difficulté d'une telle étude. Différentes études réalisées et synthétisées par le NIST montrent que la sensibilité du modèle aux données d'entrée provient premièrement du terme source de chaleur utilisé (débit calorifique du foyer), suivi par les surfaces des ouvertures.

L'exemple ci-après montre la sensibilité de la température de la couche chaude et du volume de fumée au débit calorifique observées dans la pièce du foyer et un local adjacent :



## 4.2 Modèles champs et simulation tridimensionnelle

La modélisation tridimensionnelle du comportement des fumées peut être réalisée à l'aide du logiciel FDS version 4.07 du NIST. Le LNE participe par ailleurs à l'amélioration de ce logiciel et à la fourniture des données d'entrée. Il réalise aussi le développement d'interfaces graphiques de pré- et post-traitement. L'outil est présenté en détails ci-après et ses algorithmes font l'objet de l'annexe 1.

Ce logiciel est un modèle de mécanique des fluides associé à un modèle de pyrolyse et de combustion. Il permet de prédire le déplacement des fumées en prenant en compte les effets aérodynamiques réels (ventilations, exutoires...)

Il peut résoudre le déplacement des fumées de deux manières : LES ou DNS. Seule la LES peut s'appliquer au cas des bâtiments, au vu des dimensions considérées. Il constitue un outil très puissant, mais son utilisation demande la connaissance de nombreux domaines des mathématiques, de la physique et de la chimie. Le LNE dispose de ce fait de compétences pointues, du fait d'une division d'appui mathématique, de référents de premier plan international dans des domaines comme la thermique, l'optique des rayonnements infrarouges ou la chimie des matériaux.

Deux types de foyers sont possibles dans le cas d'une étude : les foyers standards imposés et les foyers à développement calculé.

Les foyers standards proviennent de différentes sources :

- Ils peuvent être calculés à partir de l'étude des potentiels calorifiques d'une pièce. Cette étude peut être simple, ou être complexe, en impactant les départs de feu d'un scénario et la combustion des matériaux d'une vitesse de perte de masse ;
- Ils peuvent provenir d'essais, d'origine bibliographique ou réalisés au LNE. Le laboratoire peut réaliser des feux jusqu'à environ 2000 kW afin de définir un terme source ;
- Les foyers peuvent être issus de référentiels ou de codes, comme par exemple des courbes ISO 834, des courbes NFPA en t<sup>2</sup>. Ces courbes peuvent être limitées en puissance ou non.

Les foyers calculés prennent en compte le comportement réel des matériaux. Ils sont plus proches de la réalité, mais nécessitent des essais de calage préalables. Il convient en effet de connaître des paramètres comme la température critique d'inflammation pilotée, le débit de combustion critique, les propriétés thermiques et enthalpiques du matériau. Le LNE dispose ainsi de bases de données de matériaux commerciaux et des données correspondantes. L'utilisation de tels foyers s'affranchit d'un scénario-enveloppe, mais ils nécessitent des essais de fourniture de données d'entrée et des essais de validation à échelle intermédiaire. Ils constituent plutôt le devenir de la simulation numérique, et sont déjà appliqués dans le cas de la recherche pour les transports terrestre et aérien de passagers.

### 4.2.1 Caractéristiques du logiciel de simulation

#### 4.2.1.1 Caractéristiques générales

Le logiciel FDS version 4.0.7, développé par le NIST, est un logiciel de mécanique des fluides (CFD) appliqué au transport de flux dans les régimes de combustion. Ce logiciel permet la résolution des équations de Navier-Stokes adaptées aux faibles vitesses de fluides, couplé à un modèle de génération de chaleur et de fumées par le feu. Le détail des équations utilisées par le modèle font l'objet de l'annexe du présent document.

Dans FDS, l'espace est découpé en mailles parallélépipédiques. Ces mailles peuvent appartenir à une ou plusieurs grilles numériques, imbriquées ou indépendantes.

Le modèle hydrodynamique est basé sur les équations de Navier-Stokes appliquées à un faible nombre de Mach. Le régime turbulent est traité en LES (Large Eddy Simulation) par des calculs filtrés de Smagorinsky. En LES, la combustion en phase gazeuse est modélisée en utilisant l'approche des « mixture fractions », qui définit les relations entre les espèces majoritaires suivantes : combustible, dioxygène, monoxyde et dioxyde de carbone, diazote (pour la conservation du bilan-matière) et dihydrogène. Ces espèces majoritaires sont



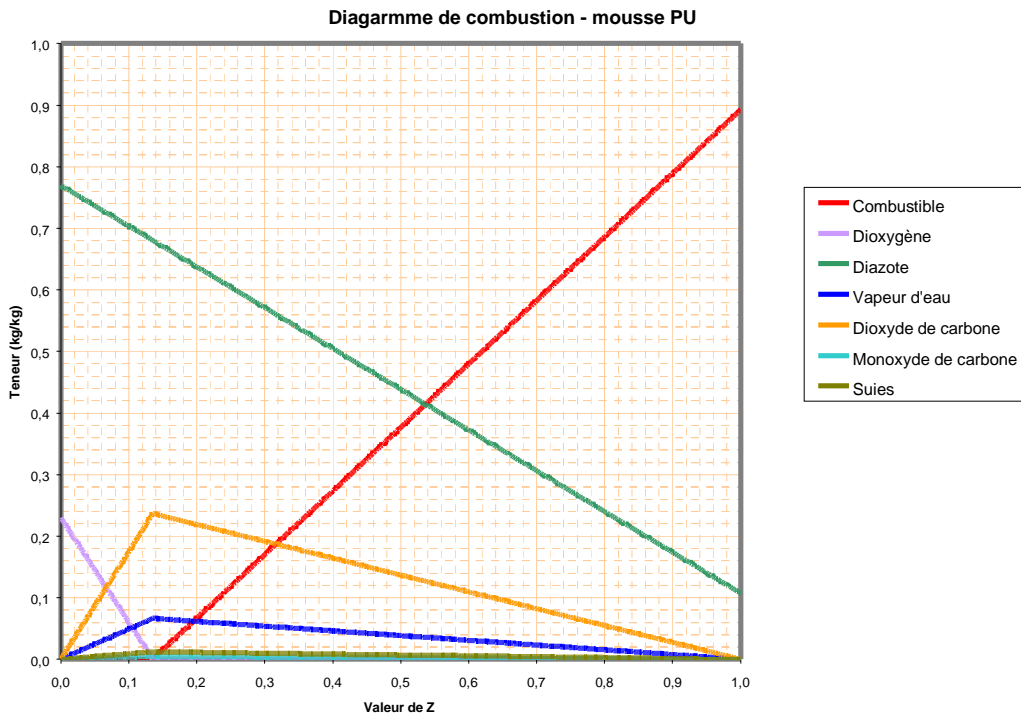
utilisées pour calculer la consommation locale de dioxygène, afin de calculer le terme de production de chaleur.

#### 4.2.1.2 Modèle hydrodynamique

Les mouvements des fluides sont modélisés par la résolution des bilans de conservation de masse, de fractions molaires, d'énergie et de quantité de mouvement selon des équations à bas nombre de Mach. Le bilan énergétique n'est pas résolu directement, mais modélisé en équation de divergence [1]. Les effets de turbulence sont calculés par LES, dans laquelle les turbulences à grande échelle sont calculées directement et les processus inférieurs à la taille des cellules sont filtrés, c'est à dire moyennés. L'intégration temporelle est basée sur une équation explicite du second degré.

#### 4.2.1.3 Modèle de combustion

Le modèle de combustion est basé sur l'approximation que la combustion est contrôlée par le mélange des espèces. Cela implique que toutes les espèces influentes sont considérées comme dépendantes d'un scalaire Z. Le débit calorifique est produit par une couche sans épaisseur pour laquelle le scalaire Z correspond aux conditions stœchiométriques. Il est alors calculé à partir de la consommation d'oxygène par l'intermédiaire du facteur de Thornton, modifié par Huggett.



#### ***Exemple de diagramme de Z pour une mousse polyuréthane***

Les principaux avantages de cette méthode sont :

- Une seule équation de diffusion/convection à résoudre pour l'ensemble des espèces majoritaires ;
- Une vitesse de combustion infinie compatible avec les échelles spatiale et temporelle de la LES ;
- De nombreuses espèces secondaires peuvent être fonction de la résolution de Z. Néanmoins, ces espèces minoritaires sont alors tributaires seulement de la réaction principale.

Les gros inconvénients sont :

- Le coefficient de diffusion est le même pour tous les gaz
- La vitesse de combustion infinie est incompatible avec une résolution fine de la structure des flammes ;

Le modèle est adapté pour traiter trois types de combustibles : Les solides thermoplastiques, les solides produisant des charbons et les fluides :

- Pour les solides thermoplastiques, le logiciel considère que seule la surface exposée fait l'objet de la pyrolyse. Si le matériau est considéré comme épais, c'est à dire que ses deux faces sont à des températures différentes, un calcul thermique uni-dimensionnel est alors effectué, dépendant de la conductivité thermique  $k_s$ , de la capacité thermique  $C_p$  et de la densité du milieu. L'enthalpie de vaporisation, nécessaire à l'évaporation du solide est alors retirée du flux de chaleur incident. En général, l'enthalpie de liquéfaction est très inférieure à l'enthalpie de vaporisation, mais une valeur égale à la somme de ces deux enthalpies de changement d'état peut être utilisée. Le débit de pyrolyse est alors calculé, en fonction de la balance énergétique au sein du solide. Pour un matériau fin, aucun transfert thermique n'est considéré. Le modèle s'attache alors à l'élévation globale de la température de surfaces, par l'intermédiaire de la capacité thermique  $C_p$ , de l'épaisseur et de la densité du milieu.
- Pour les combustibles liquides, le débit auquel le combustible s'évapore pour brûler est fonction de la température du liquide et de la concentration en vapeur combustible à sa surface. L'équilibre est atteint lorsque la pression partielle de vapeur combustible à la surface considérée équivaut à la pression de Clausius-Clapeyron. Cela revient à considérer que le liquide est considéré comme un matériau épais pour lequel le transfert thermique équivaut à de la conduction.
- Pour les combustibles solides produisant des charbons, le modèle utilisé pour traiter la conduction au sein du solide est implémenté en considérant l'évaporation d'eau au sein du matériau de départ, ainsi que la formation de charbons. Dans ce cas, l'énergie nécessaire à la pyrolyse est extraite du sein même du matériau, et non de l'énergie incidente. Cela implique que l'effet de la couche de charbons sur les bilans thermiques augmente lors de sa croissance.

Note n°1 : FDS dispose d'un autre modèle de combustion, prenant en compte la cinétique et adapté aux fines structures. Néanmoins, ce modèle fait appel aux coefficients de diffusion réels des espèces, et ne peut être appelé qu'en DNS. Or, ce mode requiert un maillage très fin, de l'ordre du millimètre, et est donc inadapté à la simulation de structures de taille importante.

Note n°2 : Un autre modèle, de type « Eddy Break-up » et similaire à celui du code Sofie a été testé sur une version de test de FDS 2.0. Ce modèle n'a pas montré de différences significatives dans les utilisations courantes du logiciel et n'a ainsi pas été retenu pour les versions ultérieures.

#### 4.2.1.4 Modèle radiatif

Les transferts de chaleur radiatifs sont résolus par la méthode des volumes finis (FVM), qui régit l'équation de transport radiatif dans un gaz gris. La dépendance des propriétés émissives des produits de combustion est calculé à l'aide d'un modèle à bande large en considérant les mailles comme emplies d'un gaz gris. Ainsi, pour chaque maille, un nombre prédéfini de rayons est calculé (tir radiatif), définissant ainsi différents trajets optiques. Deux modèles radiatifs sont utilisés par FDS : A l'intérieur de la flamme, le rayonnement constitue un ratio du débit calorifique total. A l'extérieur de la flamme, une formulation en  $T^4$  correspondant à la loi de Stefan-Boltzmann est utilisée.

Les principaux avantages de cette méthode sont :

- Une faible approximation, due à une prise en compte fidèle à la physique réelle ;
- Une bonne résolution, même pour les faibles trajets optiques.

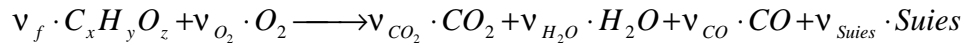
Les inconvénients de la méthode sont :

- La nécessité de discrétiser selon de nombreux angles, afin de créer des rayons passant par un maximum de cellules ;
- Un coût en temps calcul pouvant être considérable.

## 4.2.2 Origine des données d'entrée

### 4.2.2.1 Réaction chimique

La réaction chimique principale considère qu'un seul hydrocarbure simple brûle, avec des taux de production de CO et de suies constants. Elle est de la forme :



Cette réaction n'est pas explicitement physique. Elle spécifie les coefficients stœchiométriques idéaux pour le combustible, O<sub>2</sub>, CO<sub>2</sub> et l'eau, ainsi que les taux de production de CO et de suies. Les taux de production de CO et de suies sont calculés sous la forme de coefficients stœchiométriques. CO et les suies sont générés dans la flamme et transportés avec les espèces CO<sub>2</sub> et H<sub>2</sub>O. Ainsi, les oxydations post-combustions et les équilibres de Boudouard entre CO<sub>2</sub> et CO ne sont pas pris en compte.

Les données d'entrée de la réaction sont détaillées ci-dessous.

- Coefficients stœchiométriques  $\nu_i$  idéaux pour le combustible, O<sub>2</sub>, CO<sub>2</sub> et H<sub>2</sub>O. Ces coefficients permettent de caractériser la réaction. Ces paramètres peuvent être déterminés expérimentalement par analyse élémentaire. Pour CO<sub>2</sub> et O<sub>2</sub>, une mesure à l'aide du cône calorimètre est possible, mais il est préférable de se baser sur des valeurs issues du motif du polymère dans la littérature spécialisée.
- Masse molaire du combustible ( $M_f$ ), exprimée en grammes par mole. Cette masse molaire ne peut pas se déterminer expérimentalement. Une valeur basée sur le motif et issue de la littérature est donc utilisable.
- Quantité d'azote  $\nu_{N_2}$ , exprimée en nombre de molécules de diazote N<sub>2</sub> pouvant être libérées. Il est considéré pour cette réaction que l'azote contenu dans le matériau s'échappe sous forme de diazote. Par exemple, pour de l'uréthane C<sub>3</sub>H<sub>7</sub>NO<sub>2</sub>, cette valeur est de 0,5 car une molécule de diazote peut être libérée par la combustion de deux molécules de combustible. Cette valeur est difficile à déterminer expérimentalement, mais peut se faire à partir de la connaissance du motif principal d'un polymère.
- Taux de production de suies ( $y_s$ ), exprimé en grammes de suie produites par gramme de combustible brûlé. Ce paramètre peut s'obtenir au cône calorimètre, avec néanmoins une incertitude importante due à la mesure optique, ou à l'aide de tables issues de la littérature spécialisée, où une méthode gravimétrique, plus précise, a été utilisée.
- Taux de production de CO ( $y_{CO}$ ), exprimé en grammes de CO par grammes de combustible. Ce paramètre peut être déterminé expérimentalement au cône calorimètre, ou issu d'une corrélation comme celle de Köylü et Faeth, la reliant au taux de production de suies par la formule :

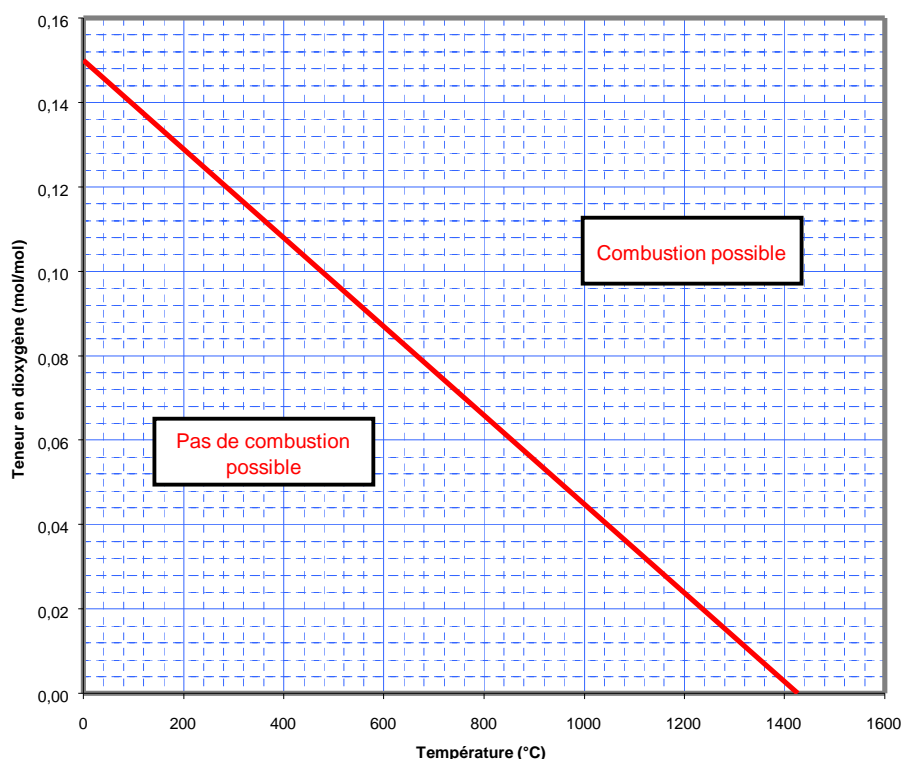
$$y_{CO} = \frac{12 \cdot x}{M_f \cdot \nu_f} 0.0014 + 0.37 \cdot y_s$$

- Facteur de Thornton  $\gamma_{H_{O_2}}$ , exprimé en kJ par kg. Ce facteur traduit l'énergie libérée par unité de masse d'oxygène consommé. La valeur par défaut est 13100 kJ/kg. L'enthalpie de combustion réelle est ainsi modifiée par la présence de suies et de CO, qui engendrent une consommation d'oxygène moindre que lors de la production de CO<sub>2</sub>. Ce facteur varie très peu pour un combustible à base de carbone (plastiques, bois, hydrocarbures...), mais peut être issu de la littérature. Le tableau ci-dessous propose quelques valeurs de ce paramètre en fonction des combustibles :

Matériau		Facteur de Thornton $\gamma_{H_{O_2}}$ (kJ/kg O <sub>2</sub> )
Polymères	Polyuréthane	12 100 – 13 700
	Polypropylène	12 700
	Polyéthylène	12 800
	Polystyrène	12 700
	Polyamides	11 900 – 11 620
	Teflon	9 700
Bois	Chêne	13 500
	Pin blanc	14 700

- Ratio de chaleur rayonnée au niveau des flammes. Ce paramètre représente la part d'énergie dégagée par les flammes sous forme de rayonnement thermique. Par défaut, cela représente 35% de la chaleur produite. La part d'énergie est fonction de la température et de la composition chimique de la flamme. Ce paramètre peut être estimé au cône calorimètre ou issu de la littérature.
- Teneur limite en dioxygène nécessaire pour la combustion, exprimée en fraction molaire et valant 0,15 par défaut. Température critique de flamme valant par défaut 1427°C. Ces deux valeurs permettent la suppression de la combustion en conditions sous-oxygénées, ce qui peut s'avérer très utile dans les feux de compartiments clos s'étouffant par manque de comburant. Elles permettent de définir la zone pour laquelle la combustion est possible, selon le diagramme présenté ci-après :

Définition de la zone de combustion possible



En somme, il convient de choisir la réaction chimique théorique la plus proche de celle(s) pouvant être présente(s) dans le cas étudié. Cette réaction reste une équation théorique, et de nombreux paramètres

sont issus de la littérature. Elle constitue le terme source de chaleur et d'espèces majoritaires et doit être judicieusement choisie. D'un point de vue molaire, le dégagement énergétique et de produits ne diffère pas de manière trop importante entre des combustibles de natures différentes comme du bois ou des polyuréthanes, mais une étude de scénarii possibles de combustion doit permettre de choisir la meilleure réaction.

L'ensemble de ces paramètres permet ainsi de reconstituer le tableau définissant l'ensemble des espèces en fonction de la valeur du scalaire Z.

#### 4.2.2.2 Nature du matériau et conditions aux surfaces solides.

Les conditions aux surfaces solides définissent les zones de matières. Ces matières peuvent faire l'objet de l'une ou plusieurs des faces d'une maille. Les matériaux incombustibles et combustibles peuvent être indifféremment calés de cette manière.

- Conductivité thermique  $K_s$ , exprimée en W/m.K. La conductivité thermique n'est spécifiée que pour les matériaux épais, c'est à dire ceux pour lesquels les faces ne sont pas à la même température. Cette valeur peut provenir de la littérature, mais constitue l'une des principales données difficile à obtenir expérimentalement sans un équipement spécifique, en particulier pour les matériaux alvéolaires (dans ce cas, la conductivité apparente du produit diffère fortement de la conductivité du produit sans air). La conductivité thermique peut être spécifiée comme fonction de la température, mais elle ne varie que faiblement en fonction de celle-ci. Quelques valeurs pour différents types de produits sont fournies dans le tableau ci-dessous :

Matériau		Conductivité thermique indicative en W/m.K
Métaux	Aluminium	247
	Acier	52
Polymères	Polypropylène	0,12
	Polyéthylène	0,46 – 0,50
	Polystyrène	0,13
	Téflon	0,25
Bois	Chêne	0,166
	Pin blanc	0,112
	Contreplaqué	0,12
	Panneau de particules	0,15
	Plancher vitrifié	0,12
Divers	Verre	1,2
	Béton	1,6
	Béton cellulaire	0,26
	Plâtre	0,8
	Silicate de calcium	0,12

- Capacité thermique  $C_p$ , en kJ/kg.K. La capacité thermique doit être spécifiée pour tous les types de matériaux. Elle peut être fonction de la température ou fixe. Cette capacité thermique peut être facilement déterminée par DSC, en exploitant la courbe d'enthalpie en fonction du temps. En effet, la capacité thermique, exprimée en J/g.K est donnée par l'enthalpie massique mesurée en W/g divisée par la vitesse de chauffe, en K/s. Cette opération peut être répétée pour chaque niveau de température. Un exemple de valeurs issues de la littérature est présenté dans le tableau ci-dessous :

Matériau		Capacité thermique indicative en kJ/kg.K
Métaux	Aluminium	0,9
	Acier	0,486
Polymères	Polypropylène	1,925
	Polyéthylène	1,85
	Polystyrène	1,17
	Téflon	1,05
	Mousse PU	1,75 – 1,84
	Polyamides	1,52 – 2,30
Bois	Chêne	2,4
	Pin blanc	2,8
	Contreplaqué	2,5
	Panneau de particules	1,25
	Plancher vitrifié	2,5
Divers	Verre	0,75
	Béton	0,75
	Béton cellulaire	0,96
	Plâtre	0,84
	Silicate de calcium	1,43

- Enthalpie de vaporisation (kJ/kg). Ce paramètre rend compte de l'énergie nécessaire pour vaporiser un solide ou un liquide combustible lorsque celui-ci a atteint sa température d'ignition. Dans ce cas, le débit de pyrolyse est dépendant du flux de chaleur reçu par le matériau. Cette enthalpie peut être obtenue dans la littérature spécialisée. Quintiere [5] propose les valeurs-guides suivantes :

- Combustibles liquides :  $\Delta H_v < 1000$  kJ/kg
- Thermoplastiques :  $\Delta H_v$  de 1000 à 3000 kJ/kg
- Solides produisant des charbons :  $\Delta H_v$  de 2000 à 6000 kJ/kg

- Enthalpie de combustion, exprimée en kJ/kg. Ce paramètre est mesuré au cône calorimètre. Il permet de contrôler le terme source de gaz et d'énergie lors de la combustion de plusieurs matériaux. De plus, les matériaux présents dans le ferroviaire sont ignifugés, ce qui joue fortement sur ce paramètre et exclut l'utilisation de valeurs de la littérature. Le tableau suivant donne une estimation de ces valeurs pour différents types de combustibles :

Matériau		Enthalpie de combustion (kJ/kg)
Polymères	Polypropylène	43 400
	Polyéthylène	43 600
	Polystyrène	35 600 – 39 200
	Teflon	4 800 – 6 900
	Mousse PU	23 200 – 28 000
	Polyamides	27 100 – 30 800
Bois	Chêne	16 000 – 17 100
	Pin blanc	17 400

- Température d'ignition. Cette valeur est déterminée à l'aide du flux critique au cône calorimètre, ou lors d'un essai de température d'auto-inflammation au four. La valeur est utilisée pour calculer le débit de pyrolyse en fonction de la température. Elle provient nécessairement d'essais réalisés sur le matériau, et non de valeurs de la littérature, car l'utilisation d'additifs ignifugeants a une grande influence sur ce paramètre.
- Emissivité. L'émissivité de la surface code directement la manière dont celle-ci va recevoir la chaleur par rayonnement. Elle est en général issue de la littérature. Pour les matières plastiques, la valeur par défaut peut être 0,95. Quelques valeurs sont indiquées dans le tableau ci-dessous :

Matériau		Emissivité
Métaux	Aluminium	0,1 environ
	Acier	Fonction de l'état de surface
Polymères		0,95
Bois	Chêne	0,89
	Pin blanc	0,82
	Contreplaqué	0,95
	Panneau de particules	0,95
	Plancher vitrifié	0,95
Divers	Verre	0,95
	Béton	0,94
	Béton cellulaire	0,95
	Plâtre	0,95
	Silicate de calcium	0,95

- Pour la plupart des matériaux, il est possible de spécifier les paramètres d'Arrhenius  $A$  et  $E_a$  définissant la vitesse de combustion en fonction de la température selon les équations :

$$\dot{m}'' = A \cdot \rho_s \cdot e^{-E_a/RT} \quad (\text{matériaux thermoplastiques})$$

$$\dot{m}'' = A \cdot (\rho_s - \rho_c) \cdot e^{-E_a/RT} \quad (\text{matériaux produisant des charbons})$$

Néanmoins, il est difficile de connaître ces paramètres pour des combustibles plus complexes. Dans ce cas, le logiciel peut calculer ces valeurs à partir d'une donnée de débit massique maximum de pyrolyse, en  $\text{kg/m}^2 \cdot \text{s}$  et de la température d'ignition. Cette donnée est très facilement mesurée au cône calorimètre

- Lors de la combustion d'un matériau produisant des charbons, trois paramètres supplémentaires sont à spécifier : la densité de charbons (par défaut  $1000 \text{ kg/m}^3$ ), leur capacité thermique (par défaut :  $0,7 \text{ kJ/kg.K}$ ) et leur conductivité thermique (par défaut  $0,1 \text{ W/m.K}$ ). Ces deux derniers paramètres peuvent être fonction de la température. Pour des charbons à base de carbone, ces valeurs par défaut peuvent être directement utilisées.
- Si le matériau contient de l'eau, celle-ci participe au transfert énergétique et la fraction massique initiale dans le combustible doit être spécifiée. Pour des matériaux comme les polyesters ou les produits contenant des hydrates d'alumine, cette valeur est primordiale. Elle est facilement déterminée par analyse thermogravimétrique, car elle correspond au saut de masse autour de  $100^\circ\text{C}$ .
- Les données géométriques et massiques : épaisseur et densité. La densité s'applique aux cellules emplies du matériau considéré. Il est primordial qu'elle corresponde aux valeurs de capacité thermique et de conductivité entrées.
- Les conditions aux surfaces limites du solide : Si l'une des faces d'un matériau est exposée à de l'air froid, ou à un isolant par exemple, la chaleur peut ne pas être évacuée par l'arrière. Cette option n'est utilisable que pour les matériaux thermiquement fins.

De plus, il est possible de spécifier que les combustibles brûlés disparaissent. Cela permet par exemple de faire progressivement disparaître un cloison durant sa combustion. Cette action est aussi possible en fonction du temps ou d'une mesure de température. Cela permet alors de simuler par exemple une ouverture de porte à un temps donné, ou l'éclatement d'une vitre à une température donnée.

### **4.2.3 Robustesse, sensibilité, validations et antécédents de FDS**

Le présent paragraphe reprend les études et validations réalisées par les concepteurs du code FDS. Ces différentes études ont été réalisées par le NIST en suivant les recommandations de l'ASTM E 1355, à l'origine du projet de norme ISO CD 16730.

#### **4.2.3.1 Robustesse mathématique et numérique**

##### **Comparaison avec des solutions analytiques**

De nombreux processus de combustion sont turbulents et dépendants du temps. Il n'y a pas de forme définie pour les équations de Navier-Stokes utilisées et de nombreuses approximations sont nécessaires et les équations sont résolues en remplaçant les termes par leur variante discrétisée. Les sous-modèles analytiques comme les modèles de transfert thermique peuvent être facilement vérifiés.

Les études sur le modèle hydrodynamique de FDS ont montré la nécessité d'utiliser un couplage pression-vitesse essentiel dans les applications à bas nombre de Mach. A l'époque, de nombreux modèles avaient été développés pour les applications à grandes vitesses, particulièrement dans l'aérospatiale. Les techniques utilisées dans FDS sont plutôt issues de modèles de type météorologique et ont fait l'objet de nombreuses vérifications dans ce cadre. Une décision fondamentale lors de l'élaboration de FDS a été d'utiliser un solveur de pression direct plutôt qu'itératif. Dans ce cas, pour la formulation des équations de Navier-Stokes à bas nombre de Mach, une équation elliptique apparaît pour le terme de pression, communément désignée équation de Poisson. Cette équation est directement calculée par FDS car la grille est recti-linéaire (les mailles sont parallélépipédiques). Le solveur utilisé ne peut en effet fonctionner d'une manière satisfaisante en termes de temps de calcul que sur ce type de grille. Les logiciels de CFD utilisant d'autres formes de mailles nécessitent une résolution itérative de l'équation de Poisson, ce qui est très péjorant en termes de temps de calcul.

##### **Validation et portabilité du code**

L'examen de la structure du programme fait état d'environ 10 000 lignes de code au format FORTRAN 90 ISO / ANSI. Le programme a été compilé et testé sur de nombreux types d'ordinateurs (IBM, HP, Stations SUN, DEC, Apple, SGI...), ainsi que sur plusieurs systèmes d'exploitations (Unix, Linux, Windows, Mac OS-X). Les compilateurs essayés incluaient Lahey Fortran, Digital Visual Fortran, Intel Fortran, IBM XL Fortran, HPUX Fortran, Forte Fortran pour SunOS, Portland Group Fortran. Les combinaisons de hardware, de système d'exploitation et de compilateur ont été testées afin de déterminer les meilleurs paramètres d'optimisation du compilateur, propres à chaque configuration. Les détails figurent dans le guide-utilisateur de FDS.

De plus, le code source de FDS est en libre accès, et de nombreux chercheurs externes au NIST ont participé au débogage et à la validation du programme. Le code source est organisé en 14 fichiers contenant un sous-modèle particulier comme les bilans énergétiques, le rayonnement... Cette structure permet de s'affranchir totalement de la plate-forme et de recompiler le programme dans chaque nouvelle configuration d'utilisation.

##### **Tests de robustesse numérique**

Les techniques numériques utilisées pour résoudre les équations de FDS peuvent être à l'origine d'un terme-source d'erreur. Le modèle hydrodynamique utilisé est du second ordre tant spatialement que temporellement. Cela implique que le terme d'erreur associé à l'approximation de la discrétisation spatiale est de l'ordre du carré de la taille de la cellule, et que l'approximation due à la discrétisation temporelle est



de l'ordre du carré du pas de temps. Plus le maillage est fin, plus l'erreur due à la discrétisation diminue, et meilleur est la modélisation des mouvements fluides. La sensibilité du maillage est très importante et est précisée au paragraphe 2.3.2.

Une technique utilisable pour tester la sensibilité du solveur des mouvements fluides est d'augmenter la qualité du maillage jusqu'à ce que la solution n'évolue plus. Le solveur étant numériquement le même en DNS et en LES, les calculs en DNS se prêtent bien à cette validation. Des essais et simulations DNS ont été réalisés sur des flammes laminaires en différentes conditions de gravité afin de valider ce solveur. D'autres validations ont été réalisées en calculant le mélange de liquides de salinité différente. Dans un tel test, la convergence de la solution numérique ne peut être réalisée que si le modèle hydrodynamique est stable.

#### 4.2.3.2 Sensibilité du modèle

L'analyse de sensibilité consiste à évaluer l'influence de l'incertitude sur les paramètres d'entrée sur les paramètres de sortie. Les paramètres d'entrée du modèle peuvent être les propriétés physiques des solides et gaz, les conditions aux limites, les conditions initiales par exemple. Les paramètres peuvent être aussi exclusivement numériques, comme la qualité du maillage.

Le paramètre physique de sortie principal d'un modèle de CFD appliqué à l'incendie est le débit calorifique, qui doit être reproduit au mieux, car il correspond aux termes sources de chaleur, de gaz. Les études de validation présentées dans le paragraphe 2.3.3 montrent la bonne reproduction par FDS du transport des espèces et de la chaleur si le débit calorifique est reproduit. Ainsi, les données de sortie du modèle sont sensibles au débit calorifique, mais autant que lors d'un essai réel. Ainsi, ce paragraphe ne concerne pas les paramètres physiques, mais plutôt les paramètres numériques.

#### **Sensibilité du maillage**

La taille des cellules du maillage est l'un des paramètres principaux conditionnant une bonne simulation. En général, plus le maillage est fin, plus fidèle est la simulation. FDS utilise une précision de second ordre spatio-temporelle, ce qui signifie que doubler le maillage engendre une division par 4 de l'erreur de discrétisation. Du fait de la non linéarité des équations du modèle, cela n'implique pas une division similaire de toutes les erreurs sur les paramètres calculés. Une étude de la sensibilité du maillage consiste à calculer plusieurs fois la même simulation en doublant le nombre de mailles jusqu'à la convergence des données de sortie. A chaque doublement de la densité du maillage, la durée de simulation est multipliée par 16. Ainsi, un compromis doit être choisi entre la précision du modèle due au maillage et la puissance de calcul de la machine. Les différentes études présentées ci-après montrent que la précision du modèle est fonction du diamètre caractéristique du feu divisé par la taille de la maille. Cette taille caractéristique est relative au débit calorifique considéré.

Friday [6] a étudié l'influence du maillage sur un feu de propylène de source calorifique prescrite. Le paramètre étudié était la température à 12 cm du plafond, pour un domaine de 3,0 m x 3,0 m x 6,1 m. Les tailles des mailles choisies pour l'analyse ont été 30 cm, 15 cm, 10 cm et 7,5 cm. Aucun changement important de température n'a été observé entre ces diverses simulations.

Bounagui *et al.* [7], suite aux travaux d'Alpert [8] ont étudié l'effet du maillage sur la simulation sur la température de flamme d'un brûleur à propane de 0,1 m de côté (1500 kW) et comparé cette température à la théorie. Les résultats sont présentés dans le tableau ci-dessous :

Cas étudié	Taille de la maille (m)	Température
Simulation n°1	0,20 x 0,20 x 0,20	479°C
Simulation n°2	0,14 x 0,14 x 0,14	593°C
Simulation n°3	0,10 x 0,10 x 0,10	962°C
Simulation n°4	0,08 x 0,08 x 0,08	967°C

Les résultats montrent que pour une telle flamme de 1500 kW, la convergence numérique s'observe pour une taille de mailles inférieure ou égale à 10 cm.

Xin [9] a évalué l'influence du maillage et de la taille du domaine sur des flammes brûleurs carrés au méthane de 1 mètre de côté. Il a montré que la sensibilité du maillage était particulièrement importante dans la zone autour de la surface du brûleur, et que la taille du domaine pouvait être influente si sa dimension était inférieure au double de la hauteur de flamme. La taille minimale du domaine est donc dépendante de la taille de la flamme.

Ierardi et Barnett [10] ont étudié des brûleurs carrés à méthane de 0,3 m de côté, pour des débits calorifiques allant de 14,4 kW à 57,5 kW. Dans cette étude, le domaine était de 0,6m de côté. Les calculs ont montré que le maillage le plus fin étudié (1,5 cm) donnait la meilleure reproduction de la vitesse des gaz et de la température dans la flamme. Ils ont en outre étudié une simulation de feu d'éthanol de 1 m de côté et de 670 kW, dans un domaine de 7 m de haut. Les tailles de maille étudiées étaient de 50, 33, 25 et 20 cm. La meilleure corrélation en température a été obtenue avec les mailles de 33 cm, et en vitesse avec les mailles de 50 cm. Enfin, ils ont étudié un feu d'éthanol de 1000 kW, et de 0,6 m de côté sous un plafond de 7,2 m de haut. Les maillages à 60, 30 et 20 cm ont été étudiés. Les meilleurs résultats ont été obtenus avec les mailles de 60 cm. Dans ces cas, les meilleurs résultats n'ont pas été obtenus sur les maillages les plus fins car la diffusivité des gaz était mal représentée aux échelles inférieures à celles des grilles.

Les travaux suivants de Petterson [11], ont confirmé ces observations dans le cas de feux de 55 à 110 kW, puis 5,5 à 6,6 MW. Ils ont montré l'importance de la sensibilité au maillage sur la prédiction de la température. Avec une maille de 0,15 m, des résultats satisfaisants ont été obtenus, avec une prédiction de la température à 15% près.

Musset *et al.* [12] et Mc Grattan *et al.* [13] ont travaillé sur la qualité du maillage nécessaire pour reproduire de manière satisfaisante respectivement les transferts thermiques et la hauteur de flamme. Ils ont montré qu'un raffinement minimum est nécessaire pour reproduire ces deux phénomènes. La flamme, par exemple, est limitée à la taille des cellules et des mailles trop grandes en limitent la hauteur.

### **Sensibilité des paramètres de LES**

Dans la LES, l'utilisation d'un filtre de Smagorinsky pour déterminer la viscosité des fluides fait appel à une constante dite de Smagorinsky, et notée  $C_s$ . Cette viscosité, adjointe des nombres de Prandtl ( $Pr$ ) et de Schmidt ( $Sc$ ), permet de calculer respectivement la conductivité et la diffusivité des gaz. (voir annexe 1 pour les détails) La constante de Smagorinsky est le plus sensible de ces trois paramètres. Smagorinsky a proposé à l'origine la valeur empirique de 0,23, mais les différentes recherches ont montré qu'elle pouvait se situer dans l'intervalle de 0,1 à 0,23. Un exemple d'étude de sensibilité à la constante de Smagorinsky est présenté au paragraphe 3.2.4.3.

Un excellent travail sur la validation du modèle hydrodynamique de FDS a été réalisé par Jason Clements lors de sa thèse doctorale, par simulations de mélanges de liquides de densité différente (cette technique est souvent employée, car elle permet des mouvements fluides plus lents que dans les gaz, ce qui facilite la mesure et la comparaison). Ces travaux font l'objet de la référence [14].

#### 4.2.3.3 Validations du modèle

La validation d'un modèle feu se fait en comparant un essai parfaitement connu avec sa simulation, et en évaluant les écarts à la mesure pour chaque quantité. La validation considère donc globalement la qualité des données d'entrée du modèle, la formulation mathématique des différents phénomènes physiques, et l'interprétation des mesures. De nombreuses études de validation de FDS ont été réalisées et sont repris dans le guide technique du logiciel <sup>[1]</sup>. Ce document est organisé en plusieurs parties :

- Comparaison avec des tests à grande échelle spécifiques ;
- Comparaisons avec des corrélations issues de l'ingénierie incendie ;
- Comparaison avec des essais à grande échelle publiés dans la littérature spécifique :
  - o Feux de bacs de liquides et de brûleurs à gaz ;
  - o Modèle de combustion ;
  - o Circulation des fumées dans les compartiments éloignés du feu ;
  - o Effet du vent sur un feu en extérieur ;
  - o Croissance et propagation du feu ;
  - o Réponse des détecteurs de chaleur et des sprinklers
- Comparaison avec des essais normalisés à petite échelle ;
- Comparaison avec des incendies réels

Des validations ont en outre été présentées au paragraphe 3.3.3.

#### 4.2.3.4 Antécédents remarquables

En LES, FDS a été utilisé pour de nombreuses reconstitutions. FDS est à l'heure actuelle le modèle de CFD appliquée à l'incendie le plus utilisé. Il a été utilisé pour reconstituer les incendies du WTC du 11 septembre 2001. Par ailleurs, le logiciel est utilisé pour la NASA pour simuler la combustion en environnement microgravifique. FDS est utilisé par les pompiers aux USA pour préparer les plans d'intervention, suite à plusieurs événements tragiques comme celui d'un feu de maison, le 30 mai 1999 à Washington, qui a fait l'objet d'une reconstitution réelle et d'une simulation. Un feu de restaurant, le 14 février 2000 à Houston, ou un feu d'appartement, le 22 décembre 1999, ont été simulés à des fins légales suite au décès des pompiers lors de l'intervention.

En Allemagne, il a été utilisé à des fins de sécurité nucléaire sur la combustion et la dispersion des espèces radiatives. Par ailleurs, le gouvernement Finlandais, par l'intermédiaire du laboratoire VTT, a participé au développement de la dernière version.

En France, les principaux utilisateurs du code sont le CTICM, le LNE, l'INERIS, le CNPP et le CSTB. Le CTICM et le CSTB couplent les champs de températures obtenus à des modèles de déformation et de tenue mécanique de structures. Le LNE réalise des calculs d'effets toxiques, de transferts de chaleur et des recherches fondamentales sur l'amélioration des modèles de combustion, à partir des données expérimentales.

### **4.3 Références**

- [1] NIST Special Publication 1018 : Fire Dynamics Simulator (Version 4) - Technical Reference Guide, Kevin Mc Grattan (NIST), juillet 2004
- [2] NIST Special Publication 1019 : Fire Dynamics Simulator (Version 4) - User's Guide - Kevin Mc Grattan (NIST), juillet 2004
- [3] Computational Fluid Dynamics and Fire Modeling - Présentation de Kevin Mc Grattan – NIST 2001
- [4] NORDTEST Technical Report 540 Modelling of the radiative feedback from the flames in cone calorimeter. Simo Hostikka, Jesper Axelsson - Octobre 2003
- [5] Principles of Fire Behaviour, J. Quintiere, Delmar Publishers 1997, ISBN 0-8273-7732-0

- [6] Comparison of FDS model predictions with FM/SNL fire test data NIST Technical Report GCR 01-810P, W. Mowrer, Avril 2001
- [7] Optimizing the grid size used in CFD simulations to evaluate Fire Safety in Houses - A. Bounagui, N. Benichou, C. Mc Cartney, A. Kashefin. 3<sup>rd</sup> Symposium on computational Fluid Dynamics, High Performance Computing and Virtual Reality, National Research Council, Ottawa, Ontario, Canada, Decembre 2003
- [8] Ceiling Jet Flows, R.L. Alpert, *in*. SFPE Handbook of Fire Protection Engineering, NFPA, Quincy, Massachussetts, 3<sup>rd</sup> edition, 2003
- [9] Large Eddy Simulation of Buyoant Turbulent pool Fires. Y. Xin, J.P. Gore, K. B. Mc Grattan, R.G. Rehm, H.R. Baumin. 29th Symposium (international) on Combustion - Combustion Institute, Pittsburgh, Pennsylvannie, 2002.
- [10] A quantitative method for calibrating CFD Model Calculations. J.A. Ierardi, J.R. Barnett, *in*. Proceedings of the CIB-CTBUH International conference on Tall Buildings - International Council for Research and Innovation in Building and Construction (CIB), 2003
- [11] Assessing the feasibility of reducing the grid resolution in FDS field modelling. N. Petterson, Technical Report, University of Canterbury, Christchurch, New Zealand, Février 2002
- [12] Evaluation of a Fast, Simplified Computational Fluid Dynamics model for solving room Airflow problems. A. Musser, K.B. Mc Grattan, J. Palmer, NIST Report NISTIR 6760, Juin 2001
- [13] Improved Radiation and Combustion routines for a Large Eddy Simulation fire model, K.B. Mc Grattan, J.E. Floyd, G.P. Forney, H.R. Baum, S. Hostikka, *in*. Fire Safety Science – Proceedings of the 7th International Symposium - International Association For Fire Safety Science, 2002
- [14] Experimental Verification of the Fire Dynamics Simulator (FDS) Hydrodynamic Model - J. M. Clement, University of Canterbury, Christchurch, New Zealand, October, 2000
- [15] Comparing Compartment Fires with Compartment Fire Models, Nelson, H. E. and Deal, S, Fire Safety Science – Proceedings of the Third International Symposium, International Association for Fire Safety Science, 1991
- [16] Comparison of FPE Tool Fire Simulator With Data From Full Scale Experiments, R. Vettori, L. Madrzykowski, NISTIR 6470, NIST 2000
- [17] FPE TOOL User's Guide; Nelson, H. E., NISTIR 4439, NIST 1990
- [18] Technical References : FPE TOOL : Fire Protection Tools for Hazard Estimation, H. E. Nelson, NISTIR 4380, NIST 1990
- [19] Technical Reference Guide for FPEtool Version 3.2, NISTIR 5486, S. Deal, NIST 1994
- [20] Assessment of CFAST, W. W. Jones, ISO/TC92/SC4 Workshop on Assessment of Calculation Methods in FSE, April 10, 2006 , Southwest Research Institute, USA
- [21] CFAST – Consolidated Model of Fire Growth and Smoke Transport (Version 6), Technical Reference Guide - W. Jones, R. Peacock, G. Forney, and P. Reneke, NIST Special Publication 1026 (2005).

## **Annexes :**

**Annexe 1 : Les outils de modélisation zone du LNE – FPE Tools Fire Simulator**

**Annexe 2 : Les outils de modélisation zone du LNE – Ozone**

**Annexe 3 : Les outils de modélisation zone du LNE – CFAST**

**Annexe 4 : L'outil de modélisation champ du LNE : FDS**

**Annexe 5 : Exemple de formulation d'un modèle de flux réactif en  $k - \varepsilon$**

## **Annexe 1 :**

### **Les outils de modélisation zone du LNE – FPE Tools Fire Simulator**

Description détaillée des algorithmes utilisés

Fire Simulator est un outil utilisant les équations du modèle ASETBX et inclus dans la suite FPE Tools, distribuée par le NIST. Fire Simulator est un modèle 2 zones pour pièce unique, simulant les conditions générées par des feux pré- et post-flashover dans une pièce pouvant être équipée de sprinklers, de détection et ayant de nombreux attributs de ventilation possibles. L'outil est simple et rapide et permet au LNE de sélectionner rapidement des scénarios lors de l'étude de danger, en fonction des effets locaux. En effet, l'outil permet de suivre :

- La température et une estimation de la composition des fumées ( $O_2$ , CO et  $CO_2$ ) ;
- Les transferts de chaleur par les parois et plafond ;
- La montée en température et l'activation des sprinklers et détecteurs de chaleur, en fonction de leur RTI et de leur température d'activation ;
- L'activation des détecteurs de fumée ;
- Les effets de ventilations naturelle ou forcée ;
- Le développement du feu. Au flashover, dont les conditions de température sont spécifiées par l'utilisateur, le débit de combustion et les ouvertures peuvent être redéfinis.

Dans l'outil, il est possible d'entrer directement une courbe de feu pré-flashover spécifiée à partir de la littérature ou de données expérimentales obtenues sur un objet isolé. Dans la phase post-flashover, le feu est limité par la ventilation. Un algorithme de limite du débit de combustion en fonction de la teneur en oxygène est implémenté dans l'outil.

Un des avantages de l'outil est la possibilité de réviser les conditions de simulation en cours de calcul, en fonction des conditions atteintes. Cette capacité est essentielle dans le cas d'une utilisation pour sélectionner des scénarios lors d'études multicritères.

Les équations de conservation sont traitées par des procédures mathématiques qui enregistrent d'où une quantité provient, où elle se trouve et où elle se dirige à chaque pas de temps. Les lois de conservation traduisent qu'une quantité ne peut pas apparaître ou disparaître sans qu'il y ait eu des échanges correspondants. Il existe trois lois de conservation : la masse, le mouvement et l'énergie. Considérer les variations de ces quantités implique préalablement de définir le système considéré. Par convention, une quantité apparaît si elle a été produite ou a été importée dans le système. Si elle disparaît, cela signifie qu'elle a été consommée ou évacuée à l'extérieur du système. Si les quantités apparaissent plus vite qu'elles ne disparaissent, alors il y a accumulation.

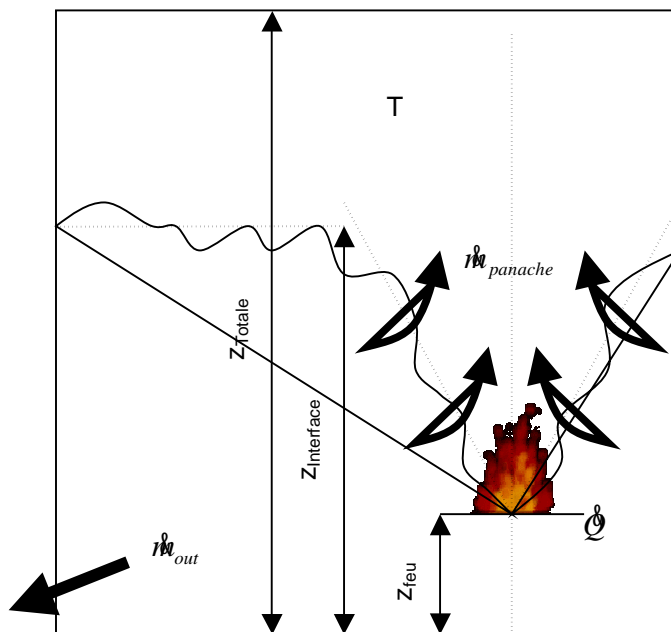
En réalité, les quantités de masse, de mouvement et d'énergie sont conservées dans la réalité, mais seules les quantités de masse et d'énergie sont considérées dans le modèle de zone. En effet, la quantité de mouvement n'est pas considérée du fait de la résolution spatiale et de l'assimilation des ouvertures à des zones d'échange unidirectionnelles. Les quantités considérées sont alors traduites en équations mathématiques non linéaires. De ce fait, elles ne peuvent être résolues mathématiquement et le sont donc numériquement. Le développement de ces équations est très proche pour la masse et l'énergie.

Le système global étudié est représenté par le compartiment spécifié. Le bilan massique général de ce système s'écrit de la manière suivante :

$$\left[ \begin{array}{c} \text{débit massique} \\ \text{entrant dans le système} \end{array} \right] + \left[ \begin{array}{c} \text{débit massique généré} \\ \text{dans le système} \end{array} \right] - \left[ \begin{array}{c} \text{débit massique} \\ \text{sortant du système} \end{array} \right] - \left[ \begin{array}{c} \text{débit massique consommé} \\ \text{dans le système} \end{array} \right] = \left[ \begin{array}{c} \text{débit massique accumulé} \\ \text{dans le système} \end{array} \right]$$

Le bilan énergétique général s'écrit :

$$\left[ \begin{array}{c} \text{débit énergétique} \\ \text{entrant dans le système} \end{array} \right] + \left[ \begin{array}{c} \text{débit énergétique} \\ \text{généré dans le système (feu)} \end{array} \right] - \left[ \begin{array}{c} \text{débit énergétique} \\ \text{sortant du système} \\ \text{(rayonnement, convection)} \end{array} \right] - \left[ \begin{array}{c} \text{débit énergétique évacué} \\ \text{dans le système} \\ \text{(échauffement des parois...)} \end{array} \right] = \left[ \begin{array}{c} \text{débit énergétique accumulé} \\ \text{dans le système} \end{array} \right]$$



Le débit massique sortant du système est donné par :

$$\dot{m}_{out} = \frac{(1 - \lambda_c) \cdot \dot{Q}}{Cp_{\infty} \cdot T_{\infty}} \quad z_{interface} > -z_{feu} \quad (1)$$

$$\frac{(1 - \lambda_c) \cdot \dot{Q}}{Cp_{\infty} \cdot T} \quad z_{interface} = -z_{feu}$$



Le débit d'air entraîné par le panache est calculé à l'aide de la formule analytique basée sur la corrélation d'Alpert et le nombre de Froude du feu suivante :

$$\dot{m}_{panache} = 0,21 \cdot \rho_{\infty} \cdot \sqrt{g} \cdot z_{interface}^{\frac{5}{2}} \cdot \mathcal{Q}^{*\frac{1}{3}} \quad (2)$$

Le nombre de Froude du feu s'écrit dans ce cas :  $\mathcal{Q}^* = \frac{(1-\lambda_r) \cdot \mathcal{Q}}{\rho_{\infty} \cdot C_p \cdot T_{\infty} \cdot \sqrt{g} \cdot z_{interface}^{\frac{5}{2}}} \quad (3)$

Conceptuellement, le panache agit comme une pompe entraînant les produits de combustion et l'air frais dans la couche supérieure. L'énergie utilisée pour cet entraînement provient du débit calorifique du feu. L'entraînement est le processus par lequel un fluide environnant est aspiré dans un jet de fluide mobile. Le jet fluide est entraîné par sa flottabilité ou par le mouvement initial. Dans le cas présent, le mouvement initial n'est pas considéré et le flux est gouverné par la flottabilité. Dans le modèle considéré, cet entraînement est caractérisé par une corrélation expérimentale, car il est très complexe et correspond difficilement à un modèle théorique. Néanmoins, cette corrélation est fortement dépendante de la taille du panache et dans une moindre mesure de sa flottabilité. Le processus d'entraînement par le panache ralentit, puis cesse lorsque le ralentissement et la perte de flottabilité correspondent aux conditions du milieu environnant, ici la couche chaude.

Le fluide environnant est entraîné dans le panache en se mélangeant aux fumées sur les bords de ce dernier. Ce mélange se produit principalement en raison du frottement entre les gaz chauds mobiles et le gaz froid environnant, mais aussi dans une moindre mesure du fait de la diffusion. Des turbulences liées au cisaillement de l'écoulement se produisent et engendrent l'aspiration par dépression, à l'arrière de ces vortex, de quantités d'air frais. Le volume de mélange résultant augmente, ce qui est encore accentué par le refroidissement du gaz et entraîne un panache en forme de V, qui s'étale à mesure que l'élévation augmente. Les frottements entre le panache et l'air environnant dissipent par ailleurs une partie de l'énergie cinétique de ces gaz. La quantité d'air frais entraînée dans le panache est proportionnelle à la hauteur d'entraînement du panache à la puissance de 5/3. De ce fait, la localisation de la hauteur initiale du foyer est un paramètre essentiel.

Le sous-système considéré étant la couche froide d'air sous la fumée, une analyse du bilan de conservation de la masse est réalisée à partir de l'équation bilan générale. Le premier terme, le débit massique entrant dans le système, est nul car aucune ventilation entrante n'est considérée. Le second terme, le débit massique généré dans le système, est nul. Le troisième terme, le débit massique sortant du système, dépend de la hauteur de la couche de fumée (équation 1). Lorsque la couche de fumée atteint le plancher, aucune masse de gaz ne peut sortir de la couche froide car celle-ci est inexistante. Lorsque l'interface entre la couche chaude et la couche froide se trouve au-dessus du foyer, le panache entraîne alors de l'air de la couche froide vers la couche chaude selon l'équation 2, ce qui entraîne une perte de matière pour le sous-système « couche froide ». Le quatrième terme, le débit massique consommé dans le système, est nul dans le cas de la couche froide. Le débit d'accumulation peut alors être exprimé par l'étude de la dérivée de la masse de gaz dans la couche froide en fonction du temps. La variation de la masse de gaz présente dans la couche froide s'écrit alors :

$$\frac{dm_{couche\ froide}}{dt} = \rho_{\infty} A_{sol} \frac{d(z_{totale} - z_{interface})}{dt} \quad (4)$$

$$\rho_{\infty} A_{sol} \frac{dz_{interface}}{dt} = \begin{cases} (-\dot{m}_{out} - \dot{m}_{panache}) & \text{pour } 0 < z_{interface} \leq z_{totale} \\ -\dot{m}_{out} & \text{pour } -z_{feu} < z_{interface} \leq 0 \\ 0 & \text{pour } z = -z_{feu} \end{cases} \quad (5)$$

En opérant le changement de variables suivant,

$$\tau = \frac{t}{t_0} \quad \zeta = \frac{z_{interface}}{L_c} \quad \phi = \frac{T}{T_\infty} \quad \Phi = \frac{\dot{Q}}{\dot{Q}_0} \quad (6)$$

L'équation (7) peut être établie :

$$\frac{d\zeta}{d\tau} = \begin{cases} -c_1 \cdot \Phi - c_2 \cdot \Phi^{\frac{1}{3}} \cdot \zeta^{\frac{5}{3}} & \text{pour } 0 < \zeta \leq \zeta_{totale} \\ -c_1 \cdot \Phi & \text{pour } -\zeta_{feu} < \zeta \leq 0 \\ 0 & \text{pour } \zeta = -\zeta_{feu} \end{cases} \quad (7)$$

L'équation 7 est alors non dimensionnelle et sert de loi de conservation de masse pour le logiciel. Le premier terme de l'équation représente la contribution massique de la pyrolyse du combustible. Le second terme représente la contribution en masse de l'entraînement d'air dans le panache. Ce terme disparaît lorsque la hauteur d'interface est au-dessous du foyer. Dans ce cas, le panache ne peut entraîner d'air de la couche froide vers la couche chaude, car il se trouve entièrement dans cette dernière et n'est alors pas pris en compte dans le calcul.

Le changement de variables opéré permet au système d'équations d'être étendu à tous systèmes d'unités. La même opération peut être reproduite pour le bilan énergétique, à partir de quelques hypothèses :

$$\rho_\infty \cdot T_\infty = cste \quad \text{et} \quad \bar{\rho} = \frac{1}{(z_{totale} - z_{interface})} \cdot \int_{z_{interface}}^{z_{totale}} \rho(s) ds$$

Le bilan énergie devient alors :

$$\frac{d\phi}{d\tau} = \begin{cases} \frac{\phi \left[ c_1 \cdot \Phi - (\phi - 1) c_2 \cdot \Phi^{\frac{1}{3}} \cdot \zeta^{\frac{5}{3}} \right]}{(\zeta_{totale} - \zeta)} & \text{pour } 0 < \zeta \leq \zeta_{Totale} \\ \frac{c_1 \cdot \phi \cdot \Phi}{(\zeta_{totale} - \zeta)} & \text{pour } -\zeta_{Feu} \leq \zeta \leq 0 \end{cases} \quad (10)$$

Le premier terme de l'équation 10 représente l'énergie produite par la combustion. Le second terme représente la contribution énergétique de l'air frais entraîné dans le panache. Ce terme est négatif, car il correspond à un refroidissement lié à l'entraînement d'air frais. La première formulation est le bilan énergétique appliqué lorsque l'interface de la couche de fumée est au-dessus du foyer et la seconde lorsqu'elle est en-dessous. Dans ce cas, le terme lié au panache est absent, comme précédemment pour le bilan matière.

Les variables  $c_1$  et  $c_2$  sont respectivement définies par les équations (11) et (12) ci-dessous :

$$c_1 = \frac{(1 - \lambda_c) \cdot t_c \cdot \dot{Q}_0}{\rho_\infty \cdot Cp \cdot T_\infty \cdot A_{sol} \cdot L_c} \quad c_2 = \left[ \frac{0,21 \cdot t_c}{A_{sol}} \right] \cdot \left[ \frac{(1 - \lambda_r) \cdot \dot{Q}_0 \cdot g \cdot L_c^2}{(\rho_\infty \cdot Cp \cdot T_\infty)} \right]^{\frac{1}{3}}$$

La conservation de l'énergie est appliquée à un sous-système considérant uniquement la couche de gaz chauds. Dans ce modèle, le bilan énergie n'est pas résolu pour la couche froide. Les équations 7 et 10 sont des équations différentielles ordinaires couplées de premier ordre, non linéaires et non homogènes (ODE). Le couplage est lié à la présence dans les deux équations de la limite de la couche chaude discrétisée ( $\zeta$ ). Cette dépendance est traitée par une résolution simultanée. Malgré l'utilisation d'un système non dimensionnel, les deux équations possèdent des limites physiques.

La forme des équations mathématiques résolues par le modèle est légèrement différente de celle présentée précédemment (équations 7 et 10). Cette différence résulte de l'emploi d'une solution numérique plutôt que d'une solution analytique. Une des conséquences de l'approche numérique est un état quasi-stationnaire entre deux pas de temps. Des différences entre un feu réel et la solution numérique peuvent se produire si le pas de temps est trop important pour reproduire le détail du feu réel. Afin de résoudre des équations, des conditions limites doivent être fournies. Ces valeurs initiales peuvent être appliquées car l'état au début du feu est en général bien connu. Ces conditions définissent une hauteur initiale nulle de la couche de fumée, et

surtout une condition initiale de  $\frac{d\phi}{d\tau}$  différente de zéro quand  $\tau$  tend vers 0. Ces conditions ont été spécifiées par Cooper<sup>4</sup> et sont reprises ci-dessous :

$$\begin{aligned} \zeta_{\tau=0} &= \zeta_{Totale} \\ \phi_{\tau=0} &= 1 + \frac{c_1}{c_2} \zeta_{Totale}^{-\frac{5}{3}} \end{aligned} \quad (13)$$

$$\frac{d\phi}{d\tau_{\tau=0}} = \left[ \frac{c_1}{c_2} \right] \cdot \left[ \frac{2 \cdot \phi_{\tau=0} + 5 \cdot \left( c_1 + \zeta_{Totale}^{\frac{5}{3}} \cdot c_2 \right)}{6 \cdot \zeta_{Totale}^{\frac{8}{3}}} \right]$$

<sup>4</sup> Cooper, L.Y., and Stroup, D.W., "Calculating Available Safe Egress Time from Fires" National Bureau of Standards. (U.S.A.), NBSIR 82-2587, Gaithersburg, MD 20899, 1982.

## **Annexe 2 :**

### **Les outils de modélisation zone du LNE - Ozone**

Description détaillée des algorithmes utilisés

# 1 GENERALITES

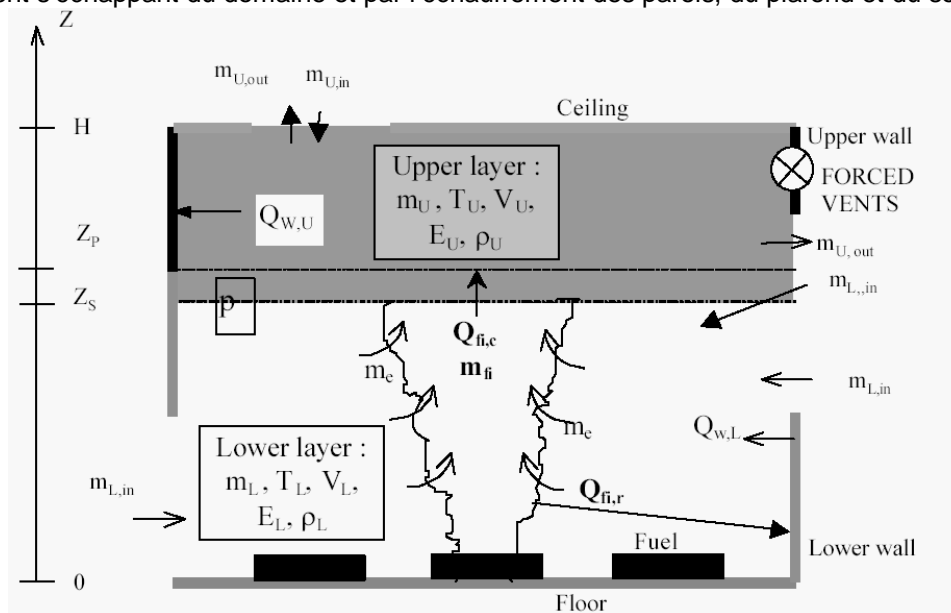
Le logiciel Ozone a été développé par l'université de Liège pour déterminer l'impact thermique d'un feu sur une structure. Il résout les bilans matière et énergie, et le transfert thermique dans situations de local unique. Il dispose de deux jeux d'équations, en fonction de l'état de développement. La première traduit les situations stratifiées en deux zones et la seconde les situations à une zone en cas de feu développé. Le logiciel permute d'un mode à l'autre en fonction de quatre critères différents, le principal étant basé sur la température de la couche chaude (500°C). Les critères sont décrits dans la référence [33], paragraphe 8.

# 2 MODÈLE DEUX-ZONES

Les modèles numériques à deux zones sont en général basés sur 11 variables physiques, reliées entre elles par 7 relations directes et 4 équations différentielles décrivant les bilans matière et énergie dans les deux zones. L'intégration temporelle de ces équations permet le calcul des évolutions des différentes variables caractéristiques au sein des deux zones.

Le bilan matière traduit à chaque instant que la variation de masse observée correspond à la somme de la masse de gaz produit par le feu, de la masse d'air entrant par les ouvertures, auxquelles il est retranché la masse de gaz sortant par les ouvertures.

Le bilan énergie traduit l'équilibre entre l'énergie produite par le processus de combustion et apportée par l'air entrant d'une part et celle qui est absorbée par l'échauffement des gaz, par la sortie des gaz chauds, par le rayonnement s'échappant du domaine et par l'échauffement des parois, du plafond et du sol d'autre part.



Les 11 variables décrivant les espèces gazeuses dans le compartiment sont :  $m_U$  et  $m_L$ , respectivement les masses de gaz des couches chaude et froide,  $T_U$  et  $T_L$  les températures correspondantes à ces deux masses,  $E_U$  et  $E_L$  leurs énergies internes,  $\rho_U$  et  $\rho_L$  les densités de ces masses et  $p$  la pression absolue, considérée comme uniforme dans le compartiment. Ces variables sont liées entre elles par les 7 relations suivantes :

$$\begin{aligned} \rho_U &= \frac{m_U}{V_U} & \rho_L &= \frac{m_L}{V_L} \\ E_U &= C_v(T) \cdot m_U \cdot T_U & E_L &= C_v(T) \cdot m_L \cdot T_L \\ p &= \rho_U \cdot \mathfrak{R} \cdot T_U & p &= \rho_L \cdot \mathfrak{R} \cdot T_L \\ V &= V_U + V_L \end{aligned}$$

$C_v(T)$  représente la capacité thermique massique à volume constant du gaz dans le compartiment et  $\mathfrak{R}$  la constante universelle des gaz parfaits. Le  $C_p$  et le  $C_v$  d'un gaz sont reliés par les relations suivantes :

$$\mathfrak{R} = C_p(T_i) - C_v(T_i) \qquad \gamma(T_i) = \frac{C_p(T_i)}{C_v(T_i)}$$

Le bilan matière instantané peut alors s'écrire de telle sorte qu'il traduise, par couche de gaz, les échanges entre les zones et le feu, entre les zones et l'extérieur et entre les zones elles-mêmes. Il sépare les effets de la ventilation forcée et de la ventilation naturelle. Pour les deux couches de gaz, le bilan matière s'écrit alors :

$$\begin{aligned} \dot{m}_U &= \dot{m}_{U,V out} + \dot{m}_{U,H out} + \dot{m}_{U,H in} + \dot{m}_{U,F out} + \dot{m}_{U,F in} + \dot{m}_e + \dot{m}_{fi} \\ \dot{m}_L &= \dot{m}_{U,V in} + \dot{m}_{L,V in} + \dot{m}_{L,V out} + \dot{m}_{L,H out} + \dot{m}_{L,H in} + \dot{m}_{L,F out} + \dot{m}_{L,F in} - \dot{m}_e \end{aligned}$$

La variable  $\dot{m}_{fi}$  représente la masse de matière produite par la combustion,  $\dot{m}_e$  désigne la masse d'air de la couche froide entraînée par le panache dans la couche chaude. Les termes  $\dot{m}_{U,X in}$  et  $\dot{m}_{U,X out}$  représentent respectivement, pour la couche supérieure (indice U - Upper) les échanges en entrée et en sortie par les ouvertures verticales (X=V), horizontales (X=H) ou par la ventilation forcée (X=F). Il en va de même pour la couche froide (indice L - Lower). A noter : Le gaz pénétrant par une entrée d'air verticale dans la couche chaude est entièrement transféré à la couche froide.

Par analogie, le bilan énergie prend en compte les échanges entre zones, entre les zones et les parois et avec l'environnement extérieur. Il s'écrit alors pour la couche chaude :

$$\dot{Q}_U = \dot{Q}_{U rad} + \dot{Q}_{U wall} + \dot{Q}_{U,V out} + \dot{Q}_{U,H in} + \dot{Q}_{U,H out} + \dot{Q}_{U,F in} + \dot{Q}_{U,F out} + C_p(T_L) \cdot \dot{m}_e \cdot T_L + 0,7 \cdot HRR$$

Le logiciel estime donc que 70% du débit calorifique correspond à de la chaleur apportée par convection. De plus, le terme associé à l'énergie apportée par l'entraînement de gaz par le panache est simplifié et basé sur la température de la couche froide. Comme précédemment, la chaleur entrant en couche chaude par les ouvertures verticales n'est pas prise en compte en couche chaude, au contraire des termes entrant correspondants à de la ventilation forcée et à des ouvertures horizontales.

Le bilan énergie correspondant à la couche froide s'écrit alors :

$$\dot{Q}_L = \dot{Q}_{L rad} + \dot{Q}_{L wall} + \dot{Q}_{U,V in} + \dot{Q}_{L,V in} + \dot{Q}_{L,V out} + \dot{Q}_{L,H in} + \dot{Q}_{L,H out} + \dot{Q}_{L,F in} + \dot{Q}_{L,F out} - C_p(T_L) \cdot \dot{m}_e \cdot T_L$$

Comme précédemment, les indices U et L se réfèrent respectivement aux couches supérieure et inférieure, les indices H, V et F correspondent aux ouvertures horizontales, verticales et forcées et les indices *in* correspondent aux flux entrants et *out* aux flux de chaleur sortants.

Dans ces quatre équations-bilans, les termes correspondant à une diminution de masse ou d'énergie sont par convention négatifs. Les quatre variables de base permettant de décrire le système sont alors les températures des deux couches  $T_U$  et  $T_L$ , la hauteur de l'interface  $Z_S$  et la différence de pression depuis les conditions initiales  $\Delta P$ . Mathématiquement, les quatre équations précédentes peuvent ainsi être transformées en équations différentielles ordinaires<sup>5</sup>, résolues par le programme :

$$\Delta p = \frac{(\gamma - 1) \cdot \dot{q}}{V}$$

$$T_U = \frac{1}{Cp(T_U) \cdot \rho_U \cdot V_U} (q_U - Cp(T_U) \cdot m_U \cdot T_U + V_U \cdot \Delta p)$$

$$T_L = \frac{1}{Cp(T_L) \cdot \rho_L \cdot V_L} (q_L - Cp(T_L) \cdot m_L \cdot T_L + V_L \cdot \Delta p)$$

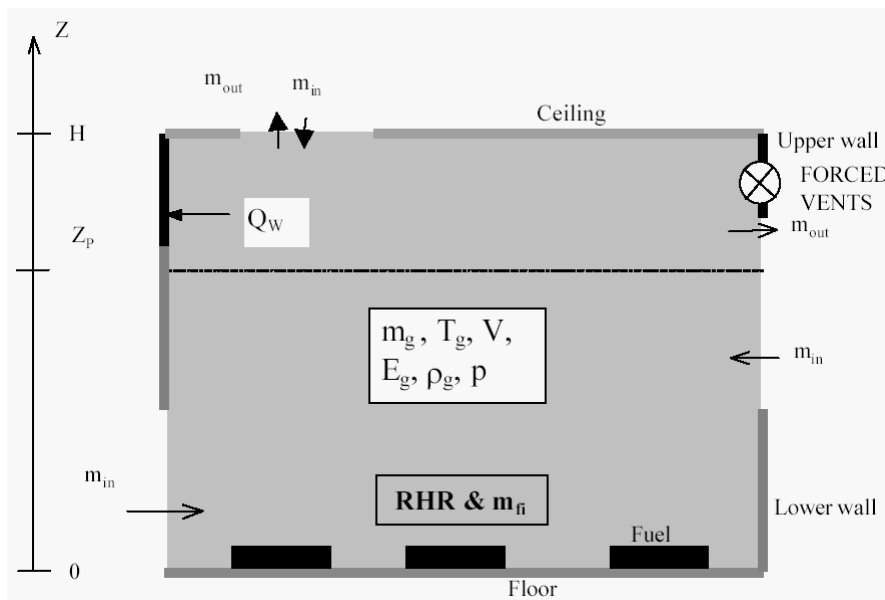
$$z_s = \frac{1}{\gamma(T_L) \cdot P \cdot A_f} ((\gamma(T_L) - 1) \dot{q} - V_L \cdot \Delta p)$$

$A_f$  désigne la surface au sol du compartiment et  $P$  la pression totale initiale

### 3 MODÈLE MONO-ZONE

L'outil OZONE permet de passer d'une situation deux zones à une situation à une zone unique. Le passage d'un mode à l'autre est présenté ultérieurement. Dans le cas d'un modèle à une seule zone, le nombre de variables décrivant un gaz moyen de l'ensemble du volume peut être réduit à six : sa masse de gaz  $m_g$ , sa température  $T_g$ ,  $E_g$ , l'énergie interne du compartiment,  $\rho_g$  la densité du gaz présent,  $V$  le volume du compartiment et  $p$  la pression interne. Les relations entre les grandeurs sont les suivantes :

$$\rho_g = \frac{m_g}{V} \quad E_g = C_v(T_g) \cdot m_g \cdot T_g \quad p = \rho_g \cdot \mathcal{R} \cdot T_g \quad V = cste$$



<sup>5</sup> Analysing and exploiting numerical characteristics of zone fire models - G. P. Forney and W. F. Moss, Fire Science & Technology, Vol. 14, No.1 & 2, 49-60, 1994.

Le bilan massique peut alors s'écrire :

$$\dot{m}_g = \dot{m}_{in} + \dot{m}_{out} + \dot{m}_{fi}$$

Le bilan énergie s'écrit :

$$\dot{\phi}_U = \dot{\phi}_{rad} + \dot{\phi}_{wall} + Cp(T_g) \cdot \dot{m}_{out} \cdot T_g + Cp(T_{out}) \cdot \dot{m}_{in} \cdot T_{out} + HRR$$

Dans ces équations, les débits de masse ou d'énergie entrant dans le compartiment ont des signe négatifs. Quatre variables de base doivent être choisies pour décrire le système. Les équations peuvent être transformées en équations différentielles ordinaires :

$$\Delta p = \frac{(\gamma - 1) \cdot \dot{\phi}}{V}$$

$$T_g = \frac{1}{Cp(T_g) \cdot \rho_g \cdot V} (\dot{\phi} - Cp(T_g) \cdot m_g \cdot T_g + V \cdot \Delta p)$$

## 4 TRANSITION D'UN MODÈLE À L'AUTRE

Le passage du mode deux zones au mode à une seule zone (et inversement) est possible en fonction de quatre critères différents :

- Critère n°1 :  $T_U > T_{FL}$  - La température des gaz de la couche chaude, composée de produits de combustion et d'air entraîné, mène au flashover. Tout le combustible du compartiment est mis à feu par flux radiatif provenant de la couche chaude. La température de flashover  $T_{FL}$  utilisée est de 500°C par défaut.
- Critère n°2 :  $Z_s < Z_q$  et  $T_z > T_{ignition}$  - Si les gaz en contact avec le combustible ont une température plus élevée que la température d'inflammation du carburant ( $T_{ignition}$ ), la propagation du feu à tout combustible du compartiment se produira par allumage convectif. Les gaz en contact (à la température  $T_z$ ) peuvent appartenir à la couche inférieure d'une situation à deux zone, à la couche supérieure d'une situation à deux zone (si la diminution de la hauteur d'interface ( $Z_s$ ) conduit à mettre le combustible dans la couche de fumée,  $Z_q$  désignant la hauteur maximum du combustible) ou à la zone unique des situations à une zone.  $T_{ignition}$  est par défaut de 300°C.
- Critère n°3 :  $Z_s < 0.2 H$  - La hauteur d'interface descend et mène à une couche inférieure très peu épaisse, non représentative du phénomène de deux zones.
- Critère n°4 :  $A_{fi} > 0.25 A_f$  - La surface du foyer est trop importante par rapport à la surface du compartiment pour considérer un feu localisé. L'aire du foyer peut être calculée à partir d'une aire maximale et du ratio entre le débit calorifique instantané et le débit calorifique maximum

Les critères 1 ou 2 mènent nécessairement à une modification du débit calorifique. Si la charge calorifique est localisée, la simulation continuera d'employer un modèle à deux zones, alors que si elle est uniformément distribuée, le modèle à une zone sera appelé. Si les critères 3 ou 4 sont atteints, le code commute au modèle à une zone, mais le débit calorifique n'est pas modifié.



## **Annexe 3 :**

### **Les outils de modélisation zone du LNE - CFAST**

Description détaillée des algorithmes utilisés

# 1 GÉNÉRALITÉS

Les équations utilisées dans le modèle CFAST ont la forme mathématique d'un système d'équations différentielles ordinaires (ODE). Ces équations sont établies à partir de la conservation de la masse, la conservation de l'énergie (la première loi de la thermodynamique), la loi de gaz parfaits et diverses relations pour la densité et l'énergie interne.

Ces équations permettent de calculer en fonction du temps des quantités comme la pression, la taille de la couche de fumées et les températures engendrées par l'accumulation de masse et d'enthalpie dans les deux couches de fumée. Le modèle CFAST se compose alors de l'ensemble des équations différentielles pour calculer l'environnement de chaque compartiment et d'une collection d'algorithmes permettant de calculer les conditions limites de masse et d'enthalpie requises par les équations différentielles.

Beaucoup de formulations basées sur ces hypothèses peuvent être établies sur la base des définitions de la densité, de l'énergie interne et de la loi idéale de gaz. Bien que analytiquement équivalentes, ces formulations diffèrent dans leurs propriétés numériques. Chaque formulation peut être exprimée en termes de débits de masse et d'énergie, représentant les échanges entre les zones du fait de phénomènes physiques. Ces phénomènes peuvent être :

- le transfert de chaleur par rayonnement ;
- l'entraînement d'air et le transport d'énergie par le panache. Un panache entraîne de l'énergie et de l'air vers la couche chaude de fumées ;
- les ventilations naturelle ou forcée. Par exemple, une ouverture échange de la masse et de l'enthalpie entre les zones connectées par celle-ci.
- la convection. Celle-ci entraîne un échauffement des parois du local étudié à partir de la température des fumées ;
- ...

La modélisation du feu par zone implique l'utilisation d'équations différentielles ordinaires raides, c'est à dire que de grandes variations temporelles sont présentes dans les solutions. Dans la situation, les variations de pression sont plus rapides que celles des paramètres comme les températures de couche ou les hauteurs d'interface. Des solveurs adaptés sont requis pour résoudre les équations différentielles ordinaires utilisées dans les modèles de zone, du fait de leur raideur.

Les méthodes de Runge-Kutta ou de Prédicteur/Correcteur comme Adams-Bashforth ou Adams-Moulton requièrent des pas de temps réduits prohibitifs en temps de calcul, pour appréhender les phénomènes de faible amplitude temporelle comme la pression. Les méthodes qui calculent le Jacobien (ou qui l'approchent) ont une stabilité beaucoup plus grande pour des problèmes raides et sont ainsi plus aptes à déterminer une solution. Ces derniers sont utilisés dans CFAST.

## 2 BASE THÉORIQUE DU MODÈLE

Dans le modèle CFAST, le compartiment étudié est divisé en deux volumes : une couche relativement chaude en partie haute (indice U) et une couche relativement froide (indice L). Les attributs de chaque couche de gaz sont sa masse  $m_i$ , son énergie interne  $E_i$ , sa densité  $\rho_i$ , sa température  $T_i$  et son volume  $V_i$ . La pression est uniforme dans le compartiment et désignée par P.

Dans un compartiment recevant des fumées issues d'un compartiment adjacent, l'entrée est calculée comme une zone de panache équivalent. Pour un compartiment, et donc deux couches de gaz, le système est alors représenté par 11 variables liées entre elles par le volume, les bilans massique et énergie, et la loi des gaz parfaits :

$$\rho_i = \frac{m_i}{V_i}$$

$$E_i = c_v \cdot m_i \cdot T_i$$

$$P = \mathfrak{R} \cdot \rho_i \cdot T_i$$

La première équation traduit la densité d'une couche de gaz. La seconde équation décrit l'énergie interne du gaz de la couche i et la troisième la loi des gaz parfaits appliquée à une couche de gaz. Le volume total correspond à la somme des volumes des deux couches de gaz :

$$V = \sum V_i = V_U + V_L$$

La capacité thermique à volume constant est obtenue à partir des relations thermodynamiques de base suivantes :

$$\gamma = \frac{C_p}{C_v} \quad \text{et} \quad \mathfrak{R} = C_p - C_v$$

Dans l'air ambiant,  $C_p = 1 \text{ kJ/kg.K}$  et  $\gamma = 1,4$ . De ces relations, quatre équations supplémentaires peuvent être définies. Les équations différentielles de la masse dans chaque couche de gaz s'écrivent :

$$\frac{dm_i}{dt} = \dot{m}_i$$

En écrivant le bilan énergie de la couche chaude, la première loi de la thermodynamique décrit que la somme du débit d'accumulation d'énergie interne et du travail correspondant à l'expansion de la couche chaude correspond au débit entrant d'enthalpie dans la couche chaude. Cela signifie que l'augmentation volumique et de température de chaque couche proviennent de l'énergie qui y est amenée ou retirée. Dans le système instationnaire constitué par le compartiment unitaire, cette relation s'écrit

$$\dot{H}_i = \frac{dE_i}{dt} + P \frac{dV_i}{dt}$$

$h_i$  désigne l'enthalpie de la couche i. Le premier terme de l'équation de droite désigne le débit d'énergie interne et le second le travail représenté par la variation de volume  $P \cdot dV$ . En considérant une capacité thermique massique  $C_p$  constante, le terme d'enthalpie s'écrit alors :

$$\dot{H} = \sum \dot{H}_i = \sum C_p \cdot \dot{m}_i \cdot T_i + \sum \dot{E}_i$$

A partir de cette expression de l'enthalpie, par substitution des deux équations précédentes pour les deux couches de gaz, il est possible d'écrire une équation différentielle pour la pression et pour le volume :

$$\frac{dP}{dt} = \frac{\gamma - 1}{V} (\sum h_i)$$

$$\frac{dV_i}{dt} = \frac{1}{P \cdot \gamma} \left( (\gamma - 1)h_i - V_i \frac{dP}{dt} \right)$$

A partir de cette équation du volume, la relation issue de la première loi de la thermodynamique peut s'écrire :

$$\frac{dE_i}{dt} = \frac{1}{\gamma} \left( \dot{H}_i + V_i \frac{dP}{dt} \right)$$

Pour la densité, l'équation différentielle du volume permet d'écrire, à partir de la relation  $\frac{d\rho_i}{dt} = \frac{d}{dt} \left( \frac{m_i}{V_i} \right)$  :

$$\frac{d\rho_i}{dt} = -\frac{1}{C_p \cdot T_i \cdot V_i} \left( (\dot{H}_i - C_p \cdot \dot{m}_i \cdot T_i) - \frac{V_i}{\gamma - 1} \frac{dP}{dt} \right)$$

Les équations différentielles correspondant à la température de chaque couche de gaz s'écrivent alors :

$$\frac{dT_i}{dt} = \frac{1}{C_p \cdot \rho_i \cdot V_i} \left( (\dot{H}_i - C_p \cdot \dot{m}_i \cdot T_i) + V_i \frac{dP}{dt} \right)$$

### 3 JEU D'ÉQUATIONS DE CFAST

Le jeu d'équations utilisé par CFAST pour les 11 variables décrivant le système est repris ci-après. La résolution de ces équations différentielles dépend des conditions initiales, définies par 7 variables issues des équations présentées en début de chapitre précédent. Les équations différentielles présentent alors de nombreuses formes possibles, mais très peu sont utilisables. Ce nombre d'équations différentielles peut être fortement réduit.

Grandeur représentée par l'équation	Formulation de l'équation
Masse de la couche i	$\frac{dm_i}{dt} = \dot{m}_i$
Pression totale dans le compartiment	$\frac{dP}{dt} = \frac{\gamma - 1}{V} (\sum h_i)$
Energie interne de la couche i	$\frac{dE_i}{dt} = \frac{1}{\gamma} \left( \dot{H}_i + V_i \frac{dP}{dt} \right)$
Volume de la couche i	$\frac{dV_i}{dt} = \frac{1}{P \cdot \gamma} \left( (\gamma - 1)h_i - V_i \frac{dP}{dt} \right)$
Densité de la couche i	$\frac{d\rho_i}{dt} = -\frac{1}{C_p \cdot T_i \cdot V_i} \left( (\dot{H}_i - C_p \cdot \dot{m}_i \cdot T_i) - \frac{V_i}{\gamma - 1} \frac{dP}{dt} \right)$
Température de la couche i	$\frac{dT_i}{dt} = \frac{1}{C_p \cdot \rho_i \cdot V_i} \left( (\dot{H}_i - C_p \cdot \dot{m}_i \cdot T_i) + V_i \frac{dP}{dt} \right)$

La couche *i* désigne alternativement la couche supérieure et la couche inférieure, ce qui représente un total de 11 équations (la pression est une équation différentielle unique pour les deux couches de gaz). Dans ces équations, la pression est calculée à partir de la pression différentielle uniquement, afin de limiter l'instabilité numérique liée à l'utilisation d'un solveur de pression absolue.

#### 4 LIMITATIONS DE L'HYPOTHÈSE DE STRATIFICATION

L'hypothèse de base des modèles de zone est de supposer qu'un compartiment puisse être divisé en deux zones de composition et de température uniformes. Dans CFAST, la zone correspondant au compartiment où se trouve le feu possède une zone supplémentaire correspondant au panache du feu. Dans un système stratifié, du fait de la non-homogénéité de l'interface entre air et fumées, l'erreur spatiale sur la hauteur de fumée est de l'ordre de 10 %<sup>6</sup>.

De plus, le concept du modèle de zone ne peut être applicable que dans le cas où la longueur et la largeur considérées sont peu différentes. Si la pièce est assimilable à un couloir, un algorithme supplémentaire a été ajouté. Pour un compartiment dont le rapport hauteur / largeur engendrerait un panache plus large que haut, les résultats du calcul seraient aussi mis en doute. Ainsi, il convient de maîtriser le domaine d'application de son étude.

Si le rapport longueur sur largeur est d'au moins 10, l'algorithme pour les couloirs doit ainsi être utilisé. Les limites suivantes sont ainsi proposées par le NIST pour CFAST :

Groupe	Conformité	Attention requise	Utilisation de l'algorithme de couloir
Rapport Longueur / largeur	$L/W < 3$	$3 < L/V < 5$	$L/V > 5$
Longueur sur hauteur	$L/H < 3$	$3 < L/H < 6$	$L/H > 6$
Largeur sur hauteur	$W/H > 0,4$	$0,2 < W/H < 0,4$	$W/H < 0,2$

<sup>6</sup> Quintiere, J.G., Steckler, K., and Corley, D., "An Assessment of Fire Induced Flows in Compartments", *"Fire Science and Technology"* vol. 4, 1 (1984).

## **Annexe 4 :**

### **L'outil de modélisation champ du LNE : FDS**

Description détaillée des algorithmes utilisés

## Table des matières

<b>1</b>	<b>Modèle hydrodynamique</b>	<b>88</b>
1.1	Equations-bilans générales	88
1.2	Equations-bilans massique, énergétique et de quantité de mouvement	89
1.3	Le bilan de quantité de mouvement	91
1.4	Le pas de temps	93
<b>2</b>	<b>Terme diffusif</b>	<b>93</b>
2.1	Définition du tenseur de viscosité	93
2.2	Expression – LES	94
2.3	Expression - DNS	95
<b>3</b>	<b>Modèle radiatif</b>	<b>96</b>
<b>4</b>	<b>Combustion</b>	<b>99</b>
4.1	Le modèle Mixture Fraction	99
4.2	Améliorations apportées au modèle Mixture Fraction Model	101
4.3	Le modèle Finite Rate (DNS)	102
<b>5</b>	<b>Transferts thermiques aux limites</b>	<b>103</b>
5.1	Transfert conductif dans les parois	103
5.2	Combustibles solides thermoplastiques	103
5.3	Combustibles liquides	104
5.4	Combustibles produisant des charbons	105
	<b>Références</b>	<b>106</b>

# 1 MODÈLE HYDRODYNAMIQUE

Le modèle FDS utilise comme modèle hydrodynamique une approximation des équations de Navier-Stokes appropriée pour les écoulements à bas nombre de Mach. L'approximation tient au fait que les équations sont filtrées pour s'accommoder des importantes variations de température et de densité. Cela confère aux équations une forme elliptique, adéquate avec les basses vitesses de flux des transferts convectifs. Le calcul peut être traité soit en DNS (Direct Numerical Simulation), dans laquelle les termes dissipatifs sont traités explicitement, soit en LES (Large Eddy Simulation), dans laquelle les turbulences de grandes dimensions sont traitées explicitement et les processus internes à la taille d'une maille de calcul sont simplifiés.

Le choix d'utiliser la DNS ou la LES dépend de l'objectif à atteindre et de la résolution de la grille de calcul. Ainsi, si le besoin est de simuler les mouvements de la fumée dans un véhicule ferroviaire, il n'est pas possible de résoudre la combustion et le transport explicitement et la LES est donc à privilégier. Au contraire, des études de fronts de flamme à petite échelle peuvent être résolues de cette manière et la DNS sera utilisée. Dans le présent document, seule la LES est détaillée.

## 1.1 Equations-bilans générales

FDS s'attache à résoudre les simples équations de conservation de masse, de moment et d'énergie pour des mélanges de gaz parfaits sensibles à la chaleur (dilatation, rayonnement...). Le jeu d'équations simplifiées est présenté ci-dessous :

Bilan massique global :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \mathbf{u} = 0 \quad (\text{équation 1})$$

Bilan massique de conservation des espèces :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho Y_i) + \nabla \cdot \rho Y_i \mathbf{u} = \nabla \cdot \rho D_i \nabla Y_i + \dot{m}_i''' \quad (\text{équation 2})$$

Bilan de quantité de mouvement :

$$\rho \left( \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \right) + \nabla p = \rho \mathbf{g} + \mathbf{f} + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} \quad (\text{équation 3})$$

Bilan énergétique :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho h) + \nabla \cdot \rho h \mathbf{u} = \frac{Dp}{Dt} - \nabla \cdot \mathbf{q}_r + \nabla \cdot \mathbf{k} \nabla T + \sum_l \nabla \cdot h_l \rho D_l \nabla Y_l \quad (\text{équation 4})$$

Notes : La force externe au fluide, représentée par le terme  $f$  dans les équations précédentes, est due aux mouvements des particules pouvant être ajoutées et aux forces extérieures. Le terme

$\frac{Dp}{Dt} = \frac{\partial p}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla p$  est une dérivée matérielle.



## 1.2 Equations-bilans massique, énergétique et de quantité de mouvement

Les bilans massiques sont implémentés par une équation d'état des grandeurs thermodynamiques. Une approximation de la loi des gaz parfaits est réalisée en décomposant la pression en trois composantes : un terme correspondant à la pression de fond, ambiante, un terme hydrostatique et un terme dénotant les perturbations de pression dues aux mouvements des gaz. L'équation prend la forme :

$$p = p_0 - p_\infty gz + \tilde{p} \quad (\text{équation 5})$$

En règle générale, le terme  $p_0$  est constant et les deux autres composantes sont relativement faibles. Cette simplification peut être ajustée dans le cas d'un feu dans une pièce fermée, où la pression va augmenter, ou lorsque la hauteur du domaine est importante, de l'ordre du kilomètre. Dans ce cas, le terme  $p_0$  ne peut pas être considéré comme constant et devient fonction de l'altitude. L'objectif d'une décomposition de la pression en trois termes est d'estimer que pour des écoulements à bas nombre de Mach, la température et la densité sont inversement proportionnelles, et que l'équation d'état 5 peut être approchée par :

$$p_0 = \rho T \mathfrak{R} \sum \left( \frac{Y_i}{M_i} \right) = \rho T \mathfrak{R} / M \quad (\text{équation 6})$$

Dans les bilans énergétique et massique, la pression  $p$  est remplacée par la pression  $p_0$ , pour filtrer les effets d'ondes acoustiques se déplaçant à des vitesses bien plus importantes que les débits caractéristiques attendus dans une combustion. L'approche d'un écoulement à bas nombre de Mach permet de remplir deux objectifs :

Premièrement, filtrer les ondes acoustiques signifie que le pas de temps de l'algorithme numérique ne dépend de la vitesse des gaz et non de celle du son. Deuxièmement, l'équation d'état modifiée réduit le nombre de variables dépendantes dans le système d'équations à une seule. Le bilan énergétique (équation 4) n'est jamais résolu explicitement, mais ses termes sources sont inclus dans l'expression de la divergence de l'écoulement, une quantité primordiale dans l'analyse. La divergence de l'écoulement est une grandeur caractéristique obtenue par la dérivée matérielle de l'équation d'état, puis par la substitution des termes obtenus à l'aide des bilans massique et énergétique. La première étape consiste alors à déterminer la capacité thermique à pression constante du mélange de gaz. :

$$c_p = \sum_l c_{p,l} Y_l$$

$C_{p,l}$  est la capacité thermique de l'espèce  $l$ , dépendante de la température. Ensuite, il convient de définir l'enthalpie à une température donnée par :

$$h = \sum_l h_l Y_l \quad \text{avec :} \\ h_l = h_l^0 + \int_{T^0}^T c_{p,l}(T') dT' \quad (\text{équation 7})$$

$h_l^0$  est l'enthalpie de formation de l'espèce  $l$ . La divergence de l'écoulement peut alors s'écrire :

$$\begin{aligned} \nabla \cdot u = & \frac{1}{\rho c_p T} \left( \nabla \cdot k \nabla T + \nabla \cdot \sum_l \int c_{p,l} dt \rho D_l \nabla Y_l - \nabla \cdot q_r \right) \\ & + \frac{M}{\rho} \sum_l \nabla \cdot \rho D_l \nabla \left( \frac{Y_l}{M_l} \right) - \frac{1}{\rho c_p T} \sum_l \int c_{p,l} dt \nabla \cdot \rho D_l \nabla Y_l \\ & + \frac{1}{\rho} \sum_l \left( \frac{M}{M_l} - \frac{h_l}{c_p T} \right) \rho \mathfrak{R} + \left( \frac{1}{\rho c_p T} - \frac{1}{p_0} \right) \frac{dp_0}{dt} \end{aligned} \quad (\text{équation 8})$$

Cette expression peut facilement être simplifiée, moyennant quelques approximations : Premièrement, considérons que :

$$\int c_{p,i} dT \approx c_{p,i} T$$

Ensuite, comme la capacité thermique peut être exprimée en fonction du nombre de degrés de liberté  $v_i$  possibles dans une molécule,

$$c_{p,i} = \left( \frac{2+v_i}{2} \right) \frac{\mathfrak{R}}{M_i} = \left( \frac{\gamma_i}{\gamma_i-1} \right) \frac{\mathfrak{R}}{M_i} \quad (\text{équation 9})$$

En considérant le ratio des chaleurs spécifiques  $\gamma_i$  constant pour chaque espèce, la seconde ligne de l'équation 8 disparaît et le terme de la ligne 3 devient :

$$\frac{1}{\rho} \sum_i \left( \frac{M}{M_i} - \frac{h_i}{c_p T} \right) \dot{w}_i''' = - \frac{1}{\rho c_p T} \sum_i h_i^0 \dot{w}_i''' \quad (\text{équation 10})$$

Ce terme correspond à une libération d'énergie par la réaction. Le dégagement d'énergie par la réaction, exprimé par unité de volume, peut alors s'écrire :

$$\dot{q}''' = - \sum_i h_i^0 \dot{w}_i'''$$

La forme approchée de la divergence de l'écoulement utilisée dans le calcul est alors :

$$\nabla \cdot u = \frac{1}{\rho c_p T} \left( \nabla \cdot k \nabla T + \nabla \cdot \sum_i \int c_{p,i} dt \rho D_i \nabla Y_i - \nabla \cdot q_r + \dot{q}''' \right) + \left( \frac{1}{\rho c_p T} - \frac{1}{p_0} \right) \frac{dp_0}{dt} \quad (\text{équation 11})$$

Notes : Dans les équations décrites, la capacité thermique est indépendante de la température, afin d'éliminer des termes mineurs dans l'expression de la divergence, et ainsi de réduire les temps de calcul. En règle générale, la capacité thermique est dépendante de la température. La variation de pression exprimée dans le terme de droite de l'expression de la divergence est non nul dans le cas d'un local fermé, pour lequel la pression ambiante  $p_0$  peut varier du fait de la libération de masse et d'énergie thermique dans le local. L'évolution de la pression en fonction du temps est obtenue en intégrant l'équation 11 sur l'ensemble du domaine  $\Omega$  :

$$\frac{dp_0}{dt} = \left[ \int_{\Omega} \frac{1}{\rho c_p T} (\nabla \cdot k \nabla T + \dots) dV - \int_{\partial\Omega} u \cdot dS \right] / \int_{\Omega} \left( \frac{1}{p_0} - \frac{1}{\rho c_p T} \right) dV \quad (\text{équation 12})$$

### 1.3 Le bilan de quantité de mouvement

Le bilan de quantité de mouvement est simplifié afin de pouvoir le résoudre facilement. Premièrement, il faut partir de la forme non-conservative de l'équation introduite précédemment,

$$\rho \left( \frac{\partial u}{\partial t} + (u \cdot \nabla)u \right) + \nabla p = \rho g + f + \nabla \tau \quad (\text{équation 13})$$

Ensuite, les substitutions suivantes sont effectuées :

1. Retrait du gradient hydrostatique de pression,  $\rho_\infty g$ , des deux membres. La simplification vient de l'expression de la pression :

$$\nabla p = \rho_\infty g + \nabla \tilde{p}$$

2. Application du vecteur-identité :

$$(u \cdot \nabla)u = \frac{\nabla u^2}{2} - u \times \omega$$

3. Division de tous les termes par la densité,  $\rho$

4. Décomposition du terme pression :

$$\frac{\nabla \tilde{p}}{\rho} = \frac{\nabla \tilde{p}}{\rho_\infty} + \left( \frac{1}{\rho} - \frac{1}{\rho_\infty} \right) \nabla \tilde{p}$$

5. Définition de H :

$$H = \frac{u^2}{2} + \frac{\tilde{p}}{\rho_\infty}$$

Le bilan de quantité de mouvement s'écrit alors :

$$\frac{\partial u}{\partial t} - u \times \omega + \nabla H + \left( \frac{1}{\rho} - \frac{1}{\rho_\infty} \right) \nabla \tilde{p} = \frac{1}{\rho} [(\rho - \rho_\infty)g + f + \nabla \cdot \tau] \quad (\text{équation 14})$$

La solution numérique de l'équation de pression obtenue par la divergence de l'équation 14 peut être simplifiée en négligeant le terme de gauche de l'équation (terme de pression externe). La décision de négliger ou de l'approcher dépend de la contribution relative de ce terme à la génération de turbulences. Lorsque le bilan de quantité de mouvement est intégré dans une boucle close qui bouge avec le fluide, sans contribution de forces externes  $f$ , il est possible d'identifier les sources de turbulence :

$$\frac{d\Gamma}{dt} = \oint \frac{1}{\rho_\infty} \left( 1 - \frac{\rho_\infty}{\rho} \right) \nabla \tilde{p} \cdot dx + \oint \frac{\rho - \rho_\infty}{\rho} g \cdot dx + \oint (\nabla \cdot \tau) \cdot dx \quad (\text{équation 15})$$

Le premier terme à droite représente le moment de torsion barocline. Le second représente le terme de flottabilité induit par les tourbillons. Le troisième terme représente la turbulence générée par la viscosité ou les mélanges à une échelle inférieure à celle des mailles, tant dans les couches limites que dans les couches de cisaillement. Dans la plupart des simulations d'incendies à grande échelle, le feu occupe une faible part du domaine de calcul.

Ainsi, il est souvent mal résolu par la grille numérique, c'est pourquoi les turbulences génèrent des zones avec de gros écarts de densité. Le mélange d'air et de produits de combustion s'effectue dans le panache au-dessus du feu, où la flottabilité est la plus importante source de turbulence. Dans ces calculs, le moment de torsion barocline peut être négligé afin de simplifier le calcul. Néanmoins, dans les simulations où la dynamique détaillée de la flamme doit être résolue, le terme de pression responsable du moment de torsion barocline ne peut être négligé. Il est alors traité à part des autres termes de pression. Dans ce cas,

l'approximation dite de Boussinesq est utilisée. Le fluide est alors encore considéré comme thermiquement dilatable, la divergence est non nulle et les bilans massique et énergétique ne sont pas modifiés.

L'objectif de négliger le torseur barocline ou de décomposer le terme pression dans le bilan de quantité de mouvement est de simplifier l'équation différentielle elliptique obtenue par la divergence de ce bilan :

$$\nabla^2 H = -\frac{\partial(\nabla \cdot u)}{\partial t} - \nabla \cdot F \quad F = -u \times \omega + \left( \frac{1}{\rho} - \frac{1}{\rho_\infty} \right) \nabla \tilde{p} - \frac{1}{\rho} ((\rho - \rho_\infty)g + f + \nabla \cdot \tau)$$

(équation 16)

La pression  $\tilde{p}$  apparaît dans les deux membres de l'équation 16. La pression dans le membre de droite provient du pas de temps précédent. La pression dans le membre de droite est toujours résolue directement. Elle provient de la variable H. Le terme de pression est décomposé pour que les coefficients du système d'équations linéaires obtenues lors de la discrétisation de l'équation 16 soient constants (c'est à dire séparables) et puissent être résolus avec vitesse et précision par une méthode directe (non itérative) qui utilise les algorithmes de la transformée de Fourier rapide (FFT). Les débits forcés ou nuls sont obtenus en imposant :

$$\frac{\partial}{\partial n} H = -F_n - \frac{\partial u_n}{\partial t}$$

(équation 17)

avec :

$F_n$  composante normale de  $F$  au niveau d'une paroi solide ou d'une ouverture,  $\frac{\partial u_n}{\partial t}$  la vitesse de changement prescrite pour la composante normale.

Initialement, la vitesse d'air est nulle dans tout le domaine de calcul. Au-niveau des limites externes ouvertes du domaine, le terme H est spécifié, en fonction de la direction du flux :

$$H = \frac{u^2}{2} \quad \text{pour un flux sortant}$$

$$H = 0 \quad \text{pour un flux entrant}$$

(équation 18)

La condition de flux sortant implique que la perturbation de pression  $\tilde{p}$  est nulle au-niveau de la limite extérieure et que H est constant le long des lignes de flux. La condition de flux sortant signifie que H est nul à une distance infinie. A la jointure deux mailles, la condition limite de pression est similaire à celle pour une paroi externe, sauf si l'écoulement est entrant. Dans ce cas, H provient de la maille adjacente.

## 1.4 Le pas de temps

Dans FDS, le pas de temps est fonction de la taille des cellules et de la vitesse d'écoulement dans ces cellules. Il est calculé par la méthode de Courant-Friedrich-Lewy (condition CFL) :

$$\delta t \max \left( \frac{\delta x}{u}, \frac{\delta y}{v}, \frac{\delta z}{w} \right) < 1$$

Cela signifie que lorsqu'une grille fine est utilisée dans une zone d'écoulement rapide, le phénomène est bien capté mais le temps de calcul peut devenir considérable. De la même manière, étendre le maillage loin des phénomènes rapides ne conduit pas nécessairement à un calcul plus rapide.

A cette condition, s'ajoute, dans le cas des grilles numériques fines en LES (< 5 mm) ou dans le cas de calcul en DNS, la condition de Von Neumann :

$$2 \max \left( v, D, \frac{k}{\rho c_p} \right) \delta t \left( \frac{1}{\delta x^2} + \frac{1}{\delta y^2} + \frac{1}{\delta z^2} \right) < 1$$

Le pas de temps est alors fonction non seulement des vitesses d'écoulement et des tailles de maille, mais aussi de la viscosité, de la diffusivité et des propriétés thermiques du gaz étudié. Cela permet de bien capter les phénomènes turbulents dans le cas des grilles fines, car le temps de séjour des gaz dans les mailles est réduit.

## 2 TERME DIFFUSIF

### 2.1 Définition du tenseur de viscosité

Le tenseur de viscosité dans le bilan de quantité de mouvement est donné par :

$$\tau = \mu \left( 2 \cdot def(u) - \frac{2}{3} (\nabla \cdot u) I \right) \quad (\text{équation 19})$$

avec  $I$  étant la matrice identité. Le tenseur de déformation est défini par :

$$def(u) \equiv \frac{1}{2} [\nabla u + (\nabla u)^t] = \begin{pmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} & \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) & \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \\ \frac{1}{2} \left( \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) & \frac{\partial v}{\partial y} & \frac{1}{2} \left( \frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) \\ \frac{1}{2} \left( \frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial z} \right) & \frac{1}{2} \left( \frac{\partial w}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z} \right) & \frac{\partial w}{\partial z} \end{pmatrix} \quad (\text{équation 20})$$

## 2.2 Expression – LES

Dans le modèle numérique, il existe deux options pour traiter la viscosité dynamique  $\mu$ . Dans la LES, comme la résolution de la grille numérique est insuffisante pour voir les processus de mélange des espèces à toutes les échelles, un modèle est utilisé pour caractériser la viscosité à des échelles internes à la maille. Suite aux travaux de Smagorinsky, la viscosité peut alors être modélisée à l'aide de l'équation :

$$\mu_{LES} = \rho (C_s \Delta)^2 \left( 2(\text{def}(u)) \cdot (\text{def}(u)) - \frac{2}{3} (\nabla \cdot u)^2 \right)^{\frac{1}{2}} \quad (\text{équation 21})$$

avec  $C_s$  constante empirique (la constante de Smagorinsky),  $\Delta$  longueur caractéristique de la taille d'une maille, et le terme de déformation relatif à la fonction de dissipation.

$$\Phi \equiv \tau \cdot \nabla u \equiv \mu \left( 2(\text{def}(u)) \cdot (\text{def}(u)) - \frac{2}{3} (\nabla \cdot u)^2 \right) \quad (\text{équation 22})$$

$$= \mu \left[ 2 \left( \frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + 2 \left( \frac{\partial v}{\partial y} \right)^2 + 2 \left( \frac{\partial w}{\partial z} \right)^2 + \left( \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right)^2 + \left( \frac{\partial w}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z} \right)^2 + \left( \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right)^2 - \frac{2}{3} \left( \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \right)^2 \right] \quad (\text{équation 24})$$

La fonction de dissipation représente le débit auquel l'énergie cinétique est transformée en énergie thermique. C'est un terme source du bilan énergétique généralement négligé, car petit devant les autres termes. Cette approximation est en accord avec les équations à bas nombre de Mach utilisées. Dans un calcul de LES, la conductivité thermique et la diffusivité sont liées à la viscosité par :

$$k_{LES} = \frac{\mu_{LES} c_p}{Pr} \quad (\rho D)_{i,LES} = \frac{\mu_{LES}}{Sc} \quad (\text{équation 25})$$

Le nombre de Prandtl  $Pr$  et le nombre de Schmidt  $Sc$  sont considérés comme constants pour un scénario donné. Il est néanmoins très important de considérer que la structure du panache de fumées est dominé par des turbulences à grande échelle, donc résolues et non filtrées. De plus, les difficultés d'obtenir des données expérimentales précises de ces phénomènes rend l'influence de ce filtre très difficile à évaluer. Les études réalisées au NIST ont montré que l'utilisation d'un modèle de Smagorinsky avec une valeur de  $C_s$  constante donnait des résultats satisfaisants pour la plupart des feux à grande échelle. A l'heure actuelle, certains modèles LES évolués proposent une valeur variable pour  $C_s$  en fonction de la nature de l'écoulement.

Il est important de noter que les valeurs affectées aux nombres de Prandtl et de Schmidt sont des constantes numériques du modèle, mais que ces valeurs ne concernent que les fluctuations internes aux mailles. Les flux turbulents totaux ne présentent pas nécessairement des nombres de Prandtl et de Schmidt constants.

### 2.3 Expression - DNS

Dans une simulation numérique en DNS, la viscosité, la conductivité thermique et la diffusivité des espèces sont approchées par la théorie cinétique. La viscosité de la l-ième espèce est donnée par :

$$\mu_l = \frac{26,69 \times 10^{-7} (M_l T)^{\frac{1}{2}}}{\sigma_l^2 \Omega_v} \quad \frac{kg}{m.s}$$

avec  $\sigma_l$  désignant le diamètre, en angström, de la sphère caractéristique de Lennard-Jones et  $\Omega_v$  l'intégrale de collision, une fonction empirique de la température. La conductivité thermique de la l-ième espèce est donnée par :

$$k_l = \frac{\mu_l c_{p,l}}{Pr} \quad \frac{W}{m.K}$$

Dans ce cas, le nombre de Prandtl est pris comme valant 0,7. La viscosité et la conductivité thermique d'un mélange de gaz s'expriment alors :

$$\mu_{DNS} = \sum_l Y_l \mu_l \quad k_{DNS} = \sum_l Y_l k_l$$

Le coefficient binaire de diffusion de la l-ième espèce diffusant dans la m-ième est donné par :

$$D_{l,m} = \frac{2,66 \times 10^{-7} T^{\frac{3}{2}}}{M_{l,m}^{\frac{1}{2}} \sigma_{l,m}^2 \Omega_D}$$

avec :

$$M_{l,m} = 2 \left( \frac{1}{M_l} + \frac{1}{M_m} \right)^{-1},$$

$$\sigma_{l,m} = \frac{(\sigma_l + \sigma_m)}{2}$$

et  $\Omega_D$  désignant l'intégrale de collision en diffusion, une fonction empirique de la température. Il est alors considéré que le diazote est l'espèce dominante dans tous les scénarii de combustion considérés, et ainsi que l'espèce m dans laquelle diffusent les autres est toujours le diazote.

### 3 MODÈLE RADIATIF

L'équation de transport radiatif (RTE) pour un media absorbant, émettant et diffusant est :

$$s \cdot \nabla I_\lambda(x, s) = -[\kappa(x, \lambda) + \sigma(x, \lambda)]I(x, s) + B(x, \lambda) + \frac{\sigma(x, \lambda)}{4\pi} \int_{4\pi} \Phi(s, s') I_\lambda(x, s') d\Omega' \quad (\text{équation 26})$$

avec  $I_\lambda(x, s)$  étant l'intensité du rayonnement à la longueur d'onde  $\lambda$ ,  $\mathbf{s}$  le vecteur directeur de l'intensité,  $\kappa(x, \lambda)$  et  $\sigma(x, \lambda)$  respectivement les coefficients d'absorption et de diffusion locaux, et  $B(x, \lambda)$  le terme-source d'émission. L'intégrale dans le membre de droite décrit la diffusion provenant des autres directions. Dans le cas d'un gaz non diffusant, l'équation RTE devient :

$$s \cdot \nabla I_\lambda(x, s) = \kappa(x, \lambda)[I_b(x) - I(x, s)] \quad (\text{équation 27})$$

Ici,  $I_b(\mathbf{x})$  est le terme source issu de la fonction de Planck. Pratiquement, la dépendance spectrale dans le modèle RTE ne peut pas être résolue facilement et précisément. Ainsi, le spectre est divisé en un nombre relativement restreint de bandes pour lesquelles l'équation RTE est résolue indépendamment. Les limites de ces bandes sont choisies de manière à donner une bonne représentation des plus importantes bandes réelles, en particulier pour  $\text{CO}_2$  et l'eau.

L'équation RTE devient alors :

$$s \cdot \nabla I_n(x, s) = \kappa_n(x)[I_{b,n}(x) - I(x, s)] \quad n = 1..N \quad (\text{équation 28})$$

avec  $I_n$  étant l'intégrale de l'intensité observée sur la bande  $n$  et  $\kappa_n$  le coefficient d'absorption moyen sur la bande considérée. Le terme source peut alors s'écrire sous la forme d'une fraction de rayonnement de corps noir :

$$I_{b,n} = F_n(\lambda_{\min}, \lambda_{\max}) \frac{\sigma T^4}{\pi} \quad (\text{équation 29})$$

avec  $\sigma$  étant la constante de Stefan-Boltzmann. Le calcul des facteurs  $F_n$  peut être obtenu à partir de la bibliographie dans les bandes considérées. Lorsque l'intensité correspondant à chaque bande est déterminée, l'intensité totale est calculée en sommant sur l'ensemble du spectre :

$$I(x, s) = \sum_{n=1}^N I_n(x, s) \quad (\text{équation 30})$$



Différentes études et essais ont montré que six bandes pouvaient suffire dans la plupart des cas ( $N=6$ ). Si l'absorption due à l'espèce combustible est importante, il est possible de réserver des bandes au combustible, ce qui étend le nombre de bandes à 9 ( $N=9$ ). Par simplification, le combustible est considéré comme étant du méthane. Les limites des différentes bandes sont présentées ci-dessous :

Modèle 9 bandes Espèces majoritaires	1	2	3	4	5	6	7	8	9	
	Suies	CO <sub>2</sub> H <sub>2</sub> O Suies	HC Suies	Suies	CO <sub>2</sub> Suies	H <sub>2</sub> O Suies	H <sub>2</sub> O HC Suies	Suies	Suies	
$\nu$ (cm <sup>-1</sup> )	10000	3800	3400	2800	2400	2174	1429	1160	1000	50
$\lambda$ (μm)	1,00	2,63	2,94	3,57	4,17	4,70	7,00	8,62	10,0	200

Modèle 6 bandes Espèces majoritaires	1	2	3	4	5	6
	Suies	CO <sub>2</sub> H <sub>2</sub> O Suies	HC Suies	CO <sub>2</sub> Suies	H <sub>2</sub> O HC Suies	Suies

Même avec un nombre réduit de bandes  $N$ , la solution de  $N$  équations de transport radiatif est très gourmande en temps calcul. Mais dans la plupart des incendies à grande échelle, les suies sont la principale espèce contrôlant le rayonnement issu de la flamme et de la couche de fumées. Comme le spectre d'absorption / émission des suies est continu, il est possible de considérer globalement le gaz comme un corps gris. Dans ce cas, la dépendance spectrale est groupée en une seule bande d'absorption définie ( $N=1$ ) et le terme source de rayonnement est donné à partir de la loi d'émission d'un corps noir selon l'équation :

$$I_b(x) = \frac{\sigma T(x)^4}{\pi} \quad (\text{équation 31})$$

Dans des flammes, considérées comme optiquement fines, la teneur en suies est faible comparée aux teneurs en CO<sub>2</sub> et en eau. Ainsi, considérer les flammes comme un corps gris peut engendrer une surévaluation significative du rayonnement émis. Ainsi, pour le calcul du coefficient d'absorption moyen de la bande  $\kappa_n$ , un modèle appelé RAD-CAL a été ajouté dans FDS. Au début du calcul, le coefficient d'absorption est alors tabulé en fonction de la valeur de  $Z$  et de la température. En cours de calcul, la valeur du coefficient d'absorption local est alors recherché dans la table en fonction des conditions de la maille (valeur de  $Z$  et de la température).

De plus, dans les calculs, la résolution de l'espace est souvent limitée. C'est pourquoi le terme source  $I_b$  de l'équation RTE nécessite un traitement particulier au voisinage de la surface de la flamme, car les températures sont moyennées au sein d'une maille, ce qui a tendance à les sous-estimer considérablement par rapport à ce qu'elles devraient être dans un calcul de flamme de diffusion en DNS. Or, le rayonnement étant proportionnel à la puissance quatrième de la température, il est impératif de modéliser différemment le terme source de rayonnement dans ces mailles coupées par la surface de la flamme. Le terme source de rayonnement diffère alors et les termes sources prennent alors la forme suivante :

$$\kappa I_b = \begin{cases} \frac{\kappa \sigma T^4}{\pi} & \text{Hors de la flamme} \\ \frac{\chi_r \dot{q}'''}{4\pi} & \text{Dans la flamme} \end{cases} \quad (\text{équation 32})$$

avec :

- $\dot{q}'''$  désigne la chaleur dégagée de manière chimique par la réaction par unité de volume ;
- $\chi_r$  désignant la fraction *locale* de cette chaleur dégagée sous forme radiative. Cette valeur peut provenir d'essais au cône calorimètre couplés à une mesure de flux, ou de la bibliographie.

Note : La différence entre l'utilisation d'une valeur locale de  $\chi_r$  et d'une valeur globale est faible. Pour un feu de faible diamètre, inférieur à 1m, cette valeur locale est approximativement égale au coefficient global. Lorsque la taille du foyer augmente, cette valeur globale a tendance à diminuer du fait de la réabsorption du rayonnement produit par la suie produite.

La condition limite pour l'intensité du rayonnement issu d'une paroi grise est donnée par l'équation :

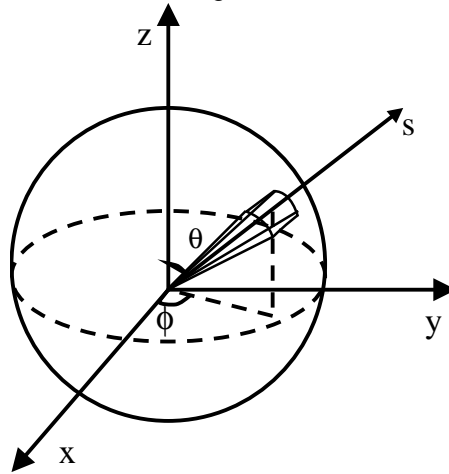
$$I_w(s) = \varepsilon I_{bw} + \frac{1-\varepsilon}{\pi} \int_{s' \cdot n_w < 0} I_w(s') \mathbf{s}' \cdot \mathbf{n}_w d\Omega \quad (\text{équation 33})$$

$I_w(s)$  est l'intensité au niveau de la paroi,  $\varepsilon$  l'émissivité, et  $I_{bw}$  l'intensité pour un corps noir à la paroi. L'équation RTE (équation 28) est résolue en utilisant une technique similaire à celle utilisée pour le transport convectif dans un volume fini, et est couramment désignée méthode FVM (pour *Finite Volume Method*).

Afin d'obtenir une bonne discrétisation utilisable pour l'équation RTE, une sphère unitaire centrée sur la maille est divisée en un nombre fini d'angles solides. Ainsi, dans chaque maille, l'équation RTE est discrétisée par intégration de l'équation 27 sur les axes  $ijk$  et l'angle solide de contrôle  $\delta\Omega'$ , ce qui donne :

$$\int_{\Omega'} \int_{V_{ijk}} \mathbf{s} \cdot \nabla I_n(x, s) dV d\Omega = \int_{\Omega'} \int_{V_{ijk}} \kappa_n(x) [I_{b,n}(x) - I_n(x, s)] dV d\Omega \quad (\text{équation 34})$$

L'intégrale définissant un volume dans le membre de gauche est remplacée alors par une intégrale sur la surface correspondant aux faces de la maille en utilisant le théorème de la divergence. En estimant que l'intensité rayonnée  $I(x, s)$  est constante sur chacune des faces de la maille parallélépipédique, l'intégrale surfacique peut être estimée par la somme des intégrales obtenues sur chaque face.



Le vecteur de flux radiatif émis  $q_r$  est alors défini par :

$$q_r(x) = \int s I(x, s) d\Omega \quad (\text{équation 35})$$

Le terme de perte d'énergie radiative est donné par l'équation :

$$-\nabla \cdot q_r(x) = \kappa(x) [U(x) - 4\pi I_b(x)] \quad (\text{équation 36})$$

$$U(x) = \int_{4\pi} I(x, s) d\Omega$$

Ensuite, l'énergie radiative nette concernant une maille est la différence entre ce qui est absorbé et ce qui est émis.

## 4 COMBUSTION

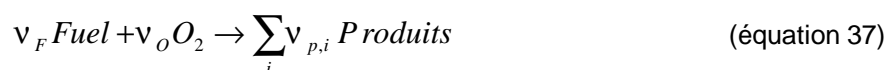
FDS permet l'utilisation de deux types de modèles de combustion. En DNS, la diffusion de l'air et du combustible peut être directement modélisée, ce qui permet d'utiliser un modèle de réaction chimique à vitesse finie. En LES, la résolution de la grille n'est pas suffisante pour modéliser ainsi la diffusion des espèces, et le modèle est basé sur un scalaire décrivant les concentrations des espèces en présence. Ce modèle est appelé « mixture fraction ».

### 4.1 Le modèle Mixture Fraction

Le modèle est basé sur l'approximation que les phénomènes radiatif et convectif à grande échelle peuvent être simulés directement, mais que les phénomènes à petite échelle (spatiale et temporelle) doivent être représentés d'une manière approximative. La nature des approximations utilisées est nécessairement fonction des limites de résolution spatiale et temporelle. Les vitesses de réaction réelles et les espèces-clés qui contrôlent le dégagement énergétique lors de la combustion sont majoritairement inconnus ou inaccessibles dans le feu. Même s'ils étaient connus, les discrétisations spatiale et temporelle imposées par les moyens de calcul actuels empêchent de pouvoir caractériser finement le processus de combustion. C'est pourquoi le modèle adopté dans FDS est basé sur le fait que la combustion est déterminée par les proportions relatives des espèces en présence. Cela implique que les espèces principales peuvent être exprimées sous la forme d'un scalaire  $Z(x, t)$ , appelé "mixture fraction".

Le scalaire décrit est une quantité conservative, qui représente en chaque point de l'espace et à chaque instant la fraction de chaque espèce. Les fractions massiques des différentes espèces sont reliées entre elles par des relations d'état. La relation de base pour le dioxygène fournit la donnée nécessaire au calcul du débit local de consommation d'oxygène. La relation d'état issue de la théorie des flammes de diffusion laminaires prend la forme d'une fonction linéaire. La flamme est considérée comme une surface, une enveloppe où s'effectuent les échanges. Le débit calorifique local est alors calculé à partir de la consommation locale d'oxygène, en considérant que le débit calorifique est directement proportionnel au débit local de consommation d'oxygène à la surface de la flamme, indépendamment de l'espèce combustible considérée. La relation utilisée, issue des travaux de Thornton, puis d'Huggett, est à la base des méthodes calorimétriques à consommation d'oxygène.

La forme générale de l'équation de combustion peut s'écrire :



Les valeurs  $v_i$  représentent les coefficients stœchiométriques pour la combustion totale du produit F en présence d'oxygène O, en produisant des effluents P. L'équation de combustion stœchiométrique (37) implique que les débits de combustion massique de combustible et d'oxygène peuvent s'écrire de la manière suivante :

$$\frac{\dot{m}_F}{v_F M_F} = \frac{\dot{m}_O}{v_O M_O} \quad (\text{équation 38})$$

La valeur du scalaire "mixture fraction" Z est alors définie :

$$Z = \frac{sY_F - (Y_O - Y_O^\infty)}{sY_F^I + Y_O^\infty} \quad s = \frac{v_O M_O}{v_F M_F} \quad (\text{équation 39})$$

Par définition, le scalaire varie de  $Z = 1$  dans une région de l'espace ne contenant que du combustible à  $Z = 0$  dans une région où la teneur en dioxygène correspond à la teneur ambiante initiale  $Y_O^\infty$ . La fraction de combustible dans le flux de combustible est notée  $Y_F^I$ . Les quantités  $M_F$  et  $M_O$  représentent respectivement les masses molaires de combustible et d'oxygène. Le "mixture fraction" satisfait aux lois de conservation obtenues par une combinaison linéaire des équations de conservation des espèces « combustible » et « oxygène » :

$$\rho \frac{DZ}{Dt} = \nabla \cdot \rho D \nabla Z \quad (\text{équation 40})$$

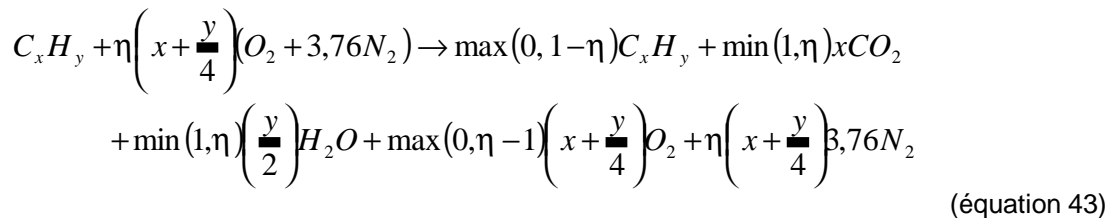
La réaction est supposée assez rapide pour que les espèces "combustible" et "oxygène" ne peuvent co-exister. La surface de la flamme est ainsi définie telle que :

$$Z(x,t) = Z_f \quad Z_f = \frac{Y_o^\infty}{sY_F' + Y_o^\infty} \quad (\text{équation 41})$$

Le fait que oxygène et combustible ne peuvent coexister engendre une relation d'état entre la fraction massique d'oxygène  $Y_o$  et  $Z$  :

$$Y_o(Z) = \begin{cases} Y_o^\infty \left(1 - \frac{Z}{Z_f}\right) & Z < Z_f \\ 0 & Z > Z_f \end{cases} \quad (\text{équation 42})$$

Les relations d'état entre réactifs et produits peuvent ainsi en être dérivées en considérant la réaction idéale suivante pour des composés hydrocarbonés :



Avec  $\eta$  paramètre compris entre 0 (Que du combustible et pas d'oxygène) à l'infini (que de l'oxygène sans combustible). Une correspondance entre  $\eta$  et  $Z$  peut être obtenue en appliquant la définition de  $Z$  (équation 39) à la partie gauche de l'équation 43). Les fractions massiques des produits de la réaction infiniment rapide (incluant l'excès de combustible ou d'oxygène) peut alors être obtenue à partir de la partie droite de cette équation. Une expression du débit calorifique local peut ainsi être obtenue à partir du bilan massique et de la relation d'état pour l'oxygène. Le point de départ est alors la relation de Huggett traduisant la correspondance entre consommation d'oxygène et débit calorifique :

$$\dot{q}''' = \Delta H_o \dot{m}'''_o \quad (\text{équation 44})$$

$\Delta H_o$  représente le facteur de Thornton, c'est à dire le débit calorifique par unité de masse d'oxygène consommée. Ce facteur vaut en moyenne environ 13100 kJ/kg  $O_2$ . Le bilan-massique sur l'oxygène permet d'écrire :

$$\rho \frac{DY_o}{Dt} = \nabla \cdot \rho D \nabla Y_o + \dot{m}'''_o \quad (\text{équation 45})$$

Cette équation peut être transformée pour exprimer la consommation locale d'oxygène à l'aide de la définition de l'équation 40 et de la relation d'état pour l'oxygène  $Y_o(Z)$  :

$$-\dot{m}'''_o = \nabla \cdot \left( \rho D \frac{dY_o}{dZ} \nabla Z \right) - \frac{dY_o}{dZ} \nabla \cdot \rho D \nabla Z = \rho D \frac{d^2 Y_o}{dZ^2} |\nabla Z|^2 \quad (\text{équation 46})$$

Cette expression de la consommation locale de dioxygène est difficilement applicable, du fait de la discontinuité de la fonction dérivée de  $Y_o(Z)$  pour  $Z = Z_f$  (stœchiométrie) . Néanmoins, une expression de la consommation d'oxygène par unité de surface pour une flamme bidimensionnelle (flamme en enveloppe) peut être obtenue à partir de l'équation 46 :

$$-\dot{m}_o'' = \left. \frac{dY_o}{dz} \right|_{z=Z_f} \rho D \nabla Z \cdot n \quad (\text{équation 47})$$

Cela signifie que la résolution s'attache à la zone pour laquelle la stœchiométrie est atteinte. Cette zone forme une surface, qui représente l'interface entre combustible et oxygène. Cette surface est la zone de production de débit calorifique.

Dans l'algorithme numérique, le débit calorifique local est calculé en déterminant la zone d'interface combustible / oxygène, puis en calculant le dégagement local dans cette zone, et enfin en distribuant cette énergie dans les cellules coupées par l'interface combustible / oxygène.

## 4.2 Améliorations apportées au modèle Mixture Fraction Model

Le modèle décrit au paragraphe précédent a quelques limitations, tant numériques que physiques.

### Limitations numériques

Les limitations numériques sont dues à la résolution de tout ce qui est inférieur à la taille des mailles. Dans le cas d'un maillage serré, la précision du transport du combustible et des processus de combustion est diminuée du fait de l'importance de la diffusion. Il est néanmoins possible de déterminer si le débit calorifique obtenu est en adéquation avec la résolution spatiale du feu. Cette évaluation peut se faire à l'aide d'une expression adimensionnelle  $D^*/\delta x$ , où  $D^*$  est le diamètre caractéristique du feu et  $\delta x$  la taille nominale d'une maille<sup>7</sup>.

$$D^* = \left( \frac{\dot{Q}}{\rho_\infty c_p T_\infty \sqrt{g}} \right) \quad (\text{équation 48})$$

La quantité  $D^*/\delta x$  peut représenter le nombre de mailles représentant le diamètre caractéristique du feu, et non nécessairement son diamètre physique. Elle est analogue à un diamètre de Froude. Plus le nombre de mailles en feu est importante, meilleure est la résolution du calcul. Pour les scénarii où  $D^*$  est relativement petit devant le diamètre physique du feu, et/ou si le maillage est serré, la surface stœchiométrique  $Z = Z_f$  va sous-estimer la hauteur des flammes. Dans ce cas, il est possible d'affecter à la surface de flammes une valeur de  $Z$  autre que la valeur stœchiométrique. Cela peut aussi être utilisé pour caractériser un feu dont le comportement est très éloigné de la combustion stœchiométrique.

$$\frac{Z_{f,eff}}{Z_f} = \min \left( 1, C \frac{D^*}{\delta_x} \right) \quad (\text{équation 49})$$

$C$  est une constante empirique valant 0,6 et utilisable pour tous types de feux. A mesure que la résolution du calcul augmente, la valeur de  $Z_{f,eff}$  approche la valeur idéale  $Z_f$ , valeur pour laquelle cette approximation devient inutile. Cette expression permet d'obtenir une valeur quantitative de la qualité de la résolution de la grille numérique par rapport non seulement à la taille des mailles, mais aussi à la taille du feu.

Une autre conséquence d'une grille numérique serrée est que la quantité d'énergie dégagée peut être disproportionnée le long du pourtour des surfaces combustibles. L'équation 47 montre que le débit calorifique par unité de surface est proportionnel au gradient local du scalaire  $Z$  et à la valeur locale de la diffusivité. Le gradient de « mixture fraction » est important à la base du feu car un flux de combustible pur rencontre l'air ambiant. La diffusivité est importante pour une grille serrée du fait de la forme du terme de viscosité de Smagorinsky. Afin d'éviter un excès d'énergie qui serait dégagée trop près du brûleur dans le cas de l'utilisation d'une grille serrée, une limite supérieure est imposée au débit calorifique par unité de surface de l'enveloppe de la flamme. Cette limite supérieure est déterminée en estimant que le feu peut être considéré comme une forme conique de surface  $A$  et de hauteur  $H$ , selon la corrélation de Heskestad :

<sup>7</sup> Le diamètre caractéristique du feu est lié à la taille du feu par la relation  $Q^* = (D^*/D)^{5/2}$  avec  $D$  diamètre physique du feu

$$\frac{H}{D} = 3,7Q^{2/5} - 1,02 \qquad A = \pi R \sqrt{R^2 + H^2} \qquad \text{(équation 50)}$$

Q\* représente le nombre de Froude du feu.

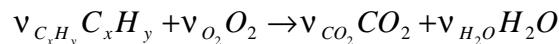
La surface réelle des flammes est plus importante que celle d'un cône, donc la limite supérieure permet d'éviter que trop d'énergie soit dégagée trop près du feu. Cette surface doit être néanmoins suffisamment haute pour ne pas interférer lorsque la grille est bien adaptée. L'énergie excédentaire prise à la base du feu est alors redistribuée à l'ensemble du volume de la flamme.

### Limitations physiques

La principale limite physique du modèle « mixture fractions » est que cette approche revient à considérer que l'oxygène et le combustible brûlent instantanément lorsqu'ils sont en présence. Pour des feux bien ventilés et à grande échelle, cette approche est suffisante. Néanmoins, si le feu se produit dans un compartiment sous-ventilé, ou si un agent extincteur comme CO<sub>2</sub> ou un brouillard d'eau sont utilisés, le combustible et l'oxygène peuvent être présents sans pour autant qu'il y ait combustion. Les mécanismes physiques correspondant sont difficiles à modéliser. Une règle simple peut néanmoins être utilisée par le modèle. Cette règle spécifie dans quelles conditions d'oxygène et de température le matériau peut brûler. La teneur limite en oxygène à température ambiante et la température critique de flamme sont les deux paramètres spécifiés. Le scalaire Z est alors utilisé pour traquer la progression du mélange de l'air environnant et du combustible, mais cet air environnant est aussi utilisé pour déterminer si la combustion doit se faire. Dans une future version de FDS, un second scalaire sera sans doute ajouté pour contrôler plus précisément la combustion.

## 4.3 Le modèle Finite Rate (DNS)

En DNS, il est possible de calculer directement la diffusion du combustible dans l'air. La réaction est alors réalisée en une étape unique :



La vitesse de réaction est alors donnée par :

$$\frac{d[C_xH_y]}{dt} = -B [C_xH_y]^a [O_2]^b e^{-E/RT}$$

Les valeurs de B, E, a et b sont issues de la littérature pour de nombreux hydrocarbures. La recherche porte actuellement sur la validité d'utiliser un système réactionnel en une seule étape, et le domaine de combustions pour lesquelles cette approximation est réalisable.

## 5 TRANSFERTS THERMIQUES AUX LIMITES

Le type de condition thermique aux limites appliqué à chaque surface dépend de la manière qu'a cette surface à s'échauffer et éventuellement à brûler, de si la vitesse de combustion est simplement prescrite

### 5.1 Transfert par conduction dans les parois

Les flux de chaleur au niveau d'une surface solide sont représentés par des gains ou des pertes de flux radiatif et convectif. Le flux radiatif au-niveau d'une surface est décrit au précédemment, particulièrement par l'équation 33.

En DNS, le flux convectif vers une surface solide est donné directement par le gradient de température du gaz à la limite :

$$\dot{q}_c'' = -k \frac{\partial T}{\partial n}$$

$n$  est la coordonnée spatiale pointant vers l'intérieur du solide.

Le calcul des flux convectifs au niveau d'une surface, en LES, est obtenu par une combinaison entre des corrélations obtenues pour un régime forcé et un régime naturel :

$$\dot{q}_c'' = h\Delta T \quad \text{W/m}^2 \quad h = \max \left[ C \Delta T^{\frac{1}{3}}, \frac{k}{L} 0,037 Re^{\frac{4}{5}} Pr^{\frac{1}{3}} \right] \quad \text{W/m}^2 \cdot \text{K}$$

(équation 51)

avec  $\Delta T$  étant la différence de température entre la paroi et la maille de fluide concomitante, prise au centre de la maille concernée,  $C$  est le coefficient de convection naturel, valant 1,43 pour une surface horizontale et 0,95 pour une surface verticale,  $L$  est la longueur caractéristique représentative de la surface solide,  $k$  la conductivité thermique du gaz,  $Re$  le nombre de Reynolds et  $Pr$  le nombre de Prandtl, tous deux basés sur l'écoulement du fluide à la surface solide. Comme le nombre de Reynolds est proportionnel à la longueur caractéristique  $L$ , le coefficient de transfert thermique est relatif à la longueur  $L$ . Pour cette raison,  $L$  vaut 1 m pour la plupart des calculs.

### 5.2 Combustibles solides thermoplastiques

Dans le calcul, il est considéré que la pyrolyse des matériaux solides se produit à leur surface, ou n'a pas lieu, selon les conditions ambiantes. Si le matériau est considéré comme épais thermiquement, c'est à dire que deux de ses faces opposées peuvent être à des températures différentes, une équation de conduction unidimensionnelle pour le matériau peut être appliquée afin de déterminer la température du matériau  $T_s(x, t)$ , avec  $x$  définissant la direction de la surface ( $x=0$ ) vers l'intérieur du matériau.

$$\rho_s c_s \frac{\partial T_s}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( k_s \frac{\partial T_s}{\partial x} \right) \quad -k_s \frac{\partial T_s}{\partial x}(0, t) = \dot{q}_c'' + \dot{q}_r'' - \dot{m}'' \Delta H_v$$

(équation 52)

avec  $\rho_s$ ,  $c_s$  et  $k_s$  désignant respectivement la densité, la capacité thermique et la conductivité thermique du matériau, éventuellement fonction de la température,  $\dot{q}_c''$  le flux convectif à la surface,  $\dot{q}_r''$  le flux radiatif net (émis – absorbé) à la surface,  $\dot{m}''$  le débit de perte de masse et  $\Delta H_v$  l'enthalpie de vaporisation du matériau. Il est estimé que la pyrolyse se produit en surface, et que l'énergie nécessaire à la vaporisation du combustible est récupérée du flux de chaleur arrivant sur cette surface. Le débit de pyrolyse est alors calculé à partir d'une équation d'Arrhenius de la forme :

$$\dot{m}'' = A \rho_s e^{-\frac{E_A}{RT}}$$

(équation 53)

$R$  est la constante des gaz parfaits. La valeur du facteur pré-exponentiel  $A$  et de l'énergie d'activation  $E_A$  peuvent être définis de telle sorte que la combustion se produise au voisinage d'une température prescrite. Le débit de pyrolyse instantané est alors gouverné par la balance énergétique au-niveau de la surface du solide.

Néanmoins, ces paramètres de l'équation d'Arrhenius sont difficilement accessibles pour la plupart des combustibles réels, et les détails de la pyrolyse de ces matériaux est souvent inconnue. Les paramètres  $A$  et  $E_A$  sont alors calculés à partir de la température d'inflammation du matériau et de la vitesse maximum de combustion, ces paramètres pouvant être facilement mesurés au cône calorimètre.

Pour un matériau considéré comme thermiquement fin, la température est considérée comme identique sur toute son épaisseur. La température  $T_s(t)$  est alors influencée par les gains et pertes dus à la convection, le rayonnement et la pyrolyse. Le bilan thermique au sein du matériau est fonction du produit de sa densité, sa capacité thermique et son épaisseur. L'équation s'écrit alors :

$$\frac{dT_s}{dt} = \frac{\dot{q}_c'' + \dot{q}_r'' - \dot{m}'' \Delta H_v}{\rho_s c_s \delta} \quad (\text{équation 54})$$

Les flux convectif et radiatif sont cette fois sommés sur la surface et l'arrière du matériau, et la pyrolyse a lieu sur les deux faces à moins qu'il soit spécifié que la face arrière n'est pas exposée. Le débit de pyrolyse est calculé de la même manière que pour un matériau thermiquement épais.

Note : Dans le cas d'un produit thermiquement fin, les valeurs individuelles de  $\rho_s$ ,  $c_s$  et  $\delta$  ne sont pas importantes en soi, seul leur produit importe. Des valeurs du produit peuvent se trouver dans la littérature spécialisée.

### 5.3 Combustibles liquides

Le débit d'évaporation d'un liquide est fonction de sa température et de sa concentration dans la phase gazeuse à sa surface. L'équilibre est atteint lorsque la pression partielle du combustible dans la phase gazeuse correspond à la pression de Clausius-Clapeyron, définie par :

$$p_{cc} = p_0 \exp \left[ - \frac{h_v M_f}{\mathfrak{R}} \left( \frac{1}{T_s} - \frac{1}{T_b} \right) \right] \quad (\text{équation 55})$$

avec  $h_v$  désignant l'enthalpie de vaporisation,  $M_f$  la masse molaire du combustible,  $T_s$  la température de surface du liquide et  $T_b$  la température d'ébullition du combustible. Le combustible est alors considéré comme un solide thermiquement épais, afin de traiter l'échange conductif en son sein. Le transfert convectif au sein du liquide n'est pas traité par FDS.



## 5.4 Combustibles produisant des charbons

Le transfert thermique et la pyrolyse des matériaux produisant des charbons, comme le bois, est traité par un modèle unidimensionnel développé par Atreya, puis Ritchie. Dans ce modèle, le front de pyrolyse est considéré comme concernant une épaisseur infiniment fine.

Le modèle inclut la conduction au sein du solide, l'évaporation de l'humidité contenue initialement dans celui-ci et la dégradation du matériau d'origine sous forme de gaz et de charbons. Les gaz sont instantanément transportés à la surface du matériau. L'équation de la balance énergétique est alors de la forme :

$$\bar{\rho}c \frac{\partial T_s}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} k_s \frac{\partial T_s}{\partial x} + \frac{\partial \rho_s}{\partial t} [\Delta H_{pyr} - C(T - T_0)] + \frac{\partial \rho_m}{\partial t} [\Delta H_{ev} - D(T - T_0)] \quad (\text{équation 56})$$

avec  $\rho_s$  la densité totale du solide,  $\rho_m$  la densité de l'eau.  $\Delta H_{pyr}$  et  $\Delta H_{ev}$  respectivement les enthalpies de vaporisation du combustible et de l'eau. La condition limite à la surface est alors donnée par :

$$-k_s \frac{\partial T_s}{\partial x}(0, t) = \dot{q}_c'' + \dot{q}_r'' \quad (\text{équation 57})$$

Ici, l'énergie nécessaire à la vaporisation du combustible n'est plus extraite du flux de chaleur incident, comme c'était le cas précédemment, mais plutôt du cœur du matériau solide au point où la pyrolyse a lieu. Cela permet de définir l'effet d'écran dû aux charbons.

Les coefficients  $C$  et  $D$  sont définis par :

$$C = \frac{\bar{\rho}_{s0} c_{p,s0} - \bar{\rho}_{char} c_{p,char}}{\bar{\rho}_{s0} - \bar{\rho}_{char}} - c_{p,g} \quad D = c_{p,m} - c_{p,g} \quad (\text{équation 58})$$

Les indices  $s0$  et  $char$  font référence au matériau brut et aux charbons. Les indices  $g$  et  $m$  font référence aux produits gazeux de la pyrolyse et à l'humidité. Les barres signifient une valeur moyenne de la quantité considérée entre la température  $T$  et la température ambiante  $T_0$ . Le débit de pyrolyse est alors modélisé à l'aide d'une équation d'Arrhénius du premier ordre de la forme :

$$\dot{m}'' = A(\rho_{s0} - \rho_{char}) e^{-E_A/RT} \quad (\text{équation 59})$$

Les coefficients  $A$  et  $E_A$  sont choisis de telle sorte que la pyrolyse se produise à une température proche de la température réelle. La pyrolyse se produit sur une épaisseur négligeable, qui progresse vers l'intérieur du matériau. La vitesse de ce front de pyrolyse au sein du matériau est donnée par :

$$v = \frac{\dot{m}''}{\bar{\rho}_{s0} - \bar{\rho}_{char}} \quad (\text{équation 60})$$

Le front de pyrolyse progresse alors à chaque pas de temps d'une distance  $\Delta x = v \Delta t$ . Le débit d'évaporation de l'humidité contenue dans le matériau est modélisé de la même manière. Les définitions suivantes sont utilisées pour calculer les propriétés thermiques du matériau durant les processus d'évaporation de l'eau et de production de charbons :

$$\bar{\rho}c = \rho_a c_{p,s0} + \rho_c c_{p,char} + \rho_m c_{p,m} \quad k_s = k_{s0} \frac{\rho_a}{\rho_{s0}} + k_{char} \frac{\rho_c}{\rho_{char}} \quad (\text{équation 61})$$

$$\rho_a = \rho_{s0} \frac{\rho_s - \rho_{char}}{\rho_{s0} - \rho_{char}} \quad \rho_c = \rho_s - \rho_a \quad (\text{équation 62})$$

Les propriétés thermiques du matériau et de ses charbons peuvent être dépendantes de la température. Le choix des données d'entrée est difficile, car des valeurs précises sont souvent impossibles à atteindre, en

particulier pour les paramètres de l'équation d'Arrhénius. C'est pourquoi il est possible de contrôler le débit de pyrolyse à partir de l'enthalpie de vaporisation et du transfert de chaleur au sein du matériau.

## RÉFÉRENCES

- [1] NIST Special Publication 1018 : Fire Dynamics Simulator (Version 4) - Technical Reference Guide, K. Mc Grattan (NIST) juillet 2004
- [2] NIST Special Publication 1019 : Fire Dynamics Simulator (Version 4) - User's Guide K. Mc Grattan (NIST) juillet 2004
- [3] Computational Fluid Dynamics and Fire Modeling - Présentation de K. Mc Grattan – NIST 2001
- [4] NORDTEST Technical Report 540 Modelling of the radiative feedback from the flames in cone calorimeter. Simo Hostikka, Jesper Axelsson - Octobre 2003
- [5] Principles of Fire Behaviour, J. Quintiere, Delmar Publishers 1997, ISBN 0-8273-7732-0
- [6] Comparison of FDS model predictions with FM/SNL fire test data NIST TECHNICAL REPORT GCR 01-810, P. Friday, W. Mowrer, Avril 2001
- [7] Optimizing the grid size used in CFD simulations to evaluate Fire Safety in Houses A. Bounagui, N. Benichou, C. Mc Cartney, A. Kashefin. 3rd Symposium on computational Fluid Dynamics, High Performance Computing and Virtual Reality, National Research Council, Ottawa, Ontario, Canada, Decembre 2003
- [8] Ceiling Jet Flows, R.L. Alpert, *in*. SFPE Handbook of Fire Protection Engineering, NFPA, Quincy, Massachusetts 3ème édition, 2003
- [9] Large Eddy Simulation of Buoyant Turbulent pool Fires. Y. Xin, J.P. Gore, K. B. Mc Grattan, R.G. Rehm, H.R. Baumin. 29th Symposium (international) on Combustion - Combustion Institute, Pittsburgh, Pennsylvannie, 2002.
- [10] A quantitative method for calibrating CFD Model Calculations. J.A. Ierardi, J.R. Barnett *In*. Proceedings of the CIB-CTBUH International conference on Tall Buildings - International Council for Research and Innovation in Building and Construction (CIB), 2003
- [11] Assessing the feasibility of reducing the grid resolution in fds field modelling. N. Petterson, Technical report, University of Canterbury, Christchurch, New Zealand, Février 2002
- [12] Evaluation of a Fast, Simplified Computational Fluid Dynamics model for solving room Airflow problems. A. Musser, K.B. Mc Grattan, J. Palmer NIST Report NISTIR 6760, Juin 2001
- [13] Improved Radiation and Combustion routines for a Large Eddy Simulation fire model. K.B. Mc Grattan, J.E. Floyd, G.P. Forney, H.R. Baum, S. Hostikka, *In*. Fire Safety Science – Proceedings of the 7th International Symposium - International Association For Fire Safety Science, 2002
- [14] Experimental Verification of the Fire Dynamics Simulator (FDS) Hydrodynamic Model - J. M. Clement, University of Canterbury, Christchurch, New Zealand, October, 2000

## Annexe 5 :

### Exemple de formulation d'un modèle de flux réactif en $k - \varepsilon$

L'exemple présenté ici est un modèle de CFD adapté à la combustion. Le modèle est adapté pour traiter un écoulement quasi-laminaire (source à  $Re=2000$ ), la turbulence étant traitée par un modèle RNG  $\kappa-\varepsilon$ , adapté aux forts gradients de vitesses. Les conditions d'écoulement aux surfaces solides sont traitées par une approche bas-Reynolds.

## 1 MODÉLISATION RÉACTIONNELLE

Le modèle de combustion est basé sur les 6 réactions possibles. La vitesse de réaction est établie à partir d'une formulation de type Arrhénius, de la forme suivante :

$$k_c = k_s \cdot [A]^a \cdot [B]^b e^{-\frac{E_A}{RT}}$$

Les 6 réactions sont établies à partir des données thermodynamiques et des constantes issues de la littérature et résumées ci-dessous :

Réaction	$k_s$	$E_A$ (J.kmol <sup>-1</sup> )	a	b	Référence
$CO + \frac{1}{2}O_2 \rightarrow CO_2$	$1,3 \times 10^{11} \times [H_2O]^{0,5}$	$1,256 \times 10^8$	1,0	0,5	[4]
$CH_4 + \frac{3}{2}O_2 \rightarrow CO + 2H_2O$	$4,4 \times 10^{11}$	$1,2552 \times 10^8$	0,5	1,25	[5]
$H_2 + \frac{1}{2}O_2 \rightarrow H_2O$	$4,462 \times 10^{12}$	$4,2 \times 10^7$	1,0	1,0	[6]
$C_6H_6 + \frac{9}{2}O_2 \rightarrow 6CO + 3H_2O$	$2,4 \times 10^{11}$	$1,2552 \times 10^8$	1,0	1,85	[7]
$C_{10}H_8 + 7O_2 \rightarrow 10CO + 4H_2O$	$9,2 \times 10^6 \times T$	$8 \times 10^7$	0,5	1,0	[6]
$CO + H_2O \leftrightarrow CO_2 + H_2$	124,03	$1,26 \times 10^7$	1,0	1,0	[6]

Le benzène et le naphthalène sont présents ici pour simuler la formation de charbons, mais le processus n'est que partiellement modélisé. Pour un flux turbulent, la combustion turbulente est traitée non pas globalement par le modèle d'Arrhénius, mais par un modèle « Eddy Dissipation Concept »<sup>[11]</sup>, calculant la vitesse réactionnelle d'Arrhénius à l'échelle spatiale et temporelle des turbulences. Ce type de modèle est adapté à un flux réactif.

## 2 MODÉLISATION DU TRANSFERT DE CHALEUR

Le transfert radiatif de chaleur est traité par un modèle *Discrete Ordinates* <sup>[10]</sup>, intégrant une équation RTE dans quatre directions. En résultat, un terme de transfert radiatif noté  $S_r$  est introduit dans le bilan énergétique. La forme de l'équation RTE utilisée est la suivante :

$$\nabla \cdot (I(\vec{r}, \vec{s}) \vec{s}) + (\alpha + \sigma_s) I(\vec{r}, \vec{s}) = \alpha n^2 \frac{\sigma T^4}{\pi} + E_p + \frac{\sigma_s}{4\pi} \int_0^{4\pi} \Phi(\vec{s}, \vec{s}') I(\vec{r}, \vec{s}') d\Omega'$$

$I$  représente l'intensité du rayonnement en  $W.m^{-2}$ ;

$\sigma$  désigne la constante de Boltzman ( $5,67 \times 10^{-8} W.m^{-2}.K^{-4}$ ) ;

$\sigma_s$  désigne le coefficient de diffusion et  $\alpha$  le coefficient d'absorption ( $m^{-1}$ ) ;

$E_p$  désigne le terme source d'émission.

L'intégrale dans le membre de droite décrit la diffusion provenant des autres directions.

Le coefficient d'absorption utilisé pour la phase solide est basé sur un modèle d'absorption moyen fonction de la concentration en  $CO_2$  et en  $H_2O$  <sup>[9]</sup>.

Le terme introduit dans le bilan énergétique contient par ailleurs l'enthalpie correspondant aux différentes réactions, noté  $S_{fr}$  et défini par :

$$S_{fr} = - \sum_j \left( \frac{h_j^0}{M_j} + \int_{T_{ref,j}}^T C_{p_j} \cdot dT \right) \cdot R_{j,r}$$

$h_j^0$  désigne l'enthalpie standard du composé  $j$ , en  $J.kg^{-1}$  et  $R_{j,r}$  désigne la vitesse de réaction homogène, en  $kg.m^{-3}.s^{-1}$ . Cette dernière s'obtient de la manière suivante :

$$R_{j,r} = \frac{(\zeta^*)^2 \chi}{\tau^*} (Y_j^* - Y_j)$$

avec :  $\zeta^* = C_\zeta \left( \frac{v \cdot \varepsilon}{k^2} \right)^{\frac{3}{4}}$      $\tau^* = C_\tau \left( \frac{v}{\varepsilon} \right)^{\frac{1}{2}}$      $\chi = \frac{\rho}{[1 - (\zeta^*)^3]}$      $C_\zeta = 2,1377$  et  $C_\tau = 0,4082$

## 3 EQUATIONS GOUVERNANT LE MODÈLE

### 3.1 Bilan massique

Le bilan massique global s'écrit :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v}) = S_m$$

Le bilan de transport de l'espèce  $j$  s'écrit alors :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho Y_j) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} Y_j) = - \nabla \cdot \left( - \left( \rho D_{0,j} + \frac{\mu}{Sc} \right) \nabla Y_j \right) + R_j$$

$Sc$  est le nombre de Schmidt.

### 3.2 Bilan quantité de mouvement et turbulence

Le bilan de quantité de mouvement issu des équations de Navier-Stokes s'écrit :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \vec{v}) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \vec{v}) = -\nabla p + \nabla \cdot (\vec{\tau}) + \rho \vec{g} + \vec{F}$$

Le terme  $\vec{F}$  désigne la force externe au fluide. La turbulence est alors traitée par un modèle  $\kappa$ - $\epsilon$  dont l'approche est détaillée dans la référence [8]. L'équation prend la forme suivante :

$$\frac{\partial(\rho U_j k)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \rho \alpha_k v_{eff} \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + \rho v_t \left( \frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial U_i}{\partial x_j} - \rho \epsilon$$

$$\frac{\partial(\rho U_j \epsilon)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \rho \alpha_\epsilon v_{eff} \frac{\partial \epsilon}{\partial x_j} \right] + C_{\epsilon 1} \frac{\epsilon}{k} \rho v_t \left( \frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial U_i}{\partial x_j} - C_{\epsilon 2} \rho \frac{\epsilon^2}{k} - R$$

avec :

$$v_{eff} = v \left( 1 + \sqrt{\frac{C_\mu}{v} \frac{k}{\epsilon}} \right) = v \left( 1 + \sqrt{\frac{v_t}{v}} \right)$$

$$C_\mu = 0,0845$$

$$C_{\epsilon 1} = 1,42$$

$$C_{\epsilon 2} = 1,68$$

$\nu$  désigne la viscosité cinématique (en  $m^2 \cdot s^{-1}$ ),  $k$  désigne l'énergie cinétique de la turbulence et  $\epsilon$  son taux de dissipation.  $\alpha_k$  et  $\alpha_\epsilon$  désignent les inverses du nombre de Prandtl turbulent pour  $k$  et  $\epsilon$ . En général,  $\alpha_k = 1$  et  $\alpha_\epsilon = 1,3$ .

### 3.3 Bilan énergie

Le bilan énergie s'écrit :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho H) + \nabla \cdot (\vec{v}(\rho H + p)) = \nabla \cdot \left[ k_{eff} \nabla T - \sum_j (h_j \vec{J}_j) + (\vec{\tau} \cdot \vec{v}) \right] + S_f$$

avec :

$$H = \sum_i Y_i h_i = \sum_i Y_i \int_0^T C_p \cdot dt$$

$H$  désigne l'enthalpie globale du système

$S_f$  a été décrit précédemment dans le modèle de transfert thermique.

et

$$k_{eff} = k + k_t \quad k_t = \frac{\nu_t C_p}{Pr}$$

$k$  désigne la conductivité thermique, en  $W \cdot m^{-1} \cdot K^{-1}$ . Le nombre de Prandtl utilisé est un nombre de Prandtl turbulent.

## 4 MÉTHODE NUMÉRIQUE

Un solveur résout séquentiellement les équations de continuité, de mouvement, d'énergie, de rayonnement et d'espèces. Les équations régissant le modèle sont converties en équations algébriques qui peuvent être résolues numériquement par une technique basée sur le contrôle des volumes par un schéma de type loi puissance. La simulation converge lorsque les résidus sont estimés constants à une valeur inférieure à  $10^{-5}$ .

### RÉFÉRENCES

- [1] Mécanique des fluides numérique - D. F. Fletcher, C. Xuereb - *in*. Techniques de l'Ingénieur J 1 050
- [2] Combustion turbulente - R. Borghi - *in*. Techniques de l'Ingénieur BE 8 325
- [3] Numerical Investigation of Air Injection during Biomass Gasification in a Two-stage Downdraft Configuration – L. Gerun, J. Bellettre, M. Tazerout, MCS4 Lisbon, October 6-10 2005.
- [4] D. Shin, S. Choi, Combustion and Flame 121, pp 167-180 (2000)
- [5] W.P. Jones, R.P. Lindstedt, Combustion and Flame 73, pp 233-249 (1998)
- [6] C. DiBlasi, Chemical Engineering Science, vol 55, pp 2931-2944 (2000)
- [7] C.K. Westbrook, F.L. Dryer, Prog. Energy Combustion Science, vol 10, pp 1-57 (1984)
- [8] J. L. Lopez-Matencio, J. Bellettre, A. Lallemand, I.J. Transport Phenomena 5(3), pp 185-201 (2003)
- [9] T.F. Smith, Z.F. Shen, J.N. Friedman, Journal of Heat Transfer vol 104, pp 602-608 (1982)
- [10] E.H. Chui, G.D. Raithby, Numerical Heat Transfer vol 23, pp 269-288 (1993)
- [11] B.F. Magnussen, Nineteenth AIAA Meeting, St Louis, 1981