

THÈSE

En vue de l'obtention du

DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ DE TOULOUSE

Délivré par *l'Institut National Polytechnique de Toulouse*
Discipline ou spécialité : *Génie des Procédés et de l'Environnement*

Présentée et soutenue par *Nishant PANDYA*
Le *1er décembre 2009*

Titre : *Analyse de sensibilité paramétrique d'un outil de modélisation des conséquences de scénarios d'accidents. Application à la dispersion atmosphérique de rejets avec le logiciel Phast.*

JURY

Christian DELVOSALLE, Professeur, Faculté Polytechnique de Mons	*(Rapporteur)*
Pascal FLOQUET, Professeur, INPT/ENSIACET	
Nadine GABAS, Professeur, INPT/ENSIACET	*(Directrice de thèse)*
André LAURENT, Professeur Emérite, INPL/ENSIC	*(Rapporteur)*
Eric MARSDEN, Docteur en Informatique, ICSI	
Yvon MOUILLEAU, Ingénieur, Société Technip	

Ecole doctorale : *MEGeP*
Unité de recherche : *Laboratoire de Génie Chimique (UMR 5503)*
Directeur(s) de Thèse : *Nadine GABAS*

à Yujie (宇杰).

Exprimer les remerciements reste une tache très difficile pour moi, que ce soit à l'oral ou à l'écrit. En attendant de nouveaux développement dans la communication par télépathie, je vais essayer d'exprimer ma gratitude en quelques mots à toutes les personnes m'ayant -- directement ou indirectement, scientifiquement et/ou moralement -- aidé pendant mon travail de thèse. On m'a appris que les remerciements les plus longs sont parfois les moins sincères. Je serais donc bref.

Je remercie ma directrice de thèse, *Professeur Nadine GABAS*, pour ses conseils avisés, sa grande disponibilité et ses encouragements tout au long de mes travaux.

J'adresse mes remerciements à *Monsieur René DELEUZE*, Directeur Général de l'Institut pour une Culture de Sécurité Industrielle (ICSI) pour m'avoir accueilli au sein de l'Institut, et *Monsieur Gilles VACHER*, Secrétaire Général de l'ICSI, pour son dynamisme et ses encouragements.

Je tiens à également remercier *Professeur Joël BERTRAND*, Directeur du Laboratoire de Génie Chimique, de m'avoir accueilli au sein du laboratoire.

Je tiens à remercier les partenaires industriels de ce projet pour avoir financé ma thèse et leurs correspondants pour leur soutien et la richesse des échanges scientifiques pendant nos réunions. J'aimerais également témoigner de mon appréciation pour l'implication de *Monsieur Henk WITLOX*, de la société DNV Software, qui n'a pas hésité à partager son expertise sur le logiciel Phast.

Un grand merci à *Professeur André LAURENT* et *Professeur Christian DELVOSALLE* d'avoir accepté la charge de rapporter sur ce mémoire et pour leurs commentaires constructifs. Je remercie également *Professeur Pascal FLOQUET* de me faire l'honneur de présider mon jury de thèse, ainsi que pour son implication pendant la première phase de thèse. Je remercie *Monsieur Yvon MOUILLEAU* d'avoir accepté de participer au jury.

Je ne peux pas oublier *Monsieur Eric MARSDEN*, ICSI, qui m'a beaucoup aidé pendant ces trois années, particulièrement par son expertise en informatique et par sa bonne humeur ; sans lui la forme des résultats serait moins attrayante.

Maintenant j'en profite pour remercier mes collègues de l'ICSI, *Pauline, Dominique, Zina, Caroline, Gilles, ...,* pour leur sympathie et l'ambiance amicale.

J'ai une pensée pour mes parents, mon frère, mes proches ainsi que ma belle famille.

Enfin, toutes mes pensés vont à *Yujie*, ma femme, pour son dévouement éternel, ses sacrifices et son attention sans limite depuis le début de mon séjour en France. Elle est toujours à mes côtés pendant les moments difficiles de ma vie. Je lui dédie cette thèse.

ધન્યવાદ

RESUME

Dans le cadre de la réalisation des études de danger, la réglementation française prévoit le calcul de périmètres de sécurité autour des établissements industriels à risques. Ces valeurs conditionnent la mise en œuvre de mesures importantes en matière de prévention des accidents et de protection des cibles (personnes, environnement et installations). La libération accidentelle de gaz toxique et/ou inflammable constitue un scénario d'accident majeur pouvant conduire à des distances d'effets importantes. Il en résulte la propagation de nuages dans l'atmosphère selon des phénomènes extrêmement complexes régis par de nombreuses variables. L'étude de la dispersion atmosphérique de ces nuages fait appel à des logiciels de simulation comme le logiciel commercial *Phast* (Process Hazard Analysis Software Tool, DNV) de type intégral, très souvent utilisé dans les analyses de risques d'installations industrielles. Les utilisateurs de cet outil ont constaté que les résultats de simulation sont dépendants d'un très grand nombre de paramètres de modélisation ajustables. Or, même si l'utilisateur est expert, il ne dispose pas toujours d'une bonne connaissance des valeurs pertinentes pour ces paramètres en fonction des scénarios simulés, ni de leur impact sur les résultats du modèle.

L'objectif est de mener une étude approfondie sur l'analyse de la sensibilité paramétrique du logiciel *Phast*. L'enjeu principal est l'acquisition de connaissances sur la simulation de scénarios accidentels et de leurs impacts, permettant une meilleure utilisation de cet outil de calcul.

La technique mise au point a consisté à coupler *Phast* et l'outil d'analyse de sensibilité *SimLab*, ce qui permet d'exécuter automatiquement un grand nombre de simulations en faisant varier l'ensemble des paramètres du modèle de façon simultanée. La méthode d'analyse de sensibilité globale choisie, *EFAST* (Extended Fourier Amplitude Sensitivity Test), est basée sur l'analyse de la variance des sorties du modèle pour le calcul des indices de sensibilité.

Nous avons étudié des scénarios de rejet continus pour six produits différents (monoxyde d'azote, ammoniac, chlore, azote, n-hexane et fluorure d'hydrogène), sélectionnés pour couvrir une large gamme de caractéristiques physiques (gaz lourd, gaz passif, gaz léger, gaz réactif avec l'atmosphère) et de conditions de stockage (gaz sous pression, gaz liquéfié sous pression, liquide saturé, ...) ainsi que pour leur importance industrielle dans les analyses des conséquences d'accidents.

Nous avons tout d'abord fait l'analyse de deux termes sources de *Phast* (fuite sur un réservoir et rupture totale d'une canalisation courte) en considérant les sorties telles que le débit de rejet, la vitesse et la température finales du rejet. En ce qui concerne l'analyse du modèle de dispersion de *Phast* appelé *UDM* (Unified Dispersion Model), la démarche a été séparée en deux étapes. La première étape de « screening » a pour but de comparer l'influence de l'ensemble des paramètres (y compris ceux liés aux conditions météorologiques et au terme source). Elle nous a permis de vérifier que les paramètres les plus influents sont ceux liés au terme source et aux conditions météorologiques, et non les paramètres « internes », liés à la modélisation. La deuxième étape est l'analyse de l'influence globale des paramètres de modélisation, autres que les paramètres météo et du terme source, sur une plage large de valeurs (souvent les bornes minimales et maximales permises par le logiciel de modélisation). Pour chaque produit, nous avons décomposé les scénarios de base en sous-scénarios correspondant à des conditions de rejet différentes (combinaisons de débit, hauteur de rejet, angle de rejet et conditions météorologiques) dans le but de faciliter l'interprétation des résultats. Cette granularité

fine dans les scénarios étudiés nous a permis d'interpréter les sensibilités des paramètres sans la confusion qui résulterait du mélange de phénomènes physiques très différents.

Une étude complémentaire a consisté à effectuer une analyse de sensibilité locale de ces paramètres autour de leur valeur par défaut. Ceci nous permet d'évaluer l'influence de ces paramètres dans des situations plus proches de celles d'un utilisateur averti de l'outil. La comparaison des résultats issus des analyses globales et locales nous a permis de mettre en évidence l'impact des plages de paramètre sélectionnées sur les indices de sensibilité et sur la variabilité des sorties.

Ce travail, qui a nécessité plusieurs dizaines de milliers d'heures de calcul, nous a permis d'obtenir plusieurs types de résultat :

- Une classification des paramètres du modèle selon leur degré d'influence sur la variabilité de différentes sorties (concentrations en champ proche, intermédiaire et lointain, distances correspondant à une valeur toxique de référence).
- Pour chaque paramètre, une classification des scénarios (produits rejetés et conditions de rejet) en fonction du degré d'influence sur la variation de différentes sorties.
- Une analyse comparative par produit, indiquant (pour des conditions de rejet données) quels paramètres sont les plus influents sur les sorties.

En outre, nous avons constaté une forte dépendance des indices de sensibilité aux conditions de rejet et aux produits, ce qui conforte notre choix de décomposer finement les scénarios.

MOTS-CLES

risque industriel, rejet accidentel, dispersion atmosphérique, modélisation de conséquences, logiciel Phast, analyse de sensibilité

TABLE DES MATIERES

REMERCIEMENTS iii

RESUME v

INTRODUCTION GENERALE 13

Contexte et objectifs 13

Structure du manuscrit 14

Collaboration 14

CHAPITRE I. MODELISATION DE LA DISPERSION ATMOSPHERIQUE - METHODES D'ANALYSE DE SENSIBILITE 15

I.1 Introduction 15

I.2 Modélisation de la dispersion atmosphérique 15

I.2.1 Termes sources 16

I.2.1.1 Les rejets continus 16

I.2.1.2 Les rejets instantanés 18

I.2.1.3 Termes sources dans *Phast* 18

I.2.2 Phénomène de dispersion atmosphérique 21

I.2.2.1 État physique initial du produit 21

I.2.2.2 Modes de rejets 21

I.2.2.3 Propriétés physiques du produit 21

I.2.3 Modèles de dispersion atmosphérique 22

I.2.3.1 Modèles de type gaussien 22

I.2.3.2 Modèles de type intégral 23

I.2.3.3 Modèles tridimensionnels 24

I.2.3.4 Comparaison des différents modèles 25

I.2.4 Conditions météorologiques 25

I.2.4.1 Structure de l'atmosphère 26

I.2.4.2 Profil vertical de la vitesse du vent 27

I.2.4.3 Profils verticaux de température et de pression 27

I.2.4.4 Conditions météorologiques dans le cadre des études de dangers 28

I.2.5 Modèle UDM de dispersion de Phast 29

I.2.5.1 Les modes de rejets 30

I.2.5.2 Les variables et les équations de dispersion 32
I.2.5.3 Phases de dispersion atmosphérique 34
I.2.5.4 Temps de « moyennage » (« averaging time ») 37
I.2.5.5 Classification des paramètres de *Phast* 39
I.3 L'analyse de sensibilité 41
I.3.1 Méthodes de criblage ou « screening » 42
I.3.2 Méthodes d'analyse de sensibilité locale 42
I.3.3 L'analyse de sensibilité globale 43
I.3.4 Indices de sensibilité 43
I.3.5 Méthodes d'estimation des indices de sensibilité globale 44
I.3.5.1 Méthode de Sobol' 45
I.3.5.2 Méthode FAST (Fourier Amplitude Sensitivity Test) 46
I.3.5.3 Comparaison des méthodes FAST et Sobol' 46
I.3.6 Analyse de la variabilité de la sortie d'un modèle 47
I.4 Analyse de sensibilité d'outils de modélisation de dispersion atmosphérique : bibliographie 49
I.5 Conclusion 51
CHAPITRE II. DEMARCHE METHODOLOGIQUE 53
II.1 Introduction 53
II.2 Stratégie d'analyse 53
II.2.1 Produits et modules de Phast étudiés 53
II.2.2 Stratégie de construction des scénarios 55
II.2.2.1 Nécessité de décomposer les scénarios 55
II.2.2.2 Stratégie d'étude 56
II.3 Démarche expérimentale 59
II.4 Caractéristiques des paramètres étudiés 60
II.4.1 Paramètres de la famille B 62
II.4.2 Paramètres de la famille C 63
II.5 Sorties étudiées 64
II.5.1 Sorties « concentrations » 64
II.5.2 Sorties « distances » 64
II.6 Études préliminaires 66

II.6.1 Dispersion passive de l'air : comparaison des indices de sensibilité 66
II.6.2 Choix de la taille de l'échantillon et répétabilité des calculs 70
II.7 Conclusion 73
CHAPITRE III. RESULTATS ET DISCUSSIONS 75
III.1 Introduction 75
III.2 Représentations des résultats 77
III.2.1 Tableau des indices de sensibilité du 1er ordre 77
III.2.2 Tableau des indices totaux 77
III.2.3 Tableau d'influence 78
III.2.4 Corrélation 79
III.2.5 Histogrammes des sorties 79
III.2.6 Tableau relatif à la variabilité des sorties 80
III.2.7 Scénarios pour lesquels un paramètre est sensible 80
III.2.8 « Scatter plot » d'une sortie 82
III.3 Analyse des termes sources 83
III.3.1 Terme source « Leak » 83
III.3.2 Terme source « Line rupture » 89
III.4 Screening 91
III.4.1 Screening du scénario NO 92
III.4.2 Screening du scénario NH_3 96
III.5 Analyse de l'UDM 100
III.5.1 Paramètres fixés et paramètres étudiés 100
III.5.1.1 Paramètres de bifurcation 100
III.5.1.2 Paramètres fixés 102
III.5.1.3 Paramètres étudiés 103
III.5.2 Résultats pour le scénario NO-1 104
III.5.3 Analyse par paramètre 107
III.5.3.1 Influence du paramètre α_1 107
III.5.3.2 Influence du paramètre α_2 110
III.5.3.3 Influence du paramètre C_{Da} 111
III.5.3.4 Influence du paramètre e_{pas} 115
III.5.3.5 Influence des paramètres liés à la transition passive 117

III.5.3.6 Influence du paramètre C_E 123
III.5.3.7 Influence du paramètre W_p 124
III.5.4 Analyse comparative par produit 125
III.5.5 Caractéristiques spécifiques de certains produits 127
III.5.5.1 Scénarios HF 127
III.5.5.2 Scénarios N_2 130
III.5.5.3 Scénarios n-hexane 132
III.5.6 Analyse de l'influence locale 133
III.6 Etudes complémentaires 137
III.6.1 Etude des paramètres corrélés 137
III.6.2 Analyse des erreurs de Phast 141
III.7 Conclusion 145
Conclusions et perspectives 147
Bibliographie 151

LISTE DES TABLEAUX

Tableau I.1 Tableau de comparaison des modèles de dispersion 25
Tableau I.2 Table de décision de Turner 26
Tableau I.3 Classes de stabilité de Doury (CEA) 26
Tableau I.4 Comparaison des classes de stabilité atmosphérique 27
Tableau I.5 Conditions météorologiques retenues dans les études de dangers 29
Tableau I.6 Les 4 familles de paramètres de Phast 39
Tableau I.7 Paramètres de la famille A 40
Tableau II.1 Quelques propriétés des produits étudiés 54
Tableau II.2 Indices de sensibilité du 1er ordre pour le scénario de screening NO 57
Tableau II.3 Paramètres de « bifurcation » pour les scénarios NO 58
Tableau II.4 Plages de valeurs des paramètres du modèle UDM 61
Tableau II.5 Définition des sorties « distances » 64
Tableau II.6 Classes de stabilité et paramètres associés (Duijm et al., 1996) 67
Tableau II.7 Paramètres étudiés pour le scénario passif 68
Tableau II.8 Sorties considérées pour le scénario passif 68
Tableau II.9 Caractéristiques des 2 bancs de test mis en œuvre 69
Tableau II.10 Répétabilité des indices de sensibilité du 1er ordre des 4 paramètres influents 72
Tableau III.1 Récapitulatif de l'ensemble des scénarios étudiés 76
Tableau III.2 Indices de sensibilité du 1er ordre du scénario 5 de NO 77
Tableau III.3 Indices de sensibilité totaux du scénario 5 de NO 78
Tableau III.4 Influence mesurée par la grandeur CVSi (scénario 5 de NO) 78
Tableau III.5 Degré de corrélation linéaire entre les paramètres et les sorties du scénario 5 de NO 79
Tableau III.6 Exemple des données relatives à la variabilité des sorties du modèle (scénario 5 de NO) 80
Tableau III.7 Sorties étudiées pour les termes sources « Leak » et « Line rupture » 83
Tableau III.8 Paramètres étudiés pour le terme source « Leak » du scénario NO 83
Tableau III.9 Indices de sensibilité du 1er ordre (terme source « Leak », NO) 84
Tableau III.10 Indices de sensibilité totaux (terme source « Leak », scénario NO) 84
Tableau III.11 Variabilité des sorties du modèle (terme source « Leak », NO) 84
Tableau III.12 Liste des paramètres étudiés pour l'analyse du terme source « Line rupture » 89
Tableau III.13 Indices de sensibilité de 1er ordre (terme source « Line rupture », scénario NO) 89

Tableau III.14 Variabilité des sorties du modèle (terme source « Line rupture », scénario NO) 90
Tableau III.15 Indices de sensibilité totaux (terme source « Line rupture », scénario NO) 90
Tableau III.16 Paramètres étudiés pour les scénarios de screening 91
Tableau III.17 Paramètres étudiés pour le scénario du screening NO 93
Tableau III.18 Indices de sensibilité de 1er ordre du scénario de screening NO 93
Tableau III.19 Indices de sensibilité totaux du scénario de screening NO 94
Tableau III.20 Données relatives à la variabilité des sorties pour le screening NO 94
Tableau III.21 Influence mesurée par la grandeur CVSi du scénario de screening NO 95
Tableau III.22 Paramètres étudiés pour le scénario de screening NH_3 96
Tableau III.23 Indices de sensibilité de 1er ordre du scénario de screening NH_3 96
Tableau III.24 Indices de sensibilité totaux du scénario de screening NH_3 97
Tableau III.25 Données relatives à la variabilité des sorties pour le scénario de screening NH3 97
Tableau III.26 Influence mesurée par la grandeur CVSi du scénario de screening NH_3 98
Tableau III.27 Paramètres de « bifurcation » 100
Tableau III.28 Conditions de stockage et résultats du terme source 101
Tableau III.29 Paramètres fixés 102
Tableau III.30 Paramètres étudiés 103
Tableau III.31 Indices de sensibilité du 1er ordre du scénario NO-1 104
Tableau III.32 Indices de sensibilité totaux du scénario NO-1 105
Tableau III.33 Données relatives aux sorties du modèle pour le scénario NO1 105
Tableau III.34 Influence mesurée par la grandeur CVSi du scénario NO-1 106
Tableau III.35 Corrélation entre les paramètres et les sorties du scénario NO-1 106
Tableau III.36 Indices de sensibilité du 1er ordre pour le scénario 1 de HF 130
Tableau III.37 Paramètres étudiés pour effectuer l'analyse de l'influence locale 133
Tableau III.38 Indices de sensibilité du 1er ordre pour le scénario Local 1 134
Tableau III.39 Indices de sensibilité du 1er ordre pour le scénario Local 2 134
Tableau III.40 Indices de sensibilité du 1er ordre pour le scénario Local 3 135
Tableau III.41 Variabilité des sorties pour le cas Local 3 136
Tableau III.42 Comparaison des indices estimés par la méthode des polynômes locaux avec leurs valeurs analytiques 138

LISTE DES FIGURES

Figure I.1 Principaux phénomènes dus au rejet d'une substance dangereuse 15
Figure I.2 Fuite sur une paroi de réservoir 17
Figure I.3 Rupture totale d'une canalisation courte 17
Figure I.4 Rupture sur une canalisation longue 18
Figure I.5 Rupture catastrophique d'un réservoir 18
Figure I.6 Modèle d'orifice pour le terme source « Leak » 19
Figure I.7 Modèle « Short pipe » 20
Figure I.8 Phénomène de dispersion atmosphérique d'un rejet biphasique 22
Figure I.9 Schéma de la dispersion gaussienne (d'après Laurent, 2003) 23
Figure I.10 Évolution et géométrie du nuage pour un rejet instantané 30
Figure I.11 Évolution et géométrie du nuage pour un rejet continu 31
Figure I.12 Approche "quasi-instantanée" 32
Figure I.13 Phases de dispersion selon UDM a) jet élevé, b) jet touche le sol, c) jet au sol, d) décollement du nuage, e) nuage touche la couche d'inversion 36
Figure I.14 Variation de la concentration dans le nuage 38
Figure I.15 Démarche d'analyse de sensibilité 41
Figure I.16 L'analyse de sensibilité locale 42
Figure I.17 Échantillonnage (1000 points) de variables uniformes sur [0, 1], a) par échantillonnage aléatoire, b) par hypercube latin (LHS), c) par quasi-Monte Carlo (séquence LPτ de Sobol') 45
Figure I.18 Fonction $g_1(\sin(\omega_1 s))$ pour $s \in [-\pi,\pi]$ et $\omega_1 = 11$ 46
Figure I.19 Comparaison de CV 48
Figure II.1 Produits et modules de Phast étudiés 54
Figure II.2 Indices de sensibilité du 1er ordre pour le scénario de screening NO 55
Figure II.3 Stratégie d'étude et de définition des scénarios 56
Figure II.4 Code couleur pour représenter les indices du 1er ordre (S_i) 57
Figure II.5 Représentation arborescente des scénarios 58
Figure II.6 Démarche expérimentale pour le calcul des indices de sensibilité 59
Figure II.7 Cas où la sortie « distance » correspondant à la valeur cible n'est jamais atteinte 65
Figure II.8 Cas où la sortie « distance » est supérieure à la valeur limite 50000 m 65
Figure II.9 Concentration (ppm) en fonction de la direction X (m) pour le rejet passif 68
Figure II.10 Comparaison des indices de sensibilité issus des deux bancs de test pour la sortie concentration à 1 km 69

Figure II.11 Comparaison des indices de sensibilité issus des deux bancs de test pour la sortie concentration à 10 km 70

Figure II.12 Effet de la taille de l'échantillon et de la répétabilité du calcul pour la sortie distance X correspondant à une concentration de 600 ppm..... 71

Figure III.1 Exemple d'histogramme de la sortie C200..... 80

Figure III.2 Classement des scénarios selon le degré de sensibilité au paramètre alpha1 . 81

Figure III.3 Classement des scénarios selon le degré de sensibilité au paramètre alpha1 pour la sortie C1k..... 81

Figure III.4 Exemple de « scatter plot » pour le scénario 1 de NH_3 entre la sortie C200 et le paramètre alpha1 82

Figure III.5 Histogramme des débits de rejet, Q pour le scénario NO « Leak » 85

Figure III.6 Variation de Q en fonction des paramètres P_{st} et D_O 85

Figure III.7 Histogramme des vitesses finales de rejet, Vf pour le scénario 1 de NO 86

Figure III.8 Valeurs de la vitesse finale de rejet V_f en fonction de P_{st} pour les deux modèles d'ATEX 86

Figure III.9 Histogramme des températures finales de rejet, T_f pour le scénario 1 de NO . 87

Figure III.10 Variation de T_f en fonction de P_{st} pour les deux modèles d'ATEX..... 87

Figure III.11 Variation de T_f en fonction de T_{st} et de P_{st} 88

Figure III.12 Variation de V_f en fonction de P_{st} pour les deux modèles d'ATEX 90

Figure III.13 Histogramme de sortie C1k (scénario de screening NO) 94

Figure III.14 Histogramme de sortie Xppm (scénario de screening NO) 95

Figure III.15 Variation de C200 en fonction de D_O (scénario de screening NO)..... 95

Figure III.16 Variation de C10k en fonction de U_a (scénario de screening NO)..... 96

Figure III.17 Histogramme de la sortie C200 du scénario de screening NH_3 98

Figure III.18 Histogramme de la sortie Xppm (à 600 ppm) du scénario de screening NH_3. 98

Figure III.19 « Scatter plot » de C200 en fonction de D_O (scénario de screening NH_3) 99

Figure III.20 Classement des scénarios selon l'influence de alpha1 sur la sortie C200 108

Figure III.21 Classement des scénarios selon l'influence de alpha1 pour la sortie C1k 109

Figure III.22 Classement des scénarios selon l'influence de alpha2 sur la sortie C200 110

Figure III.23 Classement des scénarios selon l'influence de alpha2 sur la sortie C1k..... 111

Figure III.24 Classement des scénarios selon l'influence de C_{Da} sur la sortie C200..... 112

Figure III.25 Classement des scénarios selon l'influence de C_{Da} sur la sortie C1k..... 113

Figure III.26 Nuage du NO pour le scénario NO-7 avec C_{Da} = 0 (valeur par défaut)..... 114

Figure III.27 Nuage du NO pour le scénario NO-7 avec C_{Da} = 1..... 114

Figure III.28 « Scatter plot » de la C200 en fonction de C_{Da} pour le scénario NO-7..... 115

Figure III.29 Classement des scénarios selon l'influence de e_{pas} sur la sortie C200 116

Figure III.30 Classement des scénarios selon l'influence de e_{pas} sur la sortie C1K 117
Figure III.31 Classement des scénarios selon l'influence de r_u^{pas} sur la sortie C200 118
Figure III.32 Classement des scénarios selon l'influence de r_u^{pas} sur la sortie C1K 119
Figure III.33 Classement des scénarios selon l'influence de r_E^{pas} sur la sortie C200 120
Figure III.34 Classement des scénarios selon l'influence de r_E^{pas} sur la sortie C1K 121
Figure III.35 Classement des scénarios selon l'influence de Ri_*^{pas} sur la sortie C1k 122
Figure III.36 Classement des scénarios selon l'influence de Ri_*^{pas} sur la sortie C10k 123
Figure III.37 Classement des scénarios selon l'influence de C_E sur la sortie C1k 124
Figure III.38 Exemple d'histogramme de la sortie C10k 124
Figure III.39 Analyse comparative des scénarios 1 des produits NH_3, Cl_2 et NO pour la sortie C200 125
Figure III.40 Analyse comparative des scénarios 1 des produits NH_3, Cl_2 et NO pour la sortie C1k 126
Figure III.41 Panache de HF correspondant au scénario n° 1(fraction liquide du rejet = 0,96, fraction de « rainout » = 0) 127
Figure III.42 Classement des scénarios HF selon l'influence de Ha sur la sortie C200 128
Figure III.43 Histogramme de la sortie C200 pour le scénario 5 de HF 129
Figure III.44 « Scatter plot » de C200 en fonction de Ha pour le scénario 5 de HF 129
Figure III.45 Panache d'azote correspondant au scénario n° 1 (fraction liquide du rejet = 0,996, fraction de « rainout » = 0,31, rayon max. de la flaque = 2,6 m) 131
Figure III.46 Panache de n-hexane correspondant au scénario n° 1 (fraction liquide du rejet = 1, fraction de « rainout » = 0,94, rayon max. de la flaque = 43,7 m) 132
Figure III.47 Comparaison des indices estimés par la méthode des polynômes locaux avec leurs valeurs analytiques 138
Figure III.48 Comparaison des indices de sensibilité du 1er ordre calculés par EFAST et Da Veiga 139
Figure III.49 Arbre de décision pour la détermination de la classe de stabilité 140
Figure III.50 Comparaison des indices de sensibilité du 1er ordre calculés par EFAST et Da Veiga 141
Figure III.51 Cartographie des exécutions de Phast conduisant à des erreurs 143
Figure III.52 Détermination des paramètres discriminants pour la présence d'erreurs .. 144

NOTATIONS

C_{Da}	Coefficient de trainée entre le nuage et l'air (-)
C_E	Coefficient d'étalement du nuage dense (-)
C_{pa}	Capacité thermique atmosphérique ($J \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1}$)
CV	Coefficient de variation (%)
D_d	Diamètre de gouttelette (µm)
D_O	Diamètre d'orifice (m)
Dur	Durée du rejet (s)
D_p	Diamètre de la canalisation (m)
E_{cross}	Entrainment « crosswind » ($kg \cdot m^{-1} \cdot s^{-1}$)
E_{hvy}	Entrainement « gaz dense » ($kg \cdot m^{-1} \cdot s^{-1}$)
E_{jet}	Entrainement « jet » ($kg \cdot m^{-1} \cdot s^{-1}$)
E_{pas}^{ff}	Entrainement passif dans le champ lointain ($kg \cdot m^{-1} \cdot s^{-1}$)
E_{pas}^{nf}	Entrainement passif dans le champ proche ($kg \cdot m^{-1} \cdot s^{-1}$)
Ent_{pool}	Paramètre d'entrainement de l'évaporation de flaque ($kg \cdot m^{-1} \cdot s^{-1}$)
e_{pas}	Coefficient d'entrainement passif dans le champ proche (-)
E_{tot}	Entrainement total de l'air ambiant dans le nuage ($kg \cdot m^{-1} \cdot s^{-1}$)
F_{drag}^{air}	Force de traînée entre le nuage et l'air ($N \cdot m^{-1}$)
F_{drag}^{ground}	Force de traînée entre le nuage et le sol ($N \cdot m^{-1}$)
F_{impact}^{ground}	Force d'impact du nuage avec le sol ($N \cdot m^{-1}$)
g	Accélération due à la gravité ($9{,}81\ m \cdot s^{-2}$)
H_a	Humidité relative atmosphérique (-)
H_{mineff}	Hauteur effective minimale du nuage (m)
HT	Choix pour la prise en compte du phénomène de transfert de chaleur entre le nuage et le sol (-)
L_f	Fraction liquide deurejet (-)
Lp	Longueur de la canalisation (m)
l_y et l_z	« Turbulent eddy length scale » (horizontal et vertical) (m)
m_{cld}	Débit massique du nuage ($kg \cdot s^{-1}$)
M_{drop}	Méthode de résolution des équations du nuage et des gouttes (-)
$Mixing$	Choix de la contrainte d'inversion de température (-)
M_{thrm}	Modèle thermodynamique d'évaporation des gouttes (-)
m_{wv}^{gnd}	Débit de la vapeur d'eau ajoutée dans le nuage depuis la surface ($kg \cdot s^{-1}$)
P_a	Pression atmosphérique (Pa)
P_{above}	Périmètre du nuage (m)

P_{st}	Pression de stockage relative (Pa)
Q	Débit de rejet ($kg \cdot s^{-1}$)
q_{gnd}	Débit du transfert de chaleur entre le sol et le nuage ($J \cdot s^{-1}$)
Q_{gnd}	Flux de chaleur par conduction entre le sol et le nuage ($J \cdot m^{-1} \cdot s^{-1}$)
r_u^{pas}	Différence maximale entre les vitesses du nuage et de l'air ambiant (-)
r_{ro}^{pas}	Différence maximale entre les densités du nuage et de l'air ambiant (-)
r_E^{pas}	Fraction maximale de l'entrainement non-passif (-)
Ri_*^{pas}	Nombre de Richardson maximum (-)
r_{tr}^{pas}	Facteur de multiplication pour la phase passive (-)
R_y	Rayon du nuage selon la direction Y (m)
Ri_*	Nombre de Richardson pour le décollement du nuage (-)
r_{quasi}	Paramètre de transition quasi-instantanée (-)
Ri_{pool}	Nombre de Richardson pour le décollement du nuage issu d'une flaque (-)
R_p	Rugosité de la canalisation (m)
S_i	Indice de sensibilité du 1er ordre (-)
S_i^L	Indice de sensibilité local (-)
S_{flux}	Flux solaire radiatif ($W \cdot m^{-2}$)
s	Longueur de l'arc le long du centre du nuage (m)
S_{pool}	Nature de la surface d'épandage du liquide
S_{Ti}	Indice de sensibilité total (-)
T_a	Température atmosphérique (K)
T_{av}	Averaging time (s)
T_{av}^{core}	Core averaging time (s)
T_b	Température d'ébullition (°C)
T_f	Température de rejet (K)
TP_p	Profil vertical de la température et de la pression
u_a ou U_a	Vitesse du vent ($m \cdot s^{-1}$)
u_{cld}	Vitesse du nuage ($m \cdot s^{-1}$)
V	Variance d'une variable
V_f	Vitesse de rejet ($m \cdot s^{-1}$)
Weber	Nombre de Weber critique (-)
W_{gnd}	Demi-largeur du nuage qui est en contact avec le sol (empreinte) (m)
W_p	Profil vertical de la vitesse du vent (-)
X ou x	Direction du vent (-)

x_i	Un paramètre d'entrée
x_{cld}	Position du centre du nuage dans la direction X (m)
x_{tr}^{pas}	Distance *X* où la phase de transition débute (m)
Z ou z	Direction perpendiculaire et verticale de la vitesse du vent
z_{cld}	Position du centre du nuage dans la direction Z (m)
Z0	Rugosité de la surface sur laquelle le nuage se disperse (m)
ZR	Hauteur de rejet (m)
z_{ref}	Hauteur de référence pour la mesure de la vitesse du vent, de la température atmosphérique et de la pression atmosphérique (m)
α	Gradient de la température atmosphérique ($K \cdot m^{-1}$)
α_1	Coefficient d'entrainement « jet » (-)
α_2	Coefficient d'entrainement « crosswind » (-)
θ	Angle de rejet (°)
γ	Coefficient d'entrainement de coté du nuage dense
σ_y *et* σ_z	Écart type de dispersion selon la direction *Y* et *Z*
ρ_a	Masse volumique de l'air ambiant ($kg \cdot m^{-3}$)
ε	Vitesse de dissipation de l'énergie cinétique ($m^{-2} \cdot s^{-3}$)

INTRODUCTION GENERALE

Contexte et objectifs

Dans le cadre de la réalisation des études de danger, la réglementation française prévoit le calcul de périmètres de sécurité autour des établissements industriels à risques. Ces valeurs conditionnent la mise en œuvre de mesures importantes en matière de prévention et de protection. Depuis la promulgation de la loi du 30 juillet 2003 (dite « loi Risque »), relative à la prévention des risques technologiques et naturels et à la réparation des dommages, introduisant notamment la mise en place de *PPRT* (Plan de Prévention des Risques Technologiques), les mesures ayant pour objet de limiter les effets des accidents éventuels doivent être explicitées en prenant en compte la probabilité des scénarios accidentels pour les installations à haut risque classées Seveso 2.

La libération accidentelle de gaz toxique ou inflammable constitue un scénario d'accident important, puisque pouvant conduire à des distances d'effet importantes. Le rejet accidentel d'un produit peut entraîner la formation de nuages dangereux pour les personnes et pour l'environnement. La propagation de ces nuages dans l'atmosphère est un phénomène extrêmement complexe, régi par de nombreuses variables. Afin de modéliser les conséquences et donc d'estimer les périmètres de sécurité, l'étude de la dispersion atmosphérique des nuages de gaz fait appel à des logiciels de simulation. Parmi les nombreux outils disponibles sur le marché ou développés en interne par les entreprises, le logiciel commercial *Phast* (Process Hazard Analysis Software Tool, DNV) est souvent utilisé lors des analyses de risques.

Les utilisateurs de cet outil ont constaté que les résultats de la simulation sont dépendants d'un très grand nombre de paramètres de modélisation ajustables. L'accès libre à ces paramètres permet aux utilisateurs experts de mieux faire correspondre les simulations à des cas très spécifiques, pour lesquels les valeurs par défaut sont parfois inadaptées. Cependant, on constate que les résultats sont sensibles aux valeurs fournies de ces paramètres, voire à certains détails du scénario accidentel étudié. Or, même si l'utilisateur est expert, il ne dispose pas toujours d'une bonne connaissance des valeurs pertinentes pour ces paramètres, ni de leur impact sur la modélisation du phénomène.

Ainsi, compte tenu de ces constatations et d'un besoin évident de s'assurer que les études de danger sont basées sur les meilleures connaissances scientifiques, il est apparu utile de mener une étude approfondie sur **l'étude de la sensibilité paramétrique de logiciels de modélisation de la dispersion** atmosphérique de gaz. Nous souhaitons développer une méthodologie générale, et l'appliquer au logiciel *Phast*.

L'enjeu principal de cette recherche est l'acquisition de connaissances sur la modélisation de scénarios accidentels et de leurs impacts, pour une meilleure utilisation des outils de calcul.

Structure du manuscrit

Le manuscrit comprend trois chapitres.

Dans la première partie du *Chapitre I*, nous présentons des considérations sur les caractéristiques des différents types de rejets accidentels, puis sur le phénomène physique relativement complexe de la dispersion atmosphérique de ces rejets et enfin sur les divers types de modèles de dispersion qui existent, en détaillant plus spécifiquement le modèle UDM de *Phast*. La deuxième partie est consacrée à la présentation de méthodes d'analyse de sensibilité en insistant sur la méthode d'analyse globale basée sur le calcul d'indices. La dernière partie porte sur une analyse bibliographique de travaux effectués sur l'analyse de sensibilité d'outils de modélisation de la dispersion atmosphérique.

Dans le *Chapitre II*, nous présentons tout d'abord, les caractéristiques des différents produits étudiés, la stratégie adoptée pour choisir l'ensemble des scénarios relatifs à un produit donné en fonction de divers critères de sélection et la démarche expérimentale mise en œuvre pour effectuer l'analyse de sensibilité de plusieurs modules de *Phast*. Ensuite, une partie du Chapitre II est consacrée à la description des paramètres du modèle de dispersion de *Phast* (Unified Dispersion Model) : classification des paramètres par familles, plages de valeurs étudiées, types de distribution, ... Dans la dernière partie de ce chapitre, nous rapportons les études préliminaires qui concernent la validation de notre outil de calcul (*PGA*) qui relie les logiciels *SimLab* et *Phast*, le choix « optimal » de la taille de l'échantillon (nombre d'exécutions par scénario) et la répétabilité du calcul des indices de sensibilité.

Le *Chapitre III* comprend un extrait des résultats des différents types d'analyses de sensibilité (terme source, screening et modèle de dispersion de Phast) qui nous ont paru les plus significatifs. La discussion des résultats de l'analyse de sensibilité est effectuée par paramètre, par type de scénario et par produit. Nous présentons également une analyse de l'impact de petites variations des paramètres UDM autour de leur valeur par défaut, ce qui correspond davantage à une utilisation habituelle de *Phast*. La dernière partie de ce chapitre porte sur deux études complémentaires : l'une relative à la prise en compte des paramètres corrélés dans l'analyse de sensibilité et l'autre relative à l'exploitation de notre banc de test expérimental dans une optique d'assurance de la qualité du logiciel *Phast*.

Deux annexes complètent le manuscrit : l'*Annexe 1* comprend la liste de tous les paramètres de *Phast* et l'*Annexe 2* contient l'ensemble des tableaux de résultats.

Collaborations

Ce travail est le fruit d'une collaboration entre *l'Institut pour une Culture de Sécurité Industrielle* (ICSI) et le *Laboratoire de Génie Chimique de Toulouse* (UMR 5503). Il a été conduit dans le cadre d'une thèse CIFRE, partiellement financée par l'ANRT. La thèse a été menée en partenariat avec des experts de différents groupes industriels et cabinets d'expertise. Les partenaires et financeurs du projet sont des grands groupes industriels (Sanofi-Aventis, Total, Rhodia, Arkema, Air Liquide) et des bureaux d'étude et cabinets d'expertise (Technip, URS, IRSN). Le travail a bénéficié d'échanges réguliers avec des experts de la société DNV, éditeur du logiciel Phast.

Chapitre I. MODELISATION DE LA DISPERSION ATMOSPHERIQUE - METHODES D'ANALYSE DE SENSIBILITE

I.1 Introduction

Dans la *première partie* de ce chapitre, nous présentons des considérations sur les caractéristiques des différents types de rejets accidentels, puis sur le phénomène physique relativement complexe de la dispersion atmosphérique de ces rejets et enfin sur les divers types de modèles de dispersion qui existent, en détaillant plus spécifiquement le modèle UDM de *Phast*.

La *deuxième partie* est consacrée à la présentation de méthodes d'analyse de sensibilité, en insistant sur la méthode d'analyse globale basée sur le calcul d'indices.

La *dernière partie* porte sur une analyse bibliographique de travaux effectués sur l'analyse de sensibilité d'outils de modélisation de la dispersion atmosphérique.

I.2 Modélisation de la dispersion atmosphérique

La plupart des produits de grande consommation de nos sociétés modernes sont issus de l'industrie chimique. Les matières premières sont transportées et stockées sur site pour fabriquer les produits qui sont ensuite distribués et utilisés. Des rejets accidentels de produits peuvent avoir lieu pendant les phases de transport, de stockage ou de fabrication. Les diverses conséquences d'un rejet accidentel de produit dangereux sont illustrées dans la Figure I.1.

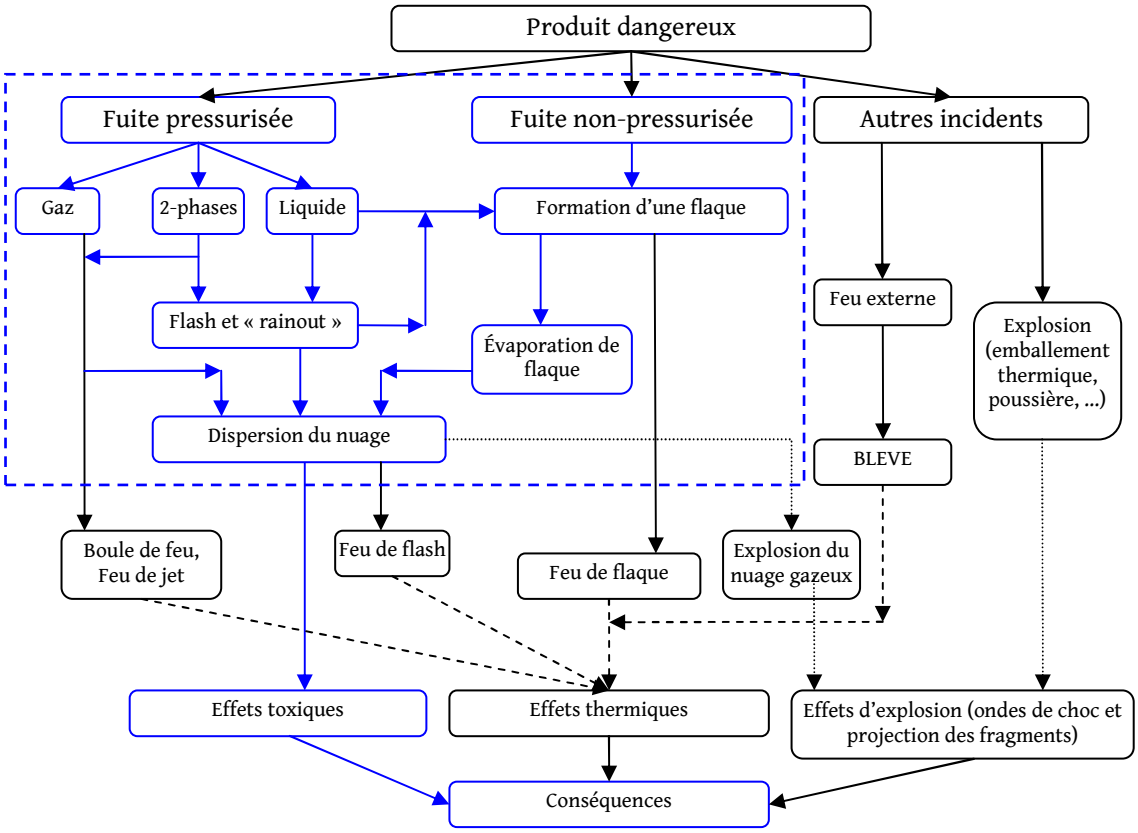


Figure I.1 Principaux phénomènes dus au rejet d'une substance dangereuse (d'après Pitblado et Turney, 1996)

Les conséquences des effets toxique, thermique et mécanique sont évaluées à partir de divers phénomènes tels que la boule de feu, le feu de jet, le feu de flaque, la dispersion du nuage toxique, l'explosion du nuage, ... Par exemple, dans un cas de fuite biphasique d'ammoniac (produit toxique et inflammable), qui est stocké sous forme de liquide saturé, d'une part le phénomène de la dispersion du nuage permet d'évaluer les effets toxiques et d'autre part les effets thermiques sont pris en compte à partir des phénomènes tels que la boule de feu, le feu de jet ou le feu de flash. L'explosion du nuage inflammable pendant la phase de dispersion entraîne des effets thermiques et mécaniques à cause des ondes de choc.

Dans le cadre de notre travail, nous nous sommes intéressés aux effets liés à la dispersion d'un nuage toxique ou inflammable (zone de la Figure I.1 délimitée par le cadre en pointillés). Pour calculer les effets toxiques, il est d'abord nécessaire de déterminer les caractéristiques du rejet. Dans cette partie, nous présentons tout d'abord les divers termes sources puis le phénomène de dispersion atmosphérique d'un rejet accidentel. Ensuite, les divers modèles de dispersion atmosphérique sont évoqués ainsi que les principales fonctionnalités du modèle de dispersion UDM de *Phast*.

I.2.1 Termes sources

Les sources d'émissions de produit toxique et/ou inflammable dans les raffineries et les unités de production chimique ont été analysées par Gelevan et Siegell (1999). Les défaillances d'équipement (rupture de canalisation, fuite sur des pompes ou des vannes...) constituent la catégorie la plus importante qui entraîne la libération de produit dangereux. La perte de confinement dépend fortement des caractéristiques du rejet :

- perçage d'une paroi, défaillance d'un joint, défaillance d'une garniture ;
- éclatement d'un disque de rupture, ouverture d'une soupape ;
- brèche partielle ou totale d'une canalisation courte ou longue ;
- éclatement d'un réservoir.

Pour caractériser la dispersion atmosphérique d'une substance toxique et/ou inflammable, il est nécessaire de quantifier le rejet, c'est-à-dire de calculer son débit, sa température et son état physique. La détermination de ce « terme source » est très importante car elle définit les conditions initiales de formation du nuage ainsi que la génération éventuelle d'un aérosol et/ou d'une flaque. Il est donc important de le calculer avec précision.

Le mode d'émission de produit peut être classé en deux grandes catégories : le rejet instantané (par exemple un éclatement du réservoir) et le rejet continu (par exemple vidange de réservoir sous pression pendant une heure).

I.2.1.1 Les rejets continus

a) Fuite sur une paroi de réservoir

Ce terme source correspond à une brèche sur la paroi d'un réservoir ou à un petit trou sur une canalisation de grand diamètre qui se comporte alors comme un réservoir (Figure I.2).

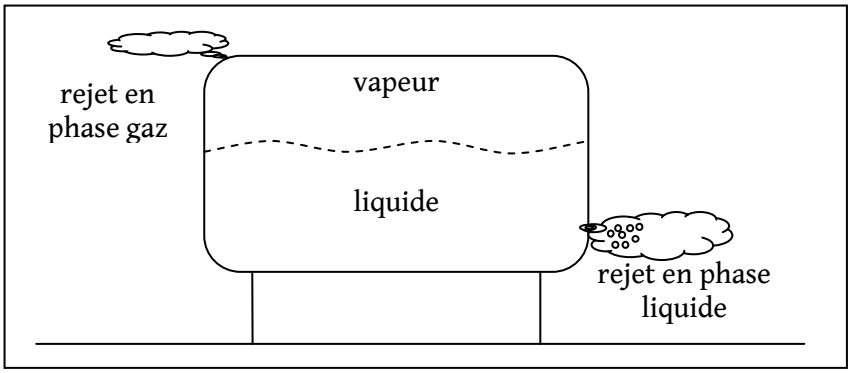


Figure I.2 Fuite sur une paroi de réservoir

Dans un stockage biphasique, la nature de la phase du produit rejeté dépend de la position de la brèche (Figure I.2). Dans le cas où la brèche se situe au dessous du niveau du liquide dans le réservoir, la phase de rejet liquide peut « flasher » pendant l'expansion à pression ambiante.

b) Rupture totale d'une canalisation courte

La rupture guillotine d'une canalisation courte sur un réservoir peut entraîner un changement de phase du produit dans la canalisation avant qu'il soit rejeté dans l'atmosphère. La phase du produit rejeté dépend de la position de la canalisation sur le réservoir, comme le montre la Figure I.3.

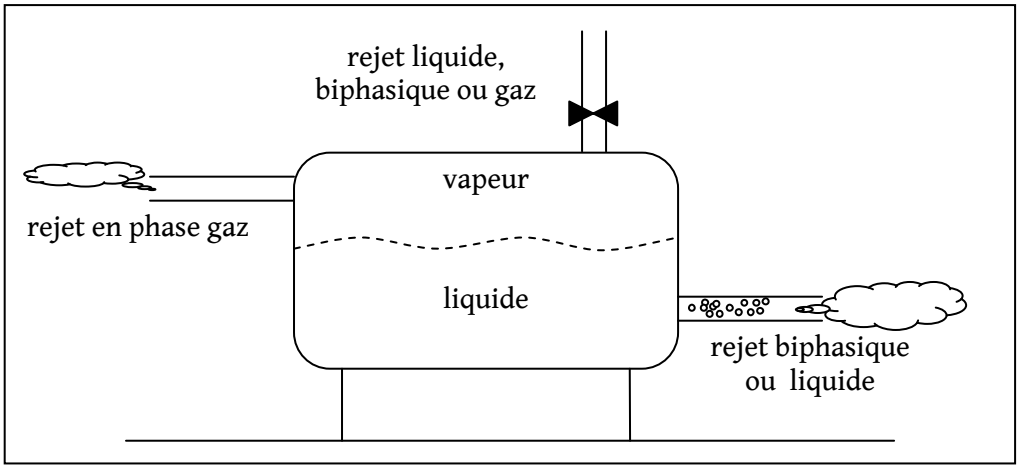


Figure I.3 Rupture totale d'une canalisation courte

Si le produit est un liquide volatile, il peut flasher dans la canalisation. Ce changement de phase est calculé avec les lois de la thermodynamique. Si la longueur de la canalisation est très importante par rapport au diamètre (par exemple, longueur supérieure à 300 fois le diamètre), alors le phénomène d'écoulement dans la canalisation devient plus complexe.

c) Fuite à partir d'une canalisation longue

Ce terme source concerne les rejets biphasiques ou gazeux issus d'une ouverture totale ou partielle sur une canalisation longue, dont le débit varie en fonction du temps.

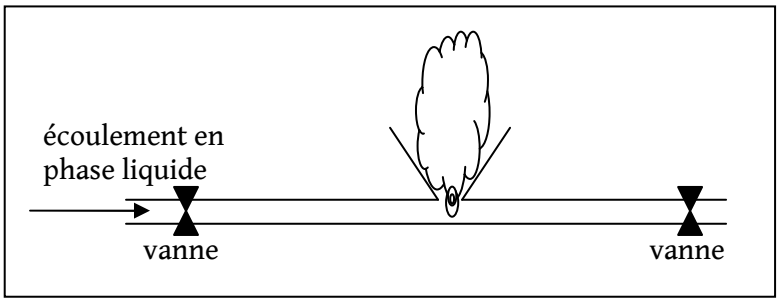


Figure I.4 Rupture sur une canalisation longue

Le calcul doit prendre en compte les caractéristiques de la canalisation et du produit en amont et en aval de la brèche. Il faut par exemple tenir compte de la fermeture automatique des vannes situées en amont ou en aval de la brèche, ce qui conditionne la masse totale de produit rejeté (Figure I.4). La modélisation de ce terme source est plus complexe que le modèle simple utilisé pour une canalisation courte.

I.2.1.2 Les rejets instantanés

La ruine, encore appelée rupture catastrophique, consiste en la rupture totale du confinement entraînant un relâchement immédiat et instantané de la totalité du contenu (Figure I.5). Les rejets de type instantané sont principalement caractérisés par la quantité émise dans l'atmosphère et la pression de la capacité au moment de la rupture. Cette dernière peut être différente dans certains cas de la pression de stockage.

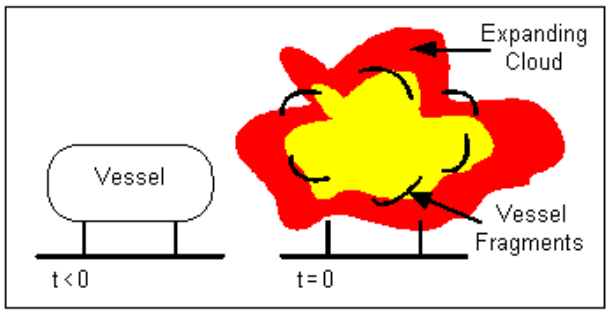


Figure I.5 Rupture catastrophique d'un réservoir

Lors d'un rejet instantané de gaz, en l'absence d'obstacle de taille significative à proximité, l'expansion initiale du nuage est relativement isotrope. Il en résulte un volume gazeux sphérique, ou semi-sphérique si l'émission a lieu au niveau du sol. Dans un cas de rejet en phase liquide, il peut se former une flaque.

I.2.1.3 Termes sources dans *Phast*

Le logiciel, commercialisé par DNV Software, est largement utilisé dans l'industrie pour l'estimation des conséquences d'accidents. Il permet de modéliser différents types de termes sources, ainsi que la dispersion du nuage.

Il existe plusieurs modèles dans *Phast* pour calculer les divers termes sources. Le calcul du terme source est composé de deux parties : la première partie du calcul est spécifique pour chaque terme source, elle définit les conditions de rejet jusqu'à l'orifice

(pour « Leak ») ou jusqu'à la brèche sur la canalisation (pour « Short pipe » et « Long pipeline »). La deuxième partie du calcul est effectuée avec le modèle d'*ATEX* (ATmospheric EXpansion model) qui détermine les conditions finales de rejet après l'expansion jusqu'à la pression atmosphérique.

Nous présentons les principaux modèles de terme source de *Phast* pour le mode d'émission continue.

a) « Leak »

Ce terme source est illustré sur la Figure I.2. *Phast* utilise le modèle d'orifice pour calculer les conditions de rejet à l'orifice puis le modèle *ATEX* (ATmospheric Expansion) pour le calcul des conditions finales de rejet, comme cela est illustré sur la Figure I.6. Il est basé sur les équations de conservation de l'énergie et de l'entropie.

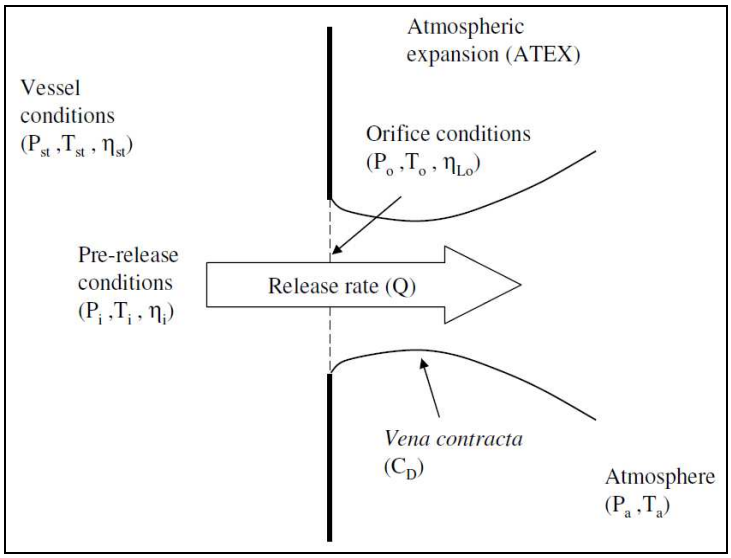


Figure I.6 Modèle d'orifice pour le terme source « Leak »

Le calcul du débit de rejet de produit est effectué en faisant l'hypothèse qu'il n'y a pas de perte de charge pendant l'écoulement du produit dans le réservoir jusqu'à l'ouverture. Ce modèle utilise le coefficient de décharge, C_D, qui est soit automatiquement choisi par *Phast* (varie entre 0,6 et 1 et dépend de la phase du produit rejeté), soit défini par l'utilisateur.

b) « Line rupture », « Disc rupture » et « Relief valve »

Ces trois termes sources utilisent le modèle de calcul, appelé « Short pipe » (Figure I.7). « Line rupture » considère la rupture totale d'une canalisation relativement courte. En outre, *Phast* recommande d'utiliser le terme source « Long pipeline » dans les cas où la longueur de la canalisation est importante (rapport entre la longueur et le diamètre très supérieur à 300) ou pour modéliser une rupture partielle de canalisation.

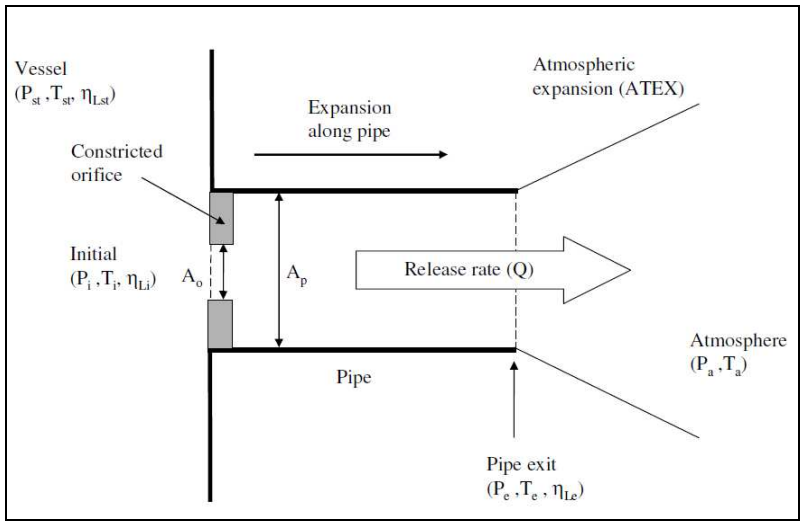


Figure I.7 Modèle « Short pipe »

Dans le cas de rejet à partir d'une vanne de détente (« Relief valve ») ou d'un disque de rupture (« Disc rupture »), la canalisation courte est représentée par la conduite d'évent. Ce modèle est basé sur les hypothèses suivantes :

- les conditions (pression, température et fraction liquide) à l'entrée de la canalisation sont égales aux conditions dans le réservoir ;
- conservation de la masse pendant l'écoulement dans la canalisation (la vitesse d'entrée est nulle) ;
- conservation de l'énergie (pas de transfert thermique à partir de la paroi) ;
- conservation de la quantité de mouvement ;
- le diamètre de la canalisation est constant.

Le calcul du terme source est effectué en prenant en compte les pertes de charge liées à la canalisation, aux coudes, aux couplages, aux intersections et aux vannes.

c) Modèle d'expansion à la pression atmosphérique

A partir du point de rejet, le modèle *ATEX* (ATmospheric EXpansion model) calcule les conditions finales de rejet après l'expansion jusqu'à la pression atmosphérique. Les résultats de ce modèle (fraction liquide, température, vitesse et taille des gouttes) servent de paramètres d'entrée pour le modèle de dispersion. Il existe deux modèles d'*ATEX* dans *Phast* : le modèle isentropique (conservation d'entropie) et le modèle de conservation d'énergie (conservation de quantité de mouvement, QDM). Les deux modèles utilisent 3 équations de conservation (masse, QDM ou entropie et énergie) et 2 équations d'état (densité et enthalpie).

Il existe un modèle spécifique pour les rejets instantanés (*ATEX* Theory Document, 2008). *Phast* permet de choisir entre les deux modèles d'*ATEX* et une troisième option, dite « closest to initial conditions » (qui est l'option par défaut dans *Phast*). Avec cette troisième option, *Phast* choisit automatiquement le modèle d'*ATEX*. En effet, quand on choisit cette option, *Phast* effectue le calcul de l'expansion atmosphérique avec les deux modèles d'*ATEX* et ensuite il prend en compte les résultats du modèle qui donne la température finale de rejet la plus élevée. Dans le cas où les températures de rejet calculées sont identiques, alors on prend en compte les résultats du modèle pour lequel

la fraction liquide finale de rejet est proche de celle qui correspond aux conditions initiales.

I.2.2 Phénomène de dispersion atmosphérique

Le phénomène de dispersion atmosphérique (i.e. l'évolution du nuage dans l'atmosphère) dépend notamment du type de rejet (instantané ou continu), des propriétés physiques du produit et des conditions atmosphériques. Le calcul du terme source détermine les conditions finales de rejet à la pression ambiante qui sont utilisées pour définir les conditions initiales de dispersion.

I.2.2.1 État physique initial du produit

Le produit est stocké dans des réservoirs, des bouteilles, des citernes, ... avant d'être rejeté dans l'atmosphère. Le produit peut se trouver (dans la capacité) dans différents états physiques :

- stockage en phase gaz (pressurisé ou non) : par exemple CO_2, NO, N_2. Dans ce cas, le nuage gazeux se forme à partir du produit rejeté.
- stockage d'un gaz liquéfié (par exemple NH_3, Cl_2) : les rejets à partir de ce type de stockage entraînent généralement la formation d'aérosol.
- stockage en phase liquide (réfrigéré ou non) : par exemple N_2, O_2, n-heptane, n-hexane. Les rejets à partir de ce type de stockage produisent une flaque de taille plus ou moins importante. Cette flaque s'évapore sous les conditions ambiantes et alimente le nuage.

I.2.2.2 Modes de rejets

Le mode de rejet, instantané ou continu, détermine la forme du nuage et son déplacement dans l'atmosphère. La description des phénomènes liés à ces modes de rejets est reprise en détails dans le paragraphe I.2.5.1.

I.2.2.3 Propriétés physiques du produit

Les propriétés du produit qui influencent considérablement l'évolution du nuage sont la densité et la réactivité chimique avec l'atmosphère.

On trouve différents types de gaz :

- gaz « dense » : lorsque la densité du gaz rejeté est supérieure à celle de l'atmosphère, les forces de gravité influencent de façon importante la dispersion du nuage.
- gaz léger : dans ce cas, le gaz est moins dense que l'air. Si la densité du gaz est suffisamment faible, l'effet des forces d'Archimède est susceptible de favoriser l'ascension du nuage de gaz.

- gaz neutre (ou passif) : le gaz est considéré comme neutre quand sa température et sa densité sont égales à celles de l'air. Le gaz neutre se comporte comme l'air et l'évolution du nuage se fait seulement sous l'effet de l'écoulement de l'air ambiant.
- gaz réactif : certains produits réagissent fortement avec l'atmosphère, ce qui modifie leurs propriétés[2]. Par exemple, dans le cas du rejet d'HF (fluorure d'hydrogène), il réagit avec la vapeur d'eau de l'atmosphère et se polymérise.

La dispersion atmosphérique d'un rejet biphasique d'un produit dense (ammoniac ou chlore par exemple) est illustrée sur la Figure I.8.

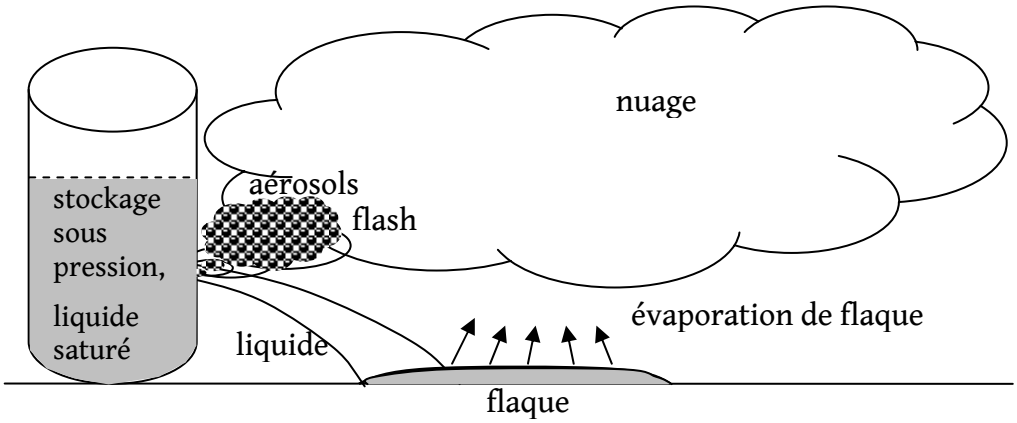


Figure I.8 Phénomène de dispersion atmosphérique d'un rejet biphasique

Dans ce cas, on considère une fuite biphasique à partir d'un stockage du produit réfrigéré sous pression. Après l'expansion, une partie du rejet se vaporise et l'autre partie se fragmente en gouttelettes (Figure I.8). Selon la taille des gouttelettes, celles-ci peuvent tomber au sol et former une flaque de liquide. À cause des échanges thermiques avec le sol et avec l'atmosphère, la flaque se vaporise et le débit de vapeur s'ajoute au nuage. Cette flaque est considérée comme un terme source secondaire. Si les gouttes sont de faibles tailles, elles se vaporisent dans le nuage et il n'y pas de formation de flaque.

Dans le cas d'un rejet liquide ayant une température d'ébullition élevée, il y a formation d'une flaque. Selon les propriétés physiques du produit et les conditions ambiantes, l'évaporation de la flaque peut constituer un terme source important.

I.2.3 Modèles de dispersion atmosphérique

Pour effectuer une modélisation de la dispersion atmosphérique de rejets accidentels, il existe trois familles de modèles qui sont classées par ordre de complexité croissante :

- les modèles de type gaussien,
- les modèles de type intégral,
- les modèles tridimensionnels.

I.2.3.1 Modèles de type gaussien

La dispersion la plus simple à modéliser est la dispersion dite passive. La dispersion passive d'un polluant se caractérise par un écoulement qui n'influence pas les caractéristiques de l'air ambiant, soit par sa densité, sa température, ou sa concentration.

Ce type de modèle s'applique aux gaz neutres ou passifs ou aux gaz très dilués, quelle que soit leur densité. Dans ce cas, les profils de concentration du polluant suivant y et z suivent une courbe de Gauss (Figure I.9). Les équations du modèle gaussien de dispersion sont différentes suivant que le rejet est continu ou instantané (Laurent, 2003).

Ces modèles sont basés sur les hypothèses suivantes :

- le champ du vent est uniforme dans l'espace et dans le temps,
- la diffusion moléculaire est considérée négligeable devant la turbulence atmosphérique,
- la turbulence est homogène et isotrope,
- le terrain est homogène et plat.

En pratique, les résultats sont valables pour des distances au moins supérieures à 100 m du point de rejet, les modèles gaussiens n'ayant pas été validés dans la première centaine de mètres.

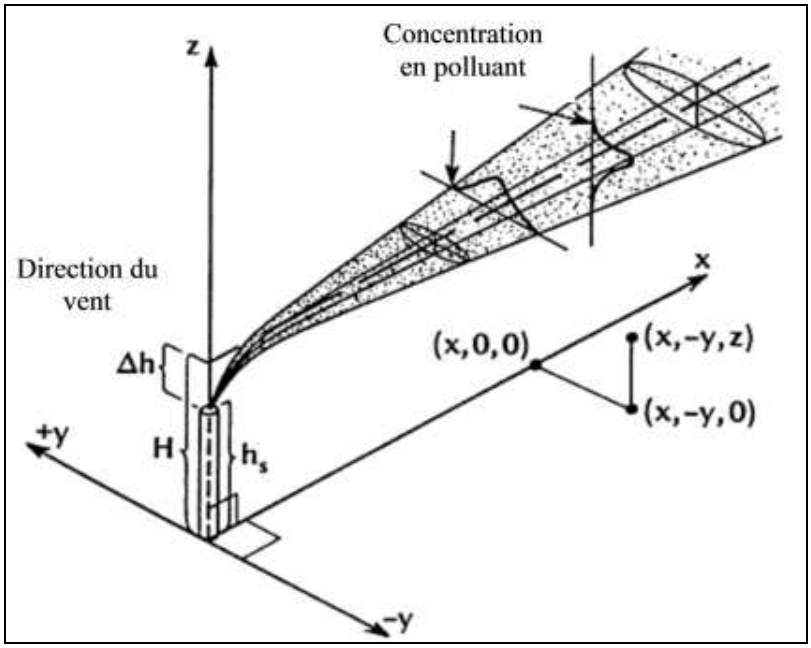


Figure I.9 Schéma de la dispersion gaussienne (d'après Laurent, 2003)

I.2.3.2 Modèles de type intégral

Les effets de gravité pour les rejets de gaz lourds, les effets de flottabilité pour les rejets de gaz légers et l'effet de « jet » pour les rejets à vitesse d'émission élevée n'étant pas pris en compte par les modèles gaussiens, les modèles de type intégral sont appliqués. Ils sont basés sur les équations de la mécanique des fluides simplifiées pour permettre une résolution rapide. Cette simplification se traduit par l'introduction de paramètres représentant globalement les mécanismes non modélisés. A cet effet, les coefficients des modèles intégraux sont « calés » sur des expérimentations. Le choix et l'établissement des paramètres utilisés pour simplifier les équations de la mécanique des fluides conditionnent la qualité de ces modèles. Les modèles intégraux comprennent, dans la

plupart des cas, des modules de calcul permettant de déterminer le terme source de rejet en fonction des conditions de stockage du produit et du type de rejet (rupture d'une canalisation, fuite sur la paroi d'un réservoir, évaporation de flaque, ...).

Il existe plusieurs logiciels de type intégral tels que *Phast* (DNV Software), *EFFECTS* (TNO), *Sevex* (Atm-Pro/Faculté Polytechnique de Mons) et *Aloha* (US EPA). La turbulence atmosphérique est prise en compte par l'intermédiaire de classes de stabilité atmosphérique, pour éviter une modélisation lourde de la turbulence. Le terrain est supposé homogène et idéalement plat afin de ne pas introduire de perturbations complexes de l'écoulement de l'air. Les caractéristiques du terrain sont définies sous la forme d'une seule longueur de rugosité pour toute la région du rejet. Une couche d'inversion de température peut parfois aussi être prise en compte.

I.2.3.3 Modèles tridimensionnels

Les modèles numériques tridimensionnels ou CFD (Computational Fluid Dynamics) permettent de simuler les rejets de gaz en prenant en compte l'ensemble des phénomènes intervenant de façon significative sur la dispersion, qu'ils soient liés à l'atmosphère comme la turbulence thermique, ou au site comme les obstacles ou le relief.

Les logiciels *Fluidyn Panair*, *FLACS*, *Fluent*, *Aria risk* sont des modèles de type CFD/3D. Ce type d'outil est basé sur la résolution des équations de Navier-Stokes. Les simplifications des équations de la mécanique des fluides sont beaucoup moins poussées que celles effectuées dans les modèles intégraux. La validation de certains outils CFD peut nécessiter un calage empirique de quelques paramètres. Les outils CFD tridimensionnels ont un champ d'application étendu et prennent en compte les débits variables et les sources multiples.

La modélisation tridimensionnelle apporte des informations qualitatives en plus des résultats quantitatifs. En pratique, les outils de calcul CFD tridimensionnels ne permettent pas toujours de calculer le terme source. Le terme source doit donc être évalué avec un autre outil. Dans ce cas, les données d'entrée de ce terme source doivent être traduites le plus fidèlement possible dans l'outil de calcul CFD. Par ailleurs, la plupart des outils CFD tridimensionnels ne peuvent traiter directement les mécanismes liés à des rejets diphasiques. Dans de telles situations, c'est un terme source « équivalent » totalement gazeux qui est fourni comme donnée d'entrée, ce qui exige une bonne connaissance des mécanismes d'évolution des phases liquides lors de leur rejet accidentel et peut être une source d'erreur importante. L'utilisation de ce type d'outil nécessite du personnel « spécialisé », du matériel de calcul performant et surtout des données complètes et précises dont l'acquisition est indispensable pour la modélisation. La précision dépend de la méthode de résolution (différences finies, volumes finis, éléments finis), du maillage utilisé et de la manière d'utiliser les modèles (critères d'arrêt et de convergence).

I.2.3.4 Comparaison des différents modèles

Le tableau I.1 montre les principaux avantages et inconvénients de ces trois types de modèles.

Tableau I.1 Tableau de comparaison des modèles de dispersion

	Modèle gaussien	Modèle intégral	Modèle CFD
Principaux avantages	- Facilité de mise en œuvre - Coût peu élevé - Possibilité d'introduire une hauteur de rugosité moyenne	- Coût raisonnable - Prise en compte des effets de gaz lourd et gaz léger - Quantification du terme source dans certains logiciels - Modèles calés sur des expériences - Possibilité d'introduire une hauteur de rugosité moyenne	- Champ d'application étendu - Débits variables - Prise en compte de la réalité du terrain - Conditions météorologiques extrêmes
Principaux inconvénients	- Pas d'obstacle ni de relief, - Conditions météorologiques moyennes - Pas d'effet de gravité (gaz de même densité que l'air) - Le champ proche (0-100m) ne peut pas être modélisé par ce type de modèle, - Théoriquement pas de possibilité de calage, cependant certaines corrections des écarts types sont possibles	- Pas d'obstacle ni de relief, - Pas de conditions météorologiques extrêmes - Erreurs dues à la simplification d'équations de la mécanique des fluides	- Coût élevé - Temps de calculs longs - Difficultés de mise en œuvre - Complexité des algorithmes, Moyens informatiques importants

I.2.4 Conditions météorologiques

Les conditions météorologiques ont une influence importante sur la dispersion des polluants. Elles sont définies par :

- la structure de l'atmosphère (stabilité atmosphérique) ;
- le profil vertical de la vitesse du vent ;
- les profils verticaux de la température et de la pression atmosphériques ;
- l'humidité atmosphérique.

I.2.4.1 Structure de l'atmosphère

La turbulence atmosphérique joue un rôle important pendant la dispersion et la dilution du nuage. Le phénomène de turbulence dans l'atmosphère peut avoir deux origines : mécanique (liée aux tourbillons créés par la différence de vitesse des masses d'air,) ou thermique (liée aux tourbillons créés par la différence de température des masses d'air). La quantification de cette turbulence est assurée par la classe de stabilité atmosphérique. Il existe plusieurs définitions des classes de stabilité. La Météorologie Nationale a défini 4 classes de stabilité selon le gradient thermique vertical : Instabilité (I), Neutre (N), Stabilité (S1), Stabilité (S2).

Pasquill a proposé sept classes de stabilité atmosphérique : A (extrêmement instable), B (modérément instable), C (légèrement instable), D (neutre), E (légèrement stable), F (modérément stable), G (extrêmement stable). Elles sont aussi définies en fonction de la valeur du gradient thermique vertical. En l'absence de mesure de la valeur du gradient thermique vertical, Turner a recommandé une table de décision reprise dans le Tableau I.2. Cette table permet de choisir la classe de stabilité en fonction de la vitesse du vent, de l'intensité du rayonnement solaire (la journée) ou de la couverture nuageuse (la nuit).

Tableau I.2 Table de décision de Turner

Vitesse du vent (m/s)	Jour : rayonnement solaire			Nuit	
	fort > 600 W·m^{-2}	modéré	faible < 300 W·m^{-2}	Nébulosité entre 4/8 et 7/8	Nébulosité < 3/8
< 2	A	A-B	B	F	F
2 - 3	A-B	B	C	E	F
3 - 5	B	B-C	C	D	E
5 - 6	C	C-D	D	D	D
> 6	C	D	D	D	D

Doury a regroupé les sept classes de stabilité de Pasquill en 2 groupes : la diffusion normale (DN), qui regroupe les classes A à D de Pasquill et la diffusion faible (DF) (Tableau I.3). Le choix de ces classes de stabilité se fait en fonction de la vitesse du vent et du choix jour ou nuit.

Tableau I.3 Classes de stabilité de Doury (CEA)

Vitesse du vent (m·s^{-1})	Jour	Nuit
U_a < 3	Diffusion normale	Diffusion faible
U_a > 3		Diffusion normale

Une comparaison des différentes définitions de la classe de stabilité est présentée dans le Tableau I.4.

Tableau I.4 Comparaison des classes de stabilité atmosphérique

Stabilité atmosphérique	Classes de stabilité Pasquill	Météorologie nationale	CEA
Très instable	A	I	Diffusion normale
Moyennement instable	B		
Faiblement instable	C		
Neutre	D	N	
Faiblement stable	E	S1	Diffusion faible
Moyennement stable	F	S2	
Très stable	G		

I.2.4.2 Profil vertical de la vitesse du vent

La vitesse du vent varie en fonction de l'altitude à cause du freinage de l'air par le sol. La mesure de la vitesse du vent est effectuée en général à 10 m du sol (standard Météorologie Nationale). Il est nécessaire d'effectuer une correction pour estimer la vitesse du vent au point de rejet et au cours de la dispersion. Pour cela deux types de profil vertical du vent sont possibles dans *Phast* :

- uniforme (constant)
- loi puissance (ce profil est celui qui correspond le mieux à la réalité)

Le profil uniforme correspond à une vitesse du vent constante avec l'altitude.

La loi puissance est définie par l'équation suivante :

$$u_a(z) = u_a(z_{ref}) \cdot \left(\frac{z}{z_{ref}} \right)^p$$

où, $u_a(z)$ = vitesse du vent estimée à la hauteur z ($m \cdot s^{-1}$)

$u_a(z_{ref})$= vitesse du vent estimée à la hauteur de référence z_{ref} ($m \cdot s^{-1}$)

p = coefficient qui dépend de la stabilité atmosphérique et de la rugosité de sol.

I.2.4.3 Profils verticaux de température et de pression

Il existe trois types de profil vertical de température dans *Phast*. Le profil constant de température revient à considérer que la température ne varie pas avec la hauteur.

Le profil linéaire de T est décrit par l'équation suivante :

$$T_a(z) = T_a(z_{ref}) + \alpha \cdot (z - z_{ref})$$

où, $T_a(z)$ = température ambiante à la hauteur z (K)

$T_a(z_{ref})$ = température ambiante à la hauteur de référence z_{ref} (K)

α = gradient de la température ($K \cdot m^{-1}$), qui dépend de la classe de stabilité

Le troisième profil vertical de température s'appelle le profil logarithmique. L'équation pour calculer la température selon ce profil est fournie dans le « UDM Theory Document » (Witlox, 2006).

Deux types de profil vertical de pression sont proposés dans *Phast* : profil constant et profil linéaire. Le profil linéaire est défini par l'équation suivante :

$$P_a(z) = P_a(z_{ref}) - \rho_a \cdot g \cdot (z - z_{ref})$$

où, $P_a(z)$ = pression ambiante à la hauteur z (Pa)

$P_a(z_{ref})$ = pression ambiante à la hauteur de référence z_{ref} (Pa)

ρ_a = masse volumique de l'air ambiante ($kg \cdot m^{-3}$)

g = accélération due à la gravité (9,81 $m \cdot s^{-2}$)

La valeur de ρ_a varie avec la hauteur parce que la température et la pression varient aussi, mais cette variation est très faible pour *Z* inférieur à 100 m.

Il existe trois options dans Phast pour choisir le couple des profils verticaux de température et pression :

- profils uniformes de température et pression,
- profils linéaires de température et pression,
- profil logarithmique pour la température et profil linéaire pour la pression.

I.2.4.4 Conditions météorologiques dans le cadre des études de dangers

Dans le cadre des études de dangers, les classes de stabilité atmosphérique généralement retenues pour des rejets au niveau du sol sont de type D5 et F3, car il est généralement admis qu'elles conduisent aux distances d'effet les plus pénalisantes. Pour les rejets en altitude (rejet à partir d'une cheminée par exemple), les conditions les plus défavorables choisies sont généralement A3 et D10. Dans cette configuration de rejet, les conditions défavorables peuvent être différentes de celles caractérisées par le couple F3. En effet, de façon succincte, lorsqu'une atmosphère est instable (classes A et B de Pasquill), la dispersion atmosphérique verticale est favorisée. Le panache qui se forme est toutefois très ouvert. En conséquence, une part importante du produit émis se disperse vers le sol. Il en résulte que, malgré l'élévation initiale, les concentrations en polluants, au sol, peuvent être importantes. A l'opposé, lorsqu'une atmosphère est stable, son aptitude à diffuser verticalement un polluant est faible. Le panache formé reste très peu ouvert. La dispersion s'opère donc en altitude et les concentrations de polluants, au sol, sont relativement faibles. Le Tableau I.5 donne des conditions météorologiques habituellement retenues dans les études de dangers en fonction du type de rejet.

Tableau I.5 Conditions météorologiques retenues dans les études de dangers

	Stabilité atmosphérique	Vitesses du vent considérées [m/s]
Rejet horizontal au niveau du sol	D	5 (conditions médianes)
	F	3 (conditions défavorables)
Rejet vertical ou rejet de gaz léger	A	3
	B	3 et 5
	C	5 et 10
	D	5 (conditions médianes) et 10
	E	3
	F	3

I.2.5 Modèle UDM de dispersion de *Phast*

Cette partie porte sur le modèle de dispersion de *Phast* appelé *UDM* (Unified Dispersion Model). Nous présentons uniquement les caractéristiques principales du modèle UDM nécessaires à la compréhension de notre étude.

La version originale de l'UDM a été développée par Cook et Woodward au début des années 1990. Dans cette version, les différentes phases de dispersion sont simulées avec des sous-modèles qu'il faut assembler de façon astucieuse pour modéliser un scénario donné. Pour éliminer les discontinuités entre les résultats des sous-modèles, une nouvelle version de UDM a été mise au point dans laquelle il est possible de calculer un profil uniforme de concentration intégrant les différentes phases de la dispersion. D'autre part, ce nouveau modèle prend en compte les phénomènes d'évaporation, de formation de flaque, d'élévation du nuage et de dispersion variable au cours du temps.

La description détaillée du modèle UDM est contenue dans le « UDM Theory Document » (Witlox, 2006). UDM est capable de traiter un grand nombre de produits, qu'ils soient toxiques et/ou inflammables, légers, lourds ou neutres. Il traite les rejets liquides, gazeux ou diphasiques. Pour les rejets diphasiques, il modélise la formation et l'évaporation de flaque.

La simulation de la dispersion commence juste après l'expansion du nuage jusqu'à la pression ambiante, c'est-à-dire après le calcul du terme source. Initialement, le nuage a une concentration égale à 100% en polluant et des propriétés uniformes. Les termes sources de *Phast* (*cf.* § I.1.2.3) sont combinés avec le modèle UDM, pour obtenir plusieurs sorties comme : i) les dimensions du nuage dans la direction du vent ii) les distances de sécurité correspondant aux seuils toxiques[1] et iii) l'empreinte du nuage à un instant donné.

[1] Pour chaque produit toxique, la réglementation prévoit d'étudier différents seuils de toxicité, correspondant aux effets irréversibles, à 1% de létalité et à 5 % de létalité.

I.2.5.1 Les modes de rejets

Le modèle UDM est capable de traiter les rejets instantanés, continus et de durée finie. De plus, il permet de modéliser les rejets variables dans le temps, comme par exemple la modélisation d'une fuite pendant la dépressurisation d'un réservoir de stockage.

a) Rejet instantané

La Figure I.10 montre l'évolution de la bouffée qui résulte d'un rejet instantané. Les résultats du modèle donnent la position et les propriétés au centre de la bouffée en fonction du temps. La bouffée est supposée sphérique quand elle est élevée, puis de forme elliptique tronquée lorsqu'elle touche le sol.

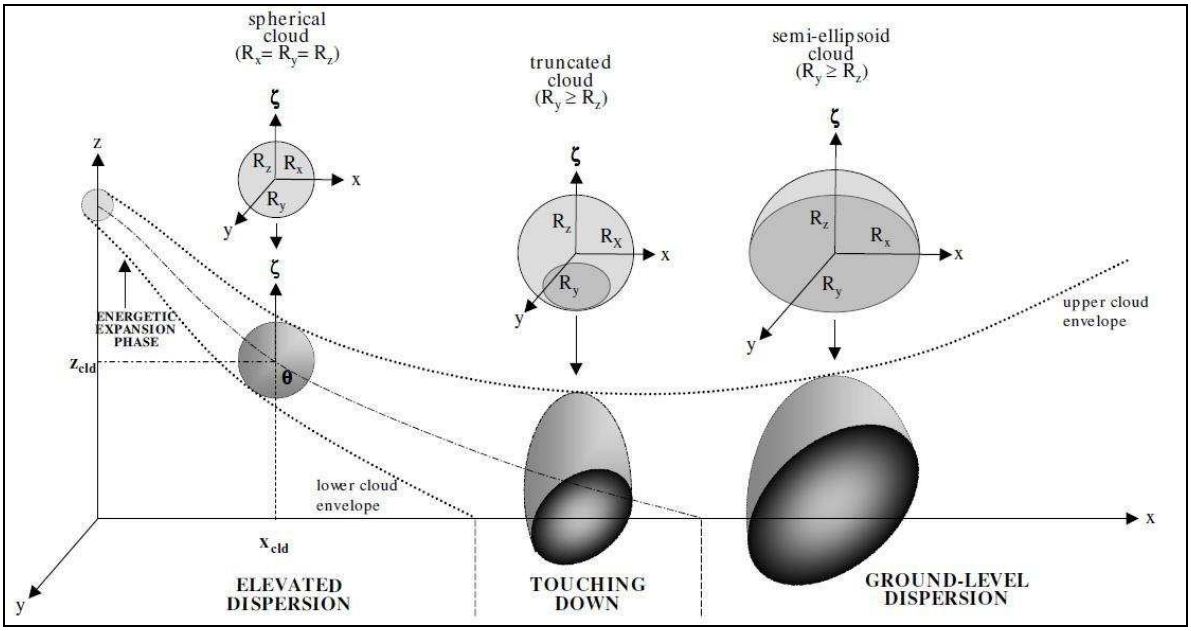


Figure I.10 Évolution et géométrie du nuage pour un rejet instantané (d'après Witlox, 2006)

La première phase d'un rejet pressurisé instantané est une expansion énergétique radiale qui se produit pendant la dépressurisation jusqu'à la pression atmosphérique. Cette dépressurisation joue un rôle important dans la dilution du nuage avec l'air, mais ne contribue pas au déplacement du nuage. Ensuite, le nuage se déplace dans la direction du vent.

b) Rejet continu

Pour la modélisation de la dispersion d'un rejet continu, le modèle considère un panache totalement développé qui continue à être alimenté en polluant. Les résultats donnent les caractéristiques des sections verticales perpendiculaires à l'axe de ce panache (dimensions, concentrations, ...). Ces sections sont circulaires si le panache est dispersé en altitude ou elliptiques tronquées si le panache touche le sol et s'étale au sol (Figure I.11). Dans ce cas, contrairement au rejet instantané, la quantité de mouvement initiale du nuage contribue au déplacement du nuage.

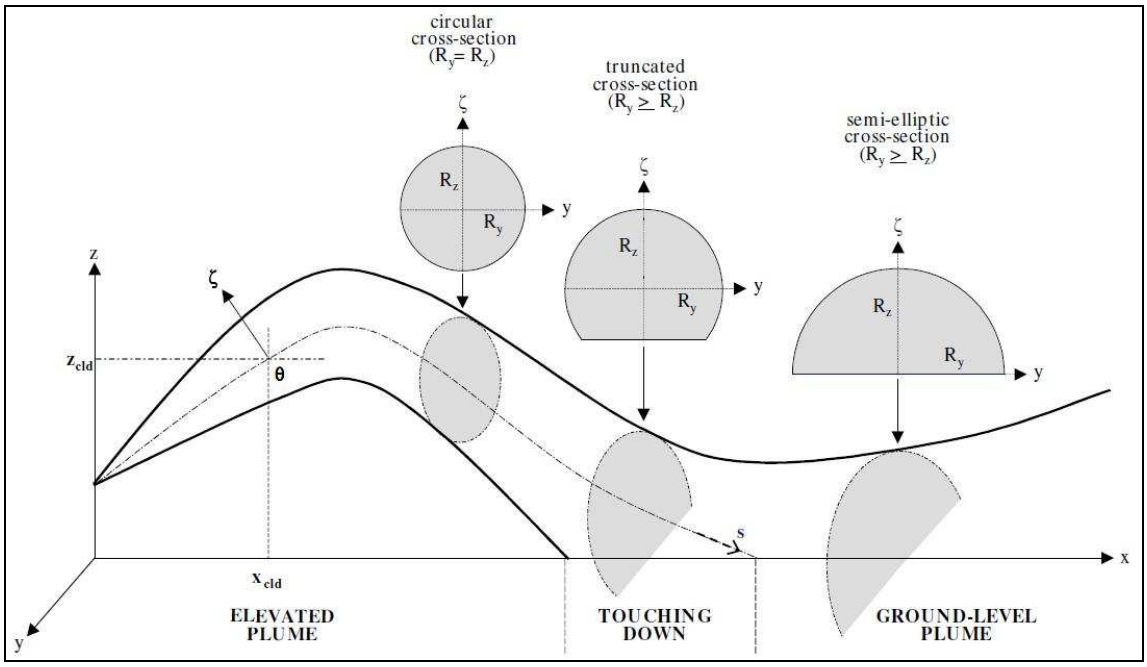


Figure I.11 Évolution et géométrie du nuage pour un rejet continu (d'après Witlox, 2006)

c) Rejet de durée finie

Dans le cas où la durée de rejet est relativement courte, il est difficile de choisir le mode de rejet adapté : continu ou instantané. Par exemple, pour un rejet d'une durée de 1 minute, on peut considérer le rejet comme instantané par rapport aux effets dans le champ lointain, mais par rapport aux effets dans le champ proche, on le considère comme un rejet continu. Pour modéliser ce type de rejet, UDM applique une approche spécifique, qui s'appelle « quasi instantanée », et qui est illustrée sur la Figure I.12. Le rejet se comporte tout d'abord comme un rejet continu avec un panache qui se déplace dans la direction du vent, puis à un moment donné dit « de transition », il est remplacé par une bouffée instantanée.

Le critère de transition est basé sur la valeur du rapport largeur sur longueur du nuage : quand ce rapport est supérieur à une valeur donnée fixée par *Phast*, la transition s'effectue automatiquement. Cette approche représente bien la réalité, mais présente toutefois quelques inconvénients. En particulier, la transition brusque du nuage entraîne la surestimation de la concentration dans le champ proche à cause de la non prise en compte des effets de diffusion dans la direction du vent et de l'étalement sous l'effet de la gravité.

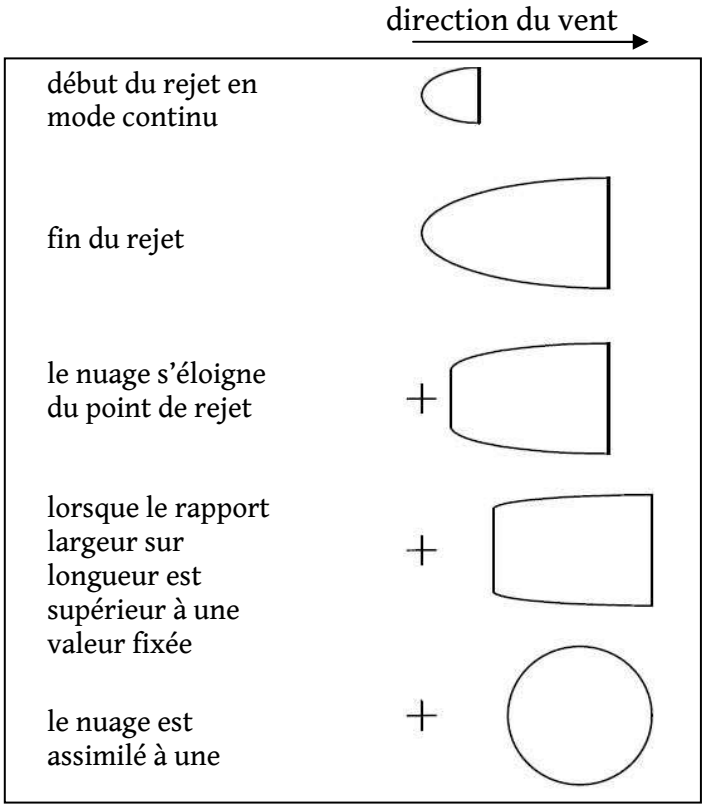


Figure I.12 Approche "quasi-instantanée"

I.2.5.2 Les variables et les équations de dispersion

L'UDM est basé sur un ensemble d'équations différentielles qu'il faut intégrer pour calculer les sorties du modèle en fonction de la distance (pour un rejet continu) ou du temps (pour un rejet instantané). Le système d'équations différentielles comprend les équations de bilans matière, chaleur et quantité de mouvement, auxquelles s'ajoutent les équations qui régissent l'étalement du nuage. Le système d'équations dépend de la phase de dispersion. Pour un rejet continu, la résolution de ce système se fait suivant la distance *X*, dans la direction du vent.

a) Conservation de la masse totale du nuage

En régime permanent, l'équation suivante exprime le bilan de masse du polluant dans le nuage à cause de l'entrainement d'air et du transfert de la vapeur d'eau (dans le cas de dispersion sur l'eau) dans le nuage :

$$\frac{d\,\dot{m}_{cld}}{ds} = E_{tot} + \frac{d\,\dot{m}^{gnd}_{wv}}{ds}$$

où, $\dot{m}_{cld}$ = débit massique du polluant dans le nuage (kg·s^{-1})

s = longueur de l'arc le long du centre du nuage (m)

E_{tot} = entrainement total de l'air ambiant dans le nuage (kg·m^{-1}·s^{-1})

$\dot{m}^{gnd}_{wv}$ = débit massique de la vapeur d'eau dans le nuage (kg·s^{-1})

L'entrainement total de l'air ambiant dans le nuage, E_{tot}, pendant la dispersion du nuage est dû à divers mécanismes :

- entrainement « jet », E_{jet} qui se produit à cause de la différence entre la vitesse de nuage et la vitesse du vent.
- entrainement « crosswind », E_{cross} associé à la formation de tourbillons pendant les mouvements ascendant et descendant du nuage.
- entrainement passif dans le champ proche, E_{pas}^{nf} créé par la turbulence ambiante dans le champ proche.
- entrainement « gaz dense », E_{hvy} dû à la différence de masse volumique entre le nuage et l'air.
- entrainement passif dans le champ lointain, E_{pas}^{ff} créé par la turbulence ambiante dans le champ lointain.

Les entrainements « jet » et « crosswind » sont dominants dans le champ proche lorsque le rejet est pressurisé. En revanche, dans le cas d'un rejet à faible vitesse, ces mécanismes ne sont pas dominants, l'entrainement passif dans le champ proche peut devenir important. Si le produit rejeté est plus lourd que l'air, l'entrainement « gaz dense » joue un rôle important quand le nuage est au sol. Avec le déplacement du nuage, la vitesse et la densité du nuage commencent à diminuer et approchent celles de l'air. Quand c'est le cas, l'entrainement d'air est dû au phénomène d'entrainement passif dans le champ lointain.

b) Conservation de la quantité de mouvement

Quand le nuage touche le sol, la composante verticale de la quantité du mouvement est transformée en composante horizontale quel que soit le mode de rejet (instantané ou continu). La conservation de la quantité du mouvement prend en compte les diverses forces :

- force de traînée dans l'air, F_{drag}^{air}, qui est perpendiculaire à l'axe du nuage et positive dans la direction du vent (X).
- force d'impact au sol, F_{impact}^{ground}, qui résulte de la collision du nuage avec le sol. Cette force, perpendiculaire à l'axe du nuage, est seulement prise en compte pendant que le nuage touche le sol.
- force de traînée au sol, F_{drag}^{ground}, qui prend en compte la force de trainée au sol.
- force verticale de flottabilité, qui est proportionnelle à l'accélération gravitationnelle g et à la différence de densité entre le nuage et l'air.

c) Position du nuage

Les positions horizontale et verticale du centre du nuage sont calculées à partir des équations suivantes :

$$\frac{dx_{cld}}{dt} = u_x = u_{cld} \cos\theta$$

$$\frac{dz_{cld}}{dt} = u_z = u_{cld} \sin\theta$$

où, x_{cld} = position du centre du nuage dans la direction X, m

z_{cld} = position du centre du nuage dans la direction Z, m

u_x, u_z = composantes suivant x et suivant z de la vitesse du vent, m·s^{-1}

t = temps écoulé après le début de rejet, s

d) Transfert de chaleur

Le transfert de chaleur entre le sol et le nuage est pris en compte par l'équation suivante :

$$\frac{dq_{gnd}}{ds} = Q_{gnd} \cdot \left[2W_{gnd}\right]$$

où q_{gnd} = débit du transfert de chaleur entre le nuage et le sol (J·s^{-1})

Q_{gnd} = flux de chaleur par conduction entre le sol et le nuage (W·m^{-2})

W_{gnd} = demi-largeur du nuage qui est en contact avec le sol (m)

Q_{gnd} est calculé à partir de deux mécanismes : la convection naturelle et la convection forcée.

e) Étalement du nuage

L'étalement du nuage dans la direction Y est caractérisé par le rayon R_y.

Pendant la première phase de jet, R_y est calculé à partir de la masse, de la vitesse et de la densité du nuage (les équations sont détaillées dans le « UDM Theory Document » (Witlox, 2006)). Pendant cette phase, on considère que le nuage est circulaire (avant qu'il touche le sol) (*cf.* Figure I.11), donc $R_y = R_z$.

Pendant la phase dense, l'étalement du nuage est proportionnel au paramètre C_E, comme le montre l'équation suivante :

$$\frac{dR_y}{dx} = \frac{C_E}{u_x \cdot C_m} \sqrt{\frac{g\left\{\max\left[0, \rho_{cld} - \rho_a\left(z = z_{cld}\right)\right]\right\} \cdot H_{eff}\left(1 + h_d\right)}{\rho_{cld}}}$$

où, R_y = rayon du nuage selon la direction Y (m)

C_E = Coefficient d'étalement du nuage dense selon la direction Y (-)

ρ_{cld} = densité du nuage (kg·m^{-3})

H_{eff} = hauteur effective du nuage (m)

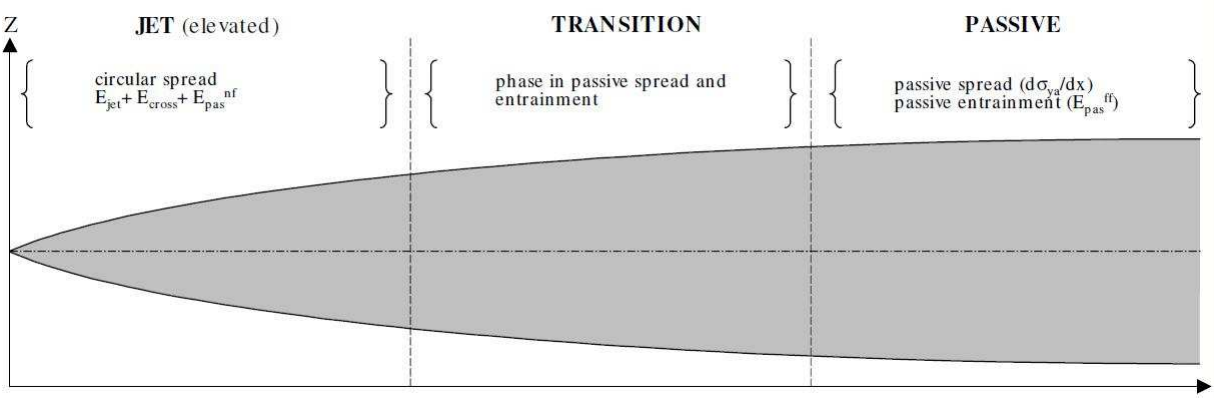
h_d = la fraction de la moitié inférieure du nuage qui est au dessus du sol (-)

La fonction C_m est expliquée dans le « UDM Theory Document » (Witlox, 2006).

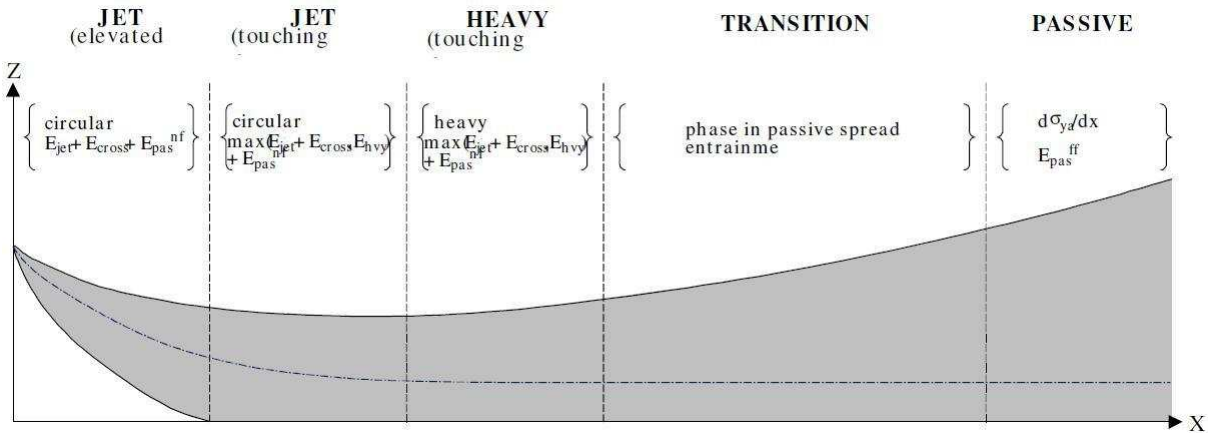
I.2.5.3 Phases de dispersion atmosphérique

Dans le modèle UDM, la dispersion est représentée par diverses phases (jet, dense, transition, passive) dont l'occurrence varie selon les conditions de rejet et les propriétés

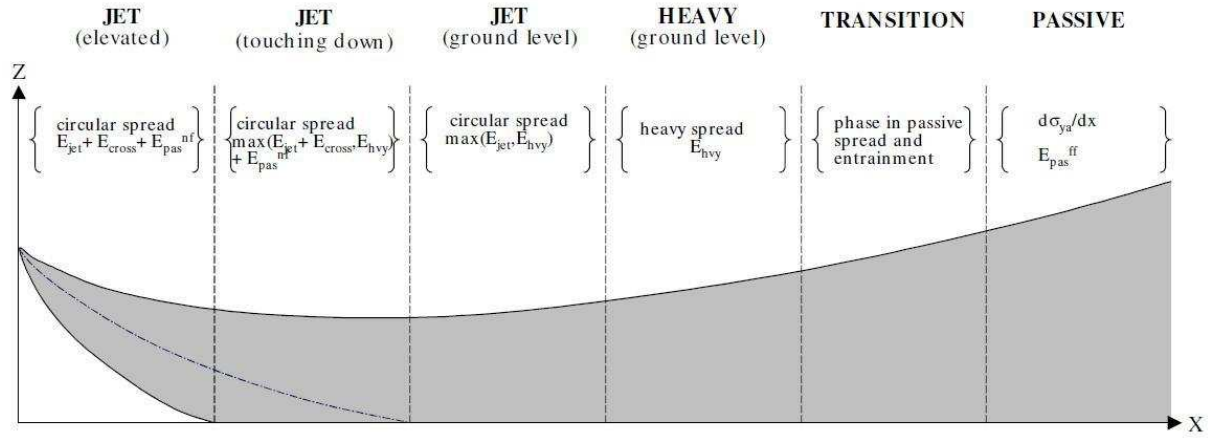
du produit. Chaque phase de dispersion correspond à un mécanisme d'entrainement d'air et à un mécanisme d'étalement du nuage différents. Chaque phase est caractérisée par un ensemble d'équations spécifiques. La Figure I.13 illustre les phases de dispersion dans cinq différents scénarios.



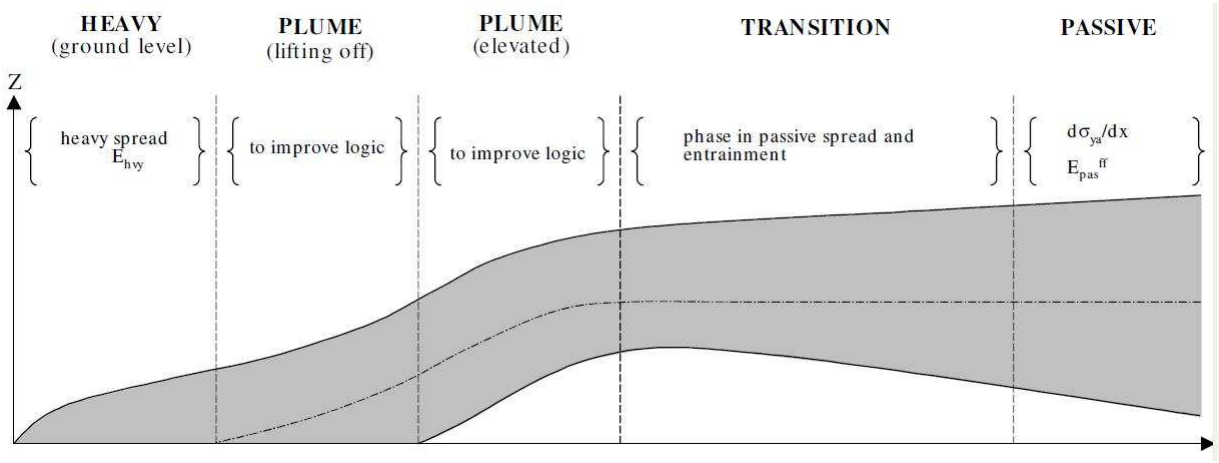
a) jet élevé



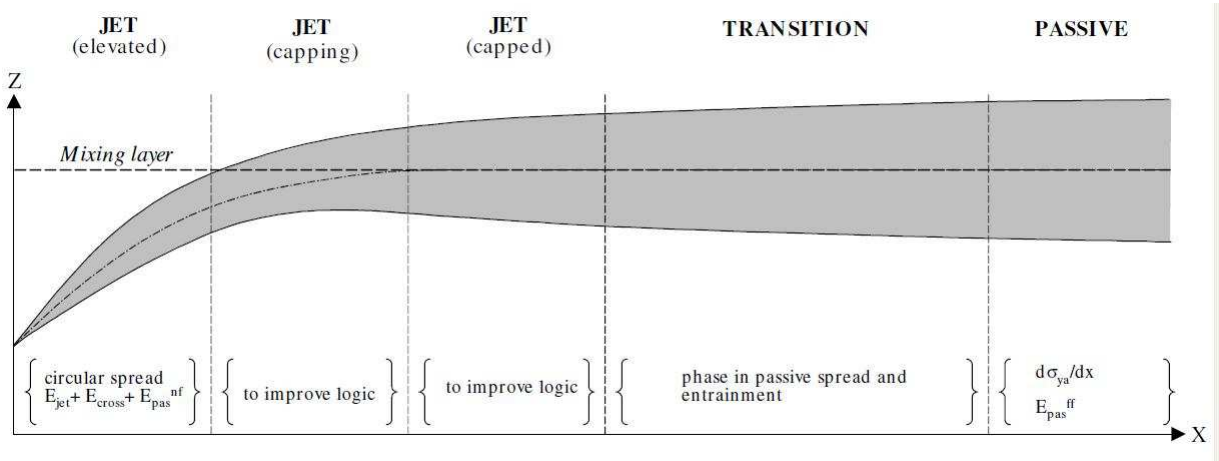
b) jet touche le sol



c) jet au sol



d) décollement du nuage



e) nuage touche la couche d'inversion

Figure I.13 Phases de dispersion selon UDM a) jet élevé, b) jet touche le sol, c) jet au sol, d) décollement du nuage, e) nuage touche la couche d'inversion
(d'après Witlox, 2006)

Le premier cas correspond à un rejet pressurisé en hauteur d'un gaz léger (Figure I.13 a). Il montre que le nuage se disperse, d'abord sous forme d'un jet élevé, qui devient passif après avoir effectué la transition entre la phase jet et la phase passive. Si le produit est plus lourd que l'air, alors le nuage touche le sol (Figure I.13 b) et il peut s'effondrer au sol (Figure I.13 c). Dans le cas où le terme source est situé au sol (Figure I.13 d), le nuage, lorsqu'il est plus lourd que l'air, s'étale au sol et s'il devient plus léger que l'air, il décolle. Pour le rejet d'un produit plus léger qui l'air, le nuage s'élève jusqu'à la couche d'inversion lorsqu'elle existe (Figure I.13 e) et dans ce cas le centre du nuage reste à la hauteur d'inversion.

Pendant la phase jet élevé, l'entrainement total de l'air est égal à la somme de E_{jet}, E_{cross} et E_{pas}^{nf}.

Quand le jet touche le sol, E_{tot} est calculé par :

$$E_{tot} = E_{pas}^{nf} + \max(\left(E_{jet} + E_{cross}, E_{hvy}\right)$$

Pour un jet au sol (l'axe du jet touche le sol), E_{tot} est égale à $max(E_{jet}, E_{hvy})$ avant que la phase dense devienne dominante.

La phase de transition est introduite pour effectuer la transition entre la phase jet ou dense et la phase passive. Pendant la transition, les termes d'entrainement à cause de la dispersion passive sont introduits progressivement et les autres termes d'entrainement non-passifs sont éliminés. La dispersion s'étale sur une distance assez longue pour éviter la discontinuité entre les phases. Le début de la transition, x_{tr}^{pas} est atteint quand les quatre conditions suivantes sont satisfaites :

- la vitesse du nuage est assez proche de celle de l'air (dépend de r_u^{pas})
- la densité du nuage est assez proche de celle de l'air (dépend de r_{ro}^{pas})
- l'entrainement passif est assez proche de l'entrainement total (dépend de r_E^{pas})
- le nombre de Richardson est assez petit (dépend de Ri_*^{pas})

Pendant la phase de transition, située entre x_{tr}^{pas} et $r_{tr}^{pas}.\, x_{tr}^{pas}$, l'entrainement total de l'air, E_{tot} est calculé par l'équation suivante :

- *jet élevé*

$$E_{tot} = f(x)\left[E_{jet} + E_{cross} + E_{pas}^{nf}\right] + \left[1 - f(x)\right]E_{pas}^{ff}, \quad x_{tr}^{pas} < x < x_{tr}^{pas} \cdot r_{tr}^{pas}$$

- *jet au sol*

$$E_{tot} = f(x)\left[\max\left\{E_{jet} + E_{cross}, E_{hvy}\right\} + E_{pas}^{nf}\right] + \left[1 - f(x)\right]E_{pas}^{ff}, \quad x_{tr}^{pas} < x < x_{tr}^{pas} \cdot r_{tr}^{pas}$$

Où la fonction *f(x)* est définie par l'équation suivante :

$$f(x) = \frac{\left[x - x_{tr}^{pas}\right]}{\left[x_{tr}^{pas} \cdot r_{tr}^{pas} - x_{tr}^{pas}\right]}$$

I.2.5.4 Temps de « moyennage » (« averaging time »)

Au cours de la dispersion, *Phast* calcule la concentration maximale au centre du nuage, en fonction du temps et de la distance. Pour un rejet continu de longue durée, ayant atteint un état stationnaire (les conditions de rejet et de dispersion ne varient plus), un observateur fixe situé sur le passage du nuage est alors exposé à une concentration constante. Cependant, si à l'endroit où se trouve l'observateur, la dispersion est déjà de type « passive », le nuage peut alors se déplacer latéralement en fonction du changement de direction du vent. Cet observateur voit alors la concentration varier au cours du temps, même s'il reste immobile.

Pour comprendre cette apparente contradiction, il faut rappeler que les concentrations calculées par *Phast* sont celles correspondant au centre ou à l'axe central du nuage. Dès que l'on s'écarte de cet axe dans une direction perpendiculaire à celle du vent, la concentration diminue suivant une loi de répartition gaussienne (Figure I.14).

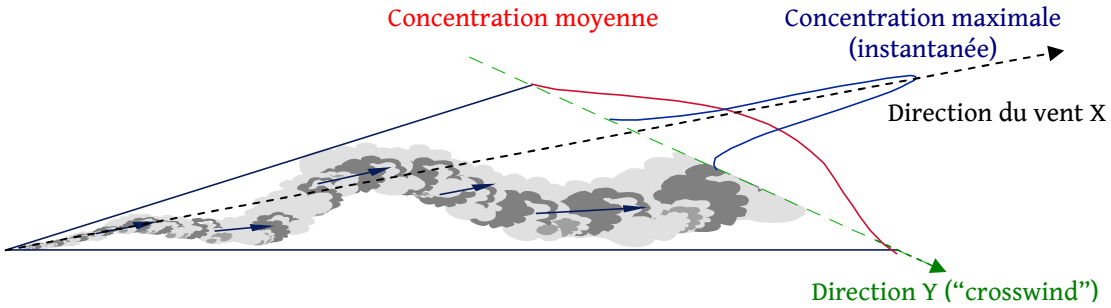


Figure I.14 Variation de la concentration dans le nuage

Or au cours du temps, la direction du vent fluctue légèrement autour d'une direction principale X, ce qui se manifeste par un panache qui se met à faseyer. Pour prendre en compte ces fluctuations, il est fait usage d'un temps d'intégration ou intervalle de lissage (« averaging time » en anglais), qui correspond à l'intervalle de temps pendant lequel sont relevées les concentrations fluctuantes (à une distance donnée), afin d'en déduire une concentration moyenne représentative pendant cet intervalle de temps.

Pour évaluer l'exposition d'une personne à un nuage toxique dérivant, il est préférable de ne retenir que cette concentration moyenne. La concentration maximale, évaluée par *Phast* sur l'axe central du nuage n'est pas représentative, car elle ne prend pas en compte les fluctuations du vent.

Phast permet d'évaluer cette concentration moyenne de deux manières différentes :

- Calcul de la concentration maximale (dans l'axe du nuage) à partir du temps d'intégration principal (appelé « core averaging time » dans *Phast*). Une fois le calcul de la dispersion terminé et les concentrations maximales déterminées en fonction du temps et des distances à la source, *Phast* évalue les concentrations moyennes du nuage (dans sa partie « passive ») grâce à l'utilisation d'une routine de calcul complémentaire (appelée « post-processor »). Cette routine reprend les concentrations maximales et applique à chacune d'elles un facteur correctif, déterminé à partir de la valeur du temps d'intégration toxique (« toxic averaging time » en anglais). Cette méthode est la méthode par défaut de *Phast*.
- Calcul direct de la concentration moyenne en imposant un temps d'intégration principal égal au temps d'intégration toxique. Ce n'est pas la méthode par défaut dans *Phast*, car elle nécessite d'ajuster le temps d'intégration principal pour chaque scénario, ce qui complique considérablement la modélisation. Cependant, cette méthode permet de s'affranchir de la routine de calcul complémentaire (« post processor »), qui a tendance à introduire des erreurs dans le calcul des concentrations moyennes. Cette approche est reconnue par DNV comme étant la méthode donnant les résultats les plus fiables.

Le temps d'intégration principal par défaut dans *Phast* est de 18,75 s. Le temps d'intégration toxique par défaut dans *Phast* est de 600 s. Le calcul de la concentration moyenne n'a de sens que lorsque le nuage passe au-dessus de l'observateur pour lequel on cherche à déterminer la concentration moyenne. Il faut donc s'assurer que le temps d'intégration est toujours inférieur au temps d'exposition (ou temps de passage du nuage au-dessus de l'observateur). Procéder autrement sous-entend l'ajout dans la moyenne, de

valeur de concentration égale à zéro, d'où une sous-estimation notable de la concentration moyenne.

Le concepteur du logiciel *Phast* (Witlox, 2005) recommande de caler la valeur de la durée d'intégration sur la durée de passage du nuage, soit en général sur la durée de rejet, y compris pour des rejets de plus de 10 min (jusqu'à une heure maximum). Il recommande en outre d'accorder la valeur du « core averaging time » à celle de l'« averaging time ».

I.2.5.5 Classification des paramètres de *Phast*

Nous avons réparti les paramètres de *Phast* dans quatre familles (A, B, C et D) comme le montre le Tableau I.6.

Tableau I.6 Les 4 familles de paramètres de Phast

Famille	Description
A	Paramètres d'entrée : paramètres du terme source (par exemple, pression et température de stockage, diamètre de fuite,…), paramètres météo (par exemple, pression et température atmosphérique, …)
B	Paramètres matérialisant le choix d'un modèle de *Phast* (par exemple, modèle thermodynamique : équilibre ou non-équilibre)
C	Paramètres internes des modèles physiques (par exemple, α_1 et α_2 pour le modèle de jet)
D	Paramètres de résolution numérique, qui contrôlent par exemple la discrétisation dans le temps ou dans l'espace

Les paramètres du terme source sont fixés lors de la définition du scénario à partir des caractéristiques de stockage de produit et les paramètres météo sont définis à partir des données météo correspondant à la situation géographique du site.

Le Tableau I.7 contient les paramètres de la famille A avec leur signification et l'unité utilisée. Les tableaux complets des paramètres de *Phast* figurent dans l'*Annexe 1*. L'organisation de ces tableaux correspond à celle de l'interface graphique de *Phast*.

Tableau I.7 Paramètres de la famille A

	Paramètres (unité)	***Symbole***
1	Température de stockage (K)	T_{st}
2	Pression de stockage relative (Pa)	P_{st}
3	Diamètre d'orifice (m)	D_o
4	Hauteur du liquide dans le réservoir (m)	L_h
5	Température atmosphérique (K)	T_a
6	Pression atmosphérique (Pa)	P_a
7	Humidité relative atmosphérique	H_a
8	Durée de rejet (s)	*Dur*
9	Hauteur de rejet (m)	*ZR*
10	Angle de rejet (degré)	θ ou *angle*
11	Rugosité de surface (m)	*Z0*
12	Vitesse du vent ($m \cdot s^{-1}$)	U_a
13	Capacité thermique atmosphérique ($J \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1}$)	C_{pa}
14	Flux solaire radiatif ($W \cdot m^{-2}$)	S_{flux}

I.3 L'analyse de sensibilité

L'analyse de sensibilité (AS) étudie comment la variation de la sortie d'un modèle peut être attribuée aux variations des différents paramètres (Figure I.15). L'analyse de sensibilité d'un modèle permet d'améliorer la compréhension du comportement du modèle, c'est-à-dire comment le modèle va réagir par rapport aux paramètres d'entrée, la cohérence entre le modèle et le système qu'il représente et la manière dont les différentes parties du modèle interagissent.

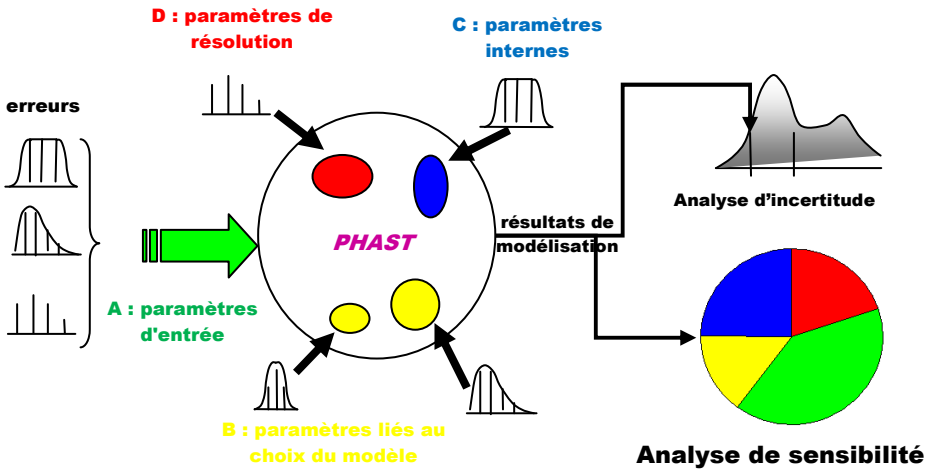


Figure I.15 Démarche d'analyse de sensibilité (d'après Saltelli, 2006)

D'après Saltelli et al. (2004), les résultats de l'AS peuvent :

- fournir des éléments pour approfondir l'étude des paramètres les plus influents sur la réponse du modèle ;
- faire ressortir des zones critiques dans l'espace d'entrée qui génèrent des sorties irréalistes ;
- aider à simplifier le modèle en négligeant les paramètres les moins influents du modèle ;
- donner des arguments pour prendre une décision politique.

Il existe plusieurs méthodes d'analyse de sensibilité selon le domaine d'application et le niveau de complexité du système. Il existe trois catégories de méthode (Saltelli et al., 2004):

- les méthodes de criblage ou « screening » ;
- les méthodes d'analyse de sensibilité locale ;
- les méthodes d'analyse de sensibilité globale.

I.3.1 Méthodes de criblage ou « screening »

Les méthodes de « screening » analysent qualitativement l'importance des variables d'entrée sur la variabilité de la réponse du modèle (Bettonvil et Kleijnen, 1997; Campolongo et Braddock, 1999; Deana et Lewis, 2002; Morris, 2006). L'objectif de ces méthodes est, dans un premier temps, d'isoler les paramètres qui sont très influents sur les résultats et donc, de réduire le nombre de paramètres à analyser avec des méthodes plus sophistiquées et/ou plus coûteuses. Ces méthodes sont souvent appliquées dans le cas où le modèle contient un nombre considérable de paramètres d'entrée et nécessite un temps de calcul très élevé.

I.3.2 Méthodes d'analyse de sensibilité locale

Les méthodes d'analyse de sensibilité locale reposent sur le calcul d'un indice de sensibilité représentant les variations d'une sortie du modèle suite à une faible variation d'un paramètre d'entrée (Turányi et Rabitz, 2004). A chaque paramètre d'entrée est attribuée une valeur nominale de référence. L'analyse de sensibilité s'effectue en faisant varier la valeur de référence d'un paramètre d'entrée en fixant tous les autres paramètres d'entrée à leur valeur nominale. Cette manière de procéder – ne modifier la valeur que d'un paramètre d'entrée à la fois – ne permet aux analyses de sensibilité locale que de couvrir une partie de l'espace d'entrée, en excluant toute interaction entre paramètres. L'estimation de l'indice de sensibilité S_i par rapport au paramètre x_i, par une méthode OAT (« One-At-a-Time ») (Bubbico et Mazzarotta, 2007; UDM Verification manual, 2006; Nair et al., 1997) est définie par :

$$S_i^L = \frac{\partial y}{\partial x_i} \qquad \left(x_1^0, \ldots, x_p^0\right)$$

où y est une sortie, x_i est un paramètre d'entrée et l'exposant 0 symbolise la valeur nominale.

La Figure I.16 montre que la sortie est très sensible aux variations du paramètre au point A, alors qu'elle ne l'est pas au point B. C'est avec l'analyse de sensibilité locale qu'on pourra identifier les zones de l'espace d'entrée où la variation de la sortie du modèle est importante ou faible.

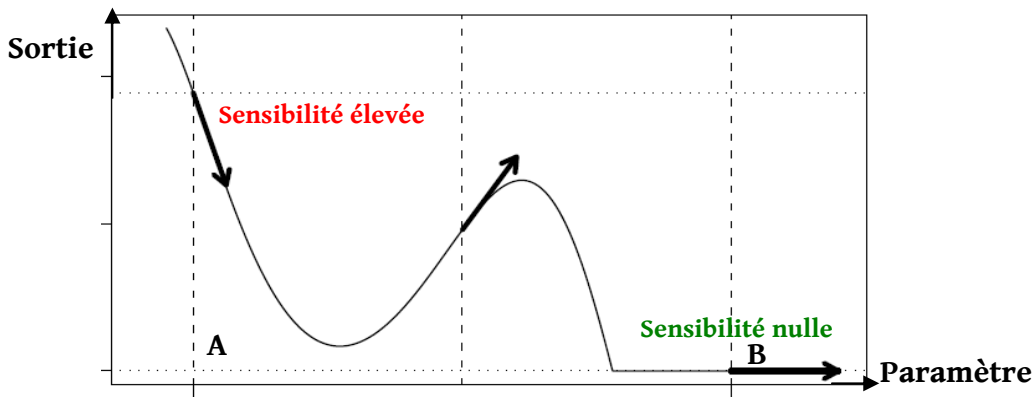


Figure I.16 L'analyse de sensibilité locale

Les analyses de sensibilité locales sont souvent basées sur des variations de ±5%, ±10%... autour de la valeur nominale des paramètres d'entrée du modèle. L'indice de sensibilité locale ne reflète pas nécessairement la complexité d'un modèle, puisqu'on ne prend en compte ni toute la plage de variation des paramètres, ni la forme des densités de probabilité des paramètres d'entrée, ni les effets d'interaction entre paramètres.

Ces méthodes sont simples et rapides, mais s'avèrent insuffisantes pour caractériser la sensibilité de modèles complexes.

I.3.3 L'analyse de sensibilité globale

L'analyse de sensibilité globale permet de quantifier l'influence des différents paramètres d'entrée sur la variabilité de la réponse d'un modèle numérique. Elle permet de déterminer les variables qui contribuent le plus à la variabilité de la réponse du modèle, les variables les moins influentes et les variables qui interagissent avec les autres. Ces méthodes prennent en compte la densité de probabilité de chaque variable d'entrée et traitent la variation de tous les paramètres simultanément. Saltelli et al. (2004) présentent l'ensemble des méthodes existantes, qui regroupent les méthodes fiabilistes de type FORM et SORM utilisées pour l'analyse de risques, les méthodes bayésiennes, les méthodes graphiques et les méthodes basées sur la variance.

Nous nous intéressons plus précisément aux méthodes basées sur l'étude de la variance qui calculent des indices de sensibilité globale pour quantifier l'influence des paramètres. Elles consistent à déterminer quelle part de la variance de la réponse est due à la variance de chaque paramètre d'entrée (ou groupe de paramètres d'entrée). Pour le calcul de ces indices, des méthodes spécifiques pour les modèles linéaires et/ou monotones existent, ainsi que des méthodes plus générales, qui ne font aucune hypothèse sur le modèle. Ce dernier type de techniques comprend les méthodes FAST et Sobol', que nous allons détailler par la suite. Auparavant, nous allons définir les indices de sensibilité globale.

I.3.4 Indices de sensibilité

L'indice de sensibilité du 1er ordre est donné par l'équation suivante :

$$S_i = \frac{V(E(Y / X_i))}{V(Y)} = \frac{V_i}{V(Y)}$$

où $V(Y)$ = variance totale de la sortie Y

$V(E(Y/X_i))$ = variance de l'espérance conditionnelle de Y par rapport à X_i

Cet indice quantifie la sensibilité de la sortie Y par rapport au paramètre d'entrée X_i, ou encore la part de variance de Y imputable au paramètre X_i. L'indice de sensibilité du 1er ordre représente l'influence « directe » de la variation du paramètre X_i sur Y.

L'indice de sensibilité de 2ème ordre est défini par :

$$S_{ij} = \frac{V(E(Y / X_i, X_j)) - E(Y / X_i) - E(Y / X_j)}{V(Y)} = \frac{V_{ij}}{V(Y)}$$

Cet indice exprime la part de la variance de Y imputable à l'interaction croisée de X_i et de X_j, sans prendre en compte l'effet des variables seules.

On peut définir également des indices d'ordre supérieur à deux.

L'interprétation de ces indices est assez facile puisque leur somme est égale à 1 et leurs valeurs sont toujours positives. Plus l'indice est grand (proche de 1), plus le paramètre a de l'importance.

Par exemple, pour un modèle avec 3 paramètres, il y a $(2^3-1) = 7$ indices de sensibilité.

- 3 indices de sensibilité de 1er ordre – S_1, S_2, S_3
- 3 indices de sensibilité de 2ème ordre – S_{12}, S_{23}, S_{13}
- 1 indice de sensibilité de 3ème ordre – S_{123}

$$\text{Somme de tous les indices} = S_1 + S_2 + S_3 + S_{12} + S_{23} + S_{13} + S_{123} = 1$$

Le nombre d'indices de sensibilité, d'ordre 1 à p, est égal à 2^p 1. Lorsque le nombre de paramètres d'entrée p est important, le nombre d'indices de sensibilité explose. L'estimation et l'interprétation de tous ces indices deviennent dans ce cas plus difficiles.

Indice de sensibilité total : Homma et Saltelli (1996) ont introduit des indices de sensibilité totaux, qui expriment la sensibilité totale de la variance Y à un paramètre, c'est-à-dire la sensibilité à ce paramètre sous toutes ses formes (sensibilité au paramètre seul et sensibilité aux interactions de ce paramètre avec d'autres paramètres).

L'indice de sensibilité total S_{Ti} au paramètre X_i est défini comme la somme de tous les indices de sensibilité relatifs à la variable X_i :

$$S_{Ti} = S_i + S_{i2} + S_{i3} + \ldots + S_{i23} + \ldots$$

Donc, pour p paramètres d'entrée, il y a p indices de sensibilité totaux. Par exemple, pour un modèle avec 3 paramètres, il y a 3 indices de sensibilité totaux :

- $S_{T1} = S_1 + S_{12} + S_{13} + S_{123}$
- $S_{T2} = S_2 + S_{12} + S_{23} + S_{123}$
- $S_{T3} = S_3 + S_{23} + S_{13} + S_{123}$

L'utilisation et l'interprétation de ces indices de sensibilité totaux est plus simple, du fait de leur nombre plus faible.

I.3.5 Méthodes d'estimation des indices de sensibilité globale

Les indices de sensibilité globale peuvent parfois être calculés formellement lorsque la forme analytique du modèle et les densités de probabilité des paramètres d'entrée sont connues et relativement simples. Le plus souvent, le modèle étant très complexe ou la forme analytique étant inconnue, nous ne pouvons pas calculer les indices de sensibilité et il est alors nécessaire de les estimer. L'estimation de ces

indices est faite par des méthodes stochastiques telles que FAST ou Sobol'. Ces deux méthodes sont basées sur le même principe de décomposition de la variance.

On considère le modèle :

$$Y = f(X_1, ..., X_p)$$

où Y est la réponse du modèle et $[X_1,...,X_p]$ sont des p paramètres d'entrée du modèle. Ces deux méthodes sont basées sur l'hypothèse que les paramètres d'entrée sont indépendants (Xu and Gertner, 2007a).

I.3.5.1 Méthode de Sobol'

Cette méthode (proposée par Sobol' (1993)) est basée sur l'évaluation des intégrales multi-dimensionnelles pour estimer la décomposition de fonction *f*. La méthode de Monte Carlo avec échantillonnage aléatoire des paramètres d'entrée X est la méthode de base pour calculer ces intégrales. Il existe diverses méthodes d'échantillonnage permettant d'améliorer la vitesse de convergence comme les échantillonnages Quasi-Monte Carlo, les méthodes pseudo-probabilistes (échantillonnage stratifié ou par hypercube latin (LHS)).

L'échantillonnage stratifié consiste à découper l'espace des variables d'entrée en petits espaces disjoints, puis à échantillonner au sein de chacun de ces sous espaces. L'échantillonnage *LHS* est basé sur le même principe, en s'assurant que le découpage a défini des espaces équiprobables, et que chaque espace est bien échantillonné ; le quadrillage se fait dans le cube unité, pour un tirage aléatoire d'échantillon uniforme, puis ces échantillons sont transformés via la fonction de répartition inverse.

Les méthodes de Quasi-Monte Carlo sont des versions déterministes des méthodes de Monte Carlo. Ces méthodes définissent des séquences d'échantillons déterministes (par exemple la séquence LPτ de Sobol') qui ont une répartition uniforme dans l'espace des variables d'entrée.

Homma et Saltelli (1995) ont comparé la méthode d'échantillonnage par hypercube latin et la méthode de Quasi-Monte Carlo basée sur les séquences LPτ aux méthodes classiques de Monte-Carlo (échantillonnage aléatoire), pour l'estimation d'indices de sensibilité. La Figure I.17 illustre ces trois méthodes d'échantillonnage. Homma et Saltelli ont montré que l'utilisation des séquences LPτ de Sobol' permettait une convergence plus rapide que les deux autres méthodes.

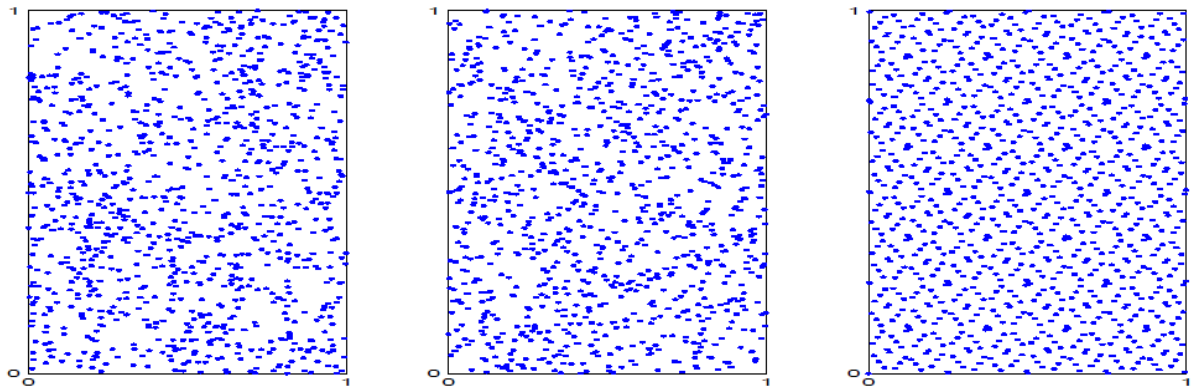


Figure I.17 Échantillonnage (1000 points) de variables uniformes sur [0, 1], a) par échantillonnage aléatoire, b) par hypercube latin (LHS), c) par quasi-Monte Carlo (séquence LPτ de Sobol')

I.3.5.2 Méthode FAST (Fourier Amplitude Sensitivity Test)

Cette méthode (Cukier et al., 1973) utilise la transformée de Fourier multi-dimensionnelle de f pour obtenir une décomposition de la variance de Y (Saltelli et al., 2005; Xu et Gertner, 2007b). Le principe de cette méthode est de remplacer les décompositions multi-dimensionnelles par des décompositions uni-dimensionnelles le long d'une courbe parcourant l'espace d'entrée $[0,1]^p$.

Cette courbe est définie par un ensemble d'équations paramétriques :

$$x_i(s) = g_i(\sin(\omega_i s)) \quad \text{pour } i = 1, \ldots, p$$

où g_i sont des fonctions à déterminer, permettant un recouvrement uniforme de $[0, 1]^p$ et où $(\omega_1, \ldots, \omega_p)$ est un ensemble de fréquences entières linéairement indépendantes (aucune n'est combinaison linéaire des autres).

L'estimation des indices de sensibilité nécessite de définir les fonctions g_i et les fréquences ω_i utilisées et d'effectuer l'évaluation du modèle avec un nombre suffisant de cas pour calculer les intégrales. Pour le choix des fonctions g_i, plusieurs possibilités ont été proposées.

Saltelli et al. (1999) définissent ces fonctions par :

$$x_i(s) = g_i(\sin(\omega_i s)) = \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi}\arcsin(\sin(\omega_i s))$$

où $s \in [-\pi,\pi]$ qui sont celles qui recouvrent le mieux l'espace $[0, 1]^p$ en respectant une distribution uniforme des échantillons. Un exemple est présenté dans la Figure I.18.

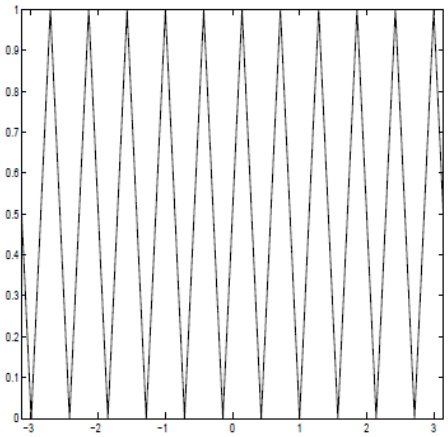


Figure I.18 Fonction $g_1(\sin(\omega_1 s))$ pour $s \in [-\pi,\pi]$ et $\omega_1 = 11$

Saltelli et al. (1999) montrent que ce choix tend à surestimer les variances, et proposent un algorithme automatique pour choisir ces fréquences.

I.3.5.3 Comparaison des méthodes FAST et Sobol'

Un des avantages de la méthode FAST est que les indices de sensibilité peuvent être calculés indépendamment les uns des autres, à partir d'un même échantillon de simulations, ce que ne permet pas la méthode de Sobol' qui nécessite deux échantillons. En revanche, un avantage majeur de la méthode Sobol' est qu'elle permet de calculer tous

les indices de sensibilité, y compris les indices d'ordre supérieur à 1, ce que n'autorise pas la technique FAST. En outre, la méthode de Sobol' étant stochastique, elle permet d'obtenir un intervalle de confiance sur les estimations des indices, ce que ne permet pas la méthode FAST, puisque pour une série de fréquences et une taille d'échantillon données, les estimations d'indices sont déterministes. Saltelli et Bolado (1998) ont comparé FAST et Sobol' sur un certain nombre de modèles. Ils ont conclu que FAST était, d'un point de vue complexité de calcul, plus avantageuse que Sobol'. Néanmoins, FAST est parfois sujette à un biais (que Saltelli et Bolado assignent au choix des fréquences), tandis que Sobol' converge toujours vers la vraie valeur des indices de sensibilité.

Compte tenu de ses avantages en matière de rapidité de convergence en fonction de la taille d'échantillon, nous avons choisi d'utiliser la méthode FAST (dans une version étendue selon Saltelli et al. (1999)).

I.3.6 Analyse de la variabilité de la sortie d'un modèle

L'analyse de sensibilité permet de déterminer l'influence relative des paramètres sur les sorties du modèle, mais ne fournit pas d'information sur la variabilité de chaque sortie. Il est également intéressant de caractériser cette variation de la sortie (plage de valeurs, forme de la distribution, *cf.* Figure I.15).

L'histogramme de sortie est un moyen simple et rapide pour représenter cette distribution graphiquement. L'histogramme est un outil « qualitatif », qui montre la répartition des données. Chaque colonne (en abscisse, sur l'axe *X* - horizontal) est une classe ou catégorie. La hauteur de la colonne (l'ordonnée ou axe *Y* - vertical) indique le nombre de données appartenant à cette catégorie, c'est-à-dire la fréquence à laquelle cette catégorie apparaît dans la distribution.

Nous avons calculé quelques grandeurs pour chaque sortie qui aident à quantifier la variabilité des sorties :

- les valeurs minimale et maximale
- l'écart type, σ
- la moyenne, μ
- le coefficient de variation (*CV*)

Moyenne, μ : La moyenne arithmétique est la moyenne « ordinaire », c'est-à-dire la somme des valeurs numériques (de la liste) divisée par le nombre de ces valeurs numériques.

Écart type, σ : L'écart type mesure la dispersion d'une série de valeurs autour de leur moyenne. Il est défini comme la racine carrée de l'espérance de $(Y\text{-}E[Y])^2$:

$$\sigma_Y^2 = E\left[(Y - E[Y])^2\right] = E\left[Y^2\right] - E[Y]^2$$

Lorsque la distribution d'une sortie suit une loi normale (loi gaussienne), l'écart type et la moyenne permettent d'encadrer les valeurs de sortie (par exemple, 95% des valeurs se situent dans la plage [μ-2σ, μ+2σ]). Notons toutefois que pour les autres distributions (et en particulier, celles que nous avons le plus souvent observées en sortie

du modèle étudié), l'écart type et la moyenne ne sont pas suffisants pour bien caractériser la dispersion de la sortie.

Coefficient de Variation, *CV* : Le coefficient de variation est une mesure de la dispersion relative des valeurs autour de la moyenne : il est égal au rapport entre l'écart-type, σ et la moyenne, μ. On l'exprime également en pourcentage ce qui correspond à la déviation relative standard, (en anglais RSD pour relative standard deviation).

$$CV = \frac{\sigma}{\mu} \cdot 100$$

Plus *CV* est grand, plus la dispersion des valeurs est large.

Le *CV* est un indicateur sans dimension, qui permet donc de comparer les distributions de valeurs même lorsque les unités des valeurs sont différentes. Par exemple : si une multinationale cherche à connaître la dispersion des rémunérations dans ses filiales indienne et française, elle ne comparera pas un écart-type en euros avec un écart-type en roupies, mais plutôt les *CV* !

L'exemple illustré sur la Figure I.19 montre que dans le Cas1 avec le *CV* élevé, les valeurs sont beaucoup plus dispersées que dans le Cas2.

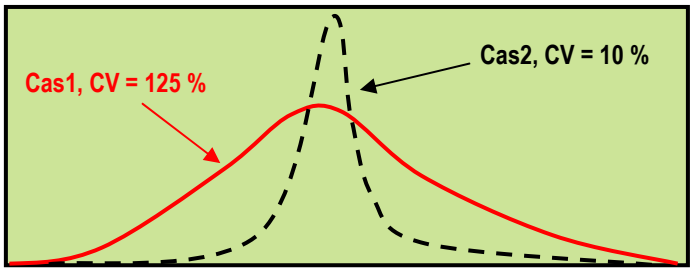


Figure I.19 Comparaison de CV

De plus, nous avons introduit une nouvelle grandeur, appelée *CVSi,* relative à l'effet d'un paramètre *i* sur une sortie donnée. Cette grandeur est calculée en multipliant le coefficient de variation de la sortie par l'indice de sensibilité du 1er ordre, S_i :

$$CVSi = CV \cdot S_i$$

Cette grandeur permet de quantifier l'influence d'un paramètre sur une variation physique d'une sortie. En effet, nous avons constaté que certaines sorties présentent un degré de variabilité très faible (et donc un *CV* très faible) ; alors que les indices de sensibilité du premier ordre sont parfois élevés. Cette grandeur *CVSi* permet donc de distinguer les paramètres dont l'influence résulte d'une forte variation de la sortie, de ceux qui sont influents sur une sortie très peu dispersée.

I.4 Analyse de sensibilité d'outils de modélisation de dispersion atmosphérique : bibliographie

Il existe peu de travaux sur l'analyse de sensibilité d'outils de modélisation de la dispersion atmosphérique de rejets accidentels ou chroniques. Cela s'explique sans doute en partie par la relative lourdeur, en temps de calcul, des modèles de dispersion, et par le grand nombre d'exécutions du modèle nécessaire pour conduire une analyse de sensibilité. Dans cette section, nous résumons les travaux recensés dans la littérature portant sur ce thème, et analysons leurs principaux apports et limitations.

Les manuels de vérification du modèle UDM (UDM Verification Manual, 2006) comportent une analyse de sensibilité de type OAT pour chaque phase de dispersion (jet, dense, transition, passive). Les paramètres étudiés concernent les conditions de rejet : hauteur de rejet, angle de rejet, vitesse de rejet. Les résultats portent sur l'influence de ces paramètres sur la concentration au centre du nuage en fonction de la distance dans la direction du vent. L'objectif de cette étude est de vérifier que les tendances observées sont conformes aux effets connus de ces paramètres sur la dispersion d'un nuage.

Kok et al. (2004) ont mené une analyse de sensibilité d'un modèle de dispersion atmosphérique néerlandais, appelé NPK-PUFF, pour des scénarios de rejet de contaminants radioactifs. NPK-PUFF est un modèle de type lagrangien basé sur le calcul des trajectoires turbulentes d'un grand nombre de particules représentant le polluant. Pour quantifier l'écart entre les calculs et les observations (campagne d'essais de rejet de gaz SF6 effectuée à Kincaid aux USA), les auteurs utilisent un indice qui varie entre 0 et 100 où 0 correspond à un écart très faible et où 100 correspond à un écart très élevé. Cette méthode permet d'identifier la valeur optimale d'un paramètre donné pour laquelle l'indice est minimum. Cette technique permet également de mettre en évidence les paramètres influents. L'outil de calcul du RIVM (National Institute for Public Health and the Environment) pour la validation de modèles de dispersion, appelé Model Validation Tool (MVT), a été utilisé dans cette étude.

Ferenczi (2005) s'est également intéressé à la dispersion de polluant radioactif en utilisant le code RIMPUFF qui permet de simuler en temps réel des rejets de gaz sous forme de bouffée ou de panache en prenant en compte les conditions météorologiques. L'analyse de sensibilité a été effectuée selon la méthode OAT. Les paramètres étudiés sont la classe de stabilité (A, D, F), la hauteur de rejet (1, 10, 50, 100 m), la hauteur d'inversion qui dépend de la classe de stabilité et la vitesse du vent (1 ou 2 m/s). Les résultats sont représentés sous forme de contours iso-concentrations.

Bubbico et Mazzarotta (2008) ont appliqué la méthode OAT pour simuler des scénarios de rejets accidentels de produits toxiques (durée du rejet égale à 15 minutes) : acide chlorhydrique, ammoniac, triméthylamine et brome. Les paramètres étudiés sont la classe de stabilité de Pasquill (4 valeurs), la vitesse du vent (7 valeurs), la température ambiante (8 valeurs) et le diamètre de fuite (3 valeurs). Les distances de sécurité (dans la direction du vent X et dans la direction Y) correspondant aux deux seuils de toxicité, ERPG-2 et IDLH, sont calculées avec le logiciel TRACE 9.0/ALOHA. Les courbes qui représentent les distances en fonction de chaque paramètre sont assimilées à des portions de droites dont on calcule la pente et le coefficient de corrélation. Les résultats permettent de mettre en évidence l'influence des paramètres que nous qualifions de classe A dans notre étude et de comparer comment cette influence varie en fonction des

produits. Pour les produits ayant une température d'ébullition (T_b) basse (HCl et NH_3), qui se vaporisent très rapidement dans l'atmosphère, le scénario correspondant à une distance d'effet maximale est obtenu avec la classe F et une faible vitesse du vent (1 $m \cdot s^{-1}$) alors que pour les produits ayant une T_b élevée le scénario majorant correspond aux conditions atmosphériques stables. L'influence de la vitesse du vent varie avec le produit considéré : la distance de sécurité augmente de façon significative lorsque la vitesse du vent augmente. Ce phénomène s'explique par l'accroissement de l'évaporation de la flaque avec la vitesse du vent. Dans le cas d'un rejet de brome (T_b égale à 59°C), le scénario majorant correspond à la classe de stabilité neutre (D) et à une vitesse du vent élevée (comprise entre 3 et 5 $m \cdot s^{-1}$) et non aux conditions F3 considérées dans la plupart des cas.

Une étude a été effectuée par le Laboratoire de Mécanique des Fluides et d'Acoustique de l'Ecole Centrale de Lyon (Perkins et al., 2005) sur la dispersion des émissions atmosphériques chroniques d'un site industriel correspondant à un fonctionnement normal des installations. Une partie de ce travail est consacrée à l'analyse de sensibilité de modèles de dispersion tels que ADMS, ARIA-IMPACT. Elle a permis :

- d'évaluer l'influence des différents phénomènes physiques sur la concentration en polluants,
- d'évaluer l'impact sur les concentrations calculées d'une erreur ou d'une incertitude sur les données d'entrées du modèle.

I.5 Conclusion

Le phénomène de la dispersion atmosphérique de gaz relève de mécanismes complexes qui dépendent des caractéristiques du produit rejeté, de la météorologie locale au moment de l'accident, des obstacles près du point de rejet et de l'orographie du site. En conséquence, la modélisation des phénomènes mis en jeu fait appel à la résolution d'équations de bilans (matière, chaleur et quantité de mouvement) et de lois thermodynamiques ainsi que de modèles de calcul de la distribution de tailles de gouttes dans le cas d'un rejet biphasique.

Nous avons vu qu'il existe trois principaux types de modèle de dispersion atmosphérique (gaussien, intégral et 3D) qui possèdent chacun des avantages et des inconvénients. Pour un scénario donné, le choix du modèle le plus pertinent doit tenir compte non seulement des caractéristiques des modèles disponibles mais aussi des ressources informatiques mises à disposition, du niveau de finesse du résultat attendu et du budget alloué à l'étude.

Le logiciel *Phast* permet de simuler une grande variété de scénarios accidentels de rejets et de calculer les conséquences en termes d'effets toxique, thermique et d'explosion. Il comprend des modules de calcul de termes sources, un modèle de dispersion de type intégral (Unified Dispersion Model, UDM) et un module relatif à l'évaporation de flaque. UDM modélise le phénomène par la succession de phases telles que les phases jet, dense, transition et passive, où la phase de transition correspond à une phase virtuelle permettant d'éviter des discontinuités dans les calculs. L'occurrence des différentes phases varie selon les conditions de rejet et les propriétés du produit. Il faut noter l'existence d'un grand nombre de paramètres ajustables que l'on a répartis dans différentes familles (A, B, C et D). Les paramètres de la famille A correspondent aux paramètres de terme source et de météorologie, les paramètres des familles B, C et D correspondent aux paramètres internes du modèle, que la plupart des utilisateurs ne fait jamais varier.

L'analyse de sensibilité paramétrique d'un modèle est effectuée essentiellement dans le but d'identifier les paramètres d'entrée du modèle les plus influents sur les sorties du modèle. Parmi les deux grandes catégories de méthodes existantes, analyse de sensibilité locale et analyse de sensibilité globale, l'analyse locale est relativement simple et rapide, mais s'avère insuffisante pour caractériser la sensibilité de modèles complexes tels que *Phast*. Nous avons donc retenu pour notre étude les méthodes globales basées sur l'étude de la variance pour le calcul des indices de sensibilité.

La revue de la littérature relative aux travaux portant sur l'analyse de sensibilité de modèles de dispersion atmosphérique met en évidence que :

- les analyses sont uniquement de nature « OAT » (faisant varier un seul paramètre à la fois) et ne permettent notamment pas de prendre en compte les interactions entre les paramètres,
- seuls quelques paramètres, appartenant essentiellement à la classe A (paramètres du terme source et météo) ont été étudiés,
- un petit nombre de produits rejetés a été examiné, alors que la nature du produit rejeté (température d'ébullition, densité, etc.) a un impact considérable sur la dispersion d'un nuage de gaz.

Chapitre II. DEMARCHE METHODOLOGIQUE

II.1 Introduction

Dans ce chapitre, nous présentons la démarche que nous avons développée pour conduire l'analyse de sensibilité paramétrique d'un outil d'estimation des conséquences d'accident, les caractéristiques des différents produits étudiés, la stratégie adoptée pour choisir l'ensemble des scénarios relatifs à un produit donné en fonction de divers critères de sélection et la démarche expérimentale[2] mise en œuvre pour effectuer l'analyse de sensibilité de plusieurs modules de *Phast*.

Une partie de ce chapitre est consacrée à la description des paramètres du modèle de dispersion de *Phast* (Unified Dispersion Model) : classification des paramètres par familles, plages de valeurs étudiées, types de distribution, ...

Dans la dernière partie, nous rapportons les études préliminaires qui concernent la validation de notre outil de calcul (PGA) qui relie les logiciels SimLab et *Phast*, le choix « optimal » de la taille de l'échantillon (nombre d'exécutions par scénario) et la répétabilité du calcul des indices de sensibilité.

II.2 Stratégie d'analyse

Cette partie définit la stratégie adoptée pour choisir les produits et les scénarios à étudier. Elle a été construite en tenant compte des demandes des partenaires industriels du projet.

II.2.1 Produits et modules de *Phast* étudiés

Comme nous l'avons déjà dit au Chapitre I, le modèle UDM (Unified Dispersion Model) de *Phast* est un modèle de type intégral qui est capable de traiter différents types de produits pour modéliser les phénomènes liés à la dispersion du nuage. Sachant que la dispersion d'un nuage de gaz dépend des caractéristiques physico-chimiques du rejet (gaz léger, gaz lourd, rejet biphasique...), nous avons sélectionné et étudié séparément des produits variés qui mettent en jeu des phénomènes physiques différents. Après discussion avec les partenaires du projet, les types de produits retenus sont :

- gaz neutre : monoxyde d'azote (NO)
- gaz liquéfié : ammoniac (NH_3)
- gaz dense : chlore (Cl_2)
- liquide : n-hexane (C_6H_{14})
- liquide cryogénique : azote (N_2)
- gaz réactif qui polymérise avec l'eau : fluorure d'hydrogène (HF)

[2] Parler de démarche « expérimentale » peut surprendre, sachant que nous n'avons conduit aucune expérimentation physique. Nous entendons par là le banc de test informatique, les outils d'analyse statistique et les outils de traitement des données qui ont permis d'étudier le logiciel *Phast*.

Le choix de ces produits permet de couvrir un grand nombre de scénarios qui font l'objet des études de danger dans les ICPE.

Quelques caractéristiques des produits étudiés et de l'air sont rapportées dans le Tableau II.1.

Tableau II.1 Quelques propriétés des produits étudiés

Produit	Masse molaire ($kg \cdot kmol^{-1}$)	T_b (°C)	Masse volumique ($kg \cdot m^{-3}$)	Toxique (Tx) et/ou Inflammable (I)	
Air	28,95		1,22 à 15°C et 1,013 bar	-	-
NO	30,01	-151,8	1,27 à 15°C et 1,013 bar	Tx	-
NH_3	17,03	-33,4	0,73 à 15°C et 1,013 bar	Tx	I
Cl_2	70,91	-34,0	3,04 à 15°C et 1,013 bar	Tx	-
N_2	28,01	-195,8	1,18 à 15°C et 1,013 bar	Tx	-
C_6H_{14}	86,17	68,73	0,67 liquide à 20°C et 1,013 bar	-	I
HF	20,01	19,5	0,98 à 15°C et 1,013 bar	Tx	-

Pour chaque type de produit étudié, l'analyse de sensibilité est effectuée avec les modules de *Phast* suivants :

- les modules termes sources : « Leak », « Line rupture » (module de « Short pipe »)
- le module UDM couplé au terme source « Leak »
- UDM seul.

La Figure II.1 résume sous forme d'un arbre l'ensemble des produits et des modules de *Phast* étudiés.

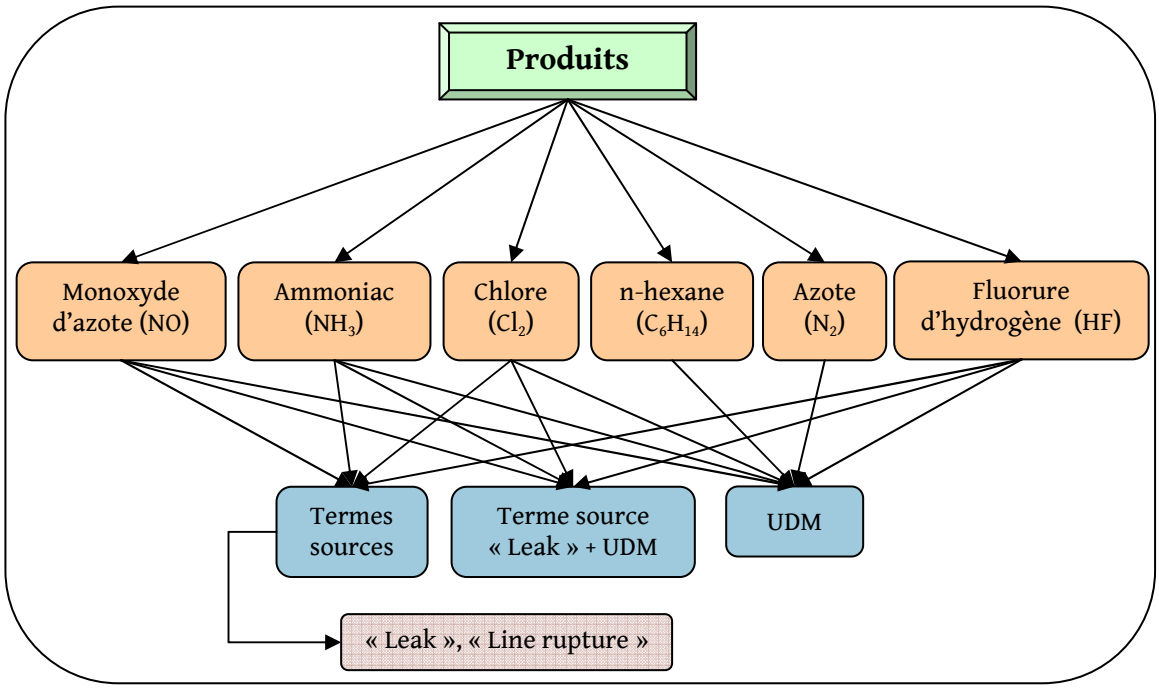


Figure II.1 Produits et modules de Phast étudiés

II.2.2 Stratégie de construction des scénarios

Une stratégie a été mise en œuvre pour effectuer l'analyse de sensibilité globale de *Phast*. L'objectif de cette stratégie est de diviser les scénarios accidentels en sous-scénarios de telle sorte que les sous-scénarios représentent des phénomènes physiques assez différents. Ce découpage a été fait dans le but de faciliter l'interprétation et la compréhension des résultats.

II.2.2.1 Nécessité de décomposer les scénarios

En analysant les premiers résultats de simulation de dispersion atmosphérique, nous avons rapidement conclu qu'une définition des scénarios qui s'appuierait uniquement sur la nature du produit rejeté et sur les différents scénarios de rejet correspondant aux modules de *Phast* ne permettait pas d'interpréter physiquement les effets des paramètres mis en évidence par le calcul des indices de sensibilité. En effet, ces « macro-scénarios » couvrent des phénomènes physiques complexes. Il nous est donc apparu nécessaire de décomposer de façon plus détaillée les scénarios étudiés en définissant plusieurs classes de scénarios.

En effet, dans un premier temps, une analyse de sensibilité paramétrique de type « screening », a été effectuée pour un rejet de NO en phase gaz avec le module de dispersion UDM couplé au terme source « Leak ». Un exemple de résultat de screening est présenté dans la Figure II.2 (les détails des résultats de screening se trouvent dans l'*Annexe 2* et la signification des paramètres qui figurent sur l'axe horizontal est donnée dans la section III.4). Les résultats correspondent aux sorties *C200*, *C1k* et *C10k* (concentrations évaluées respectivement à *X* égal à 200 m, 1000 m et 10000 m dans la direction du vent et à la hauteur *Z* = 1,5 m).

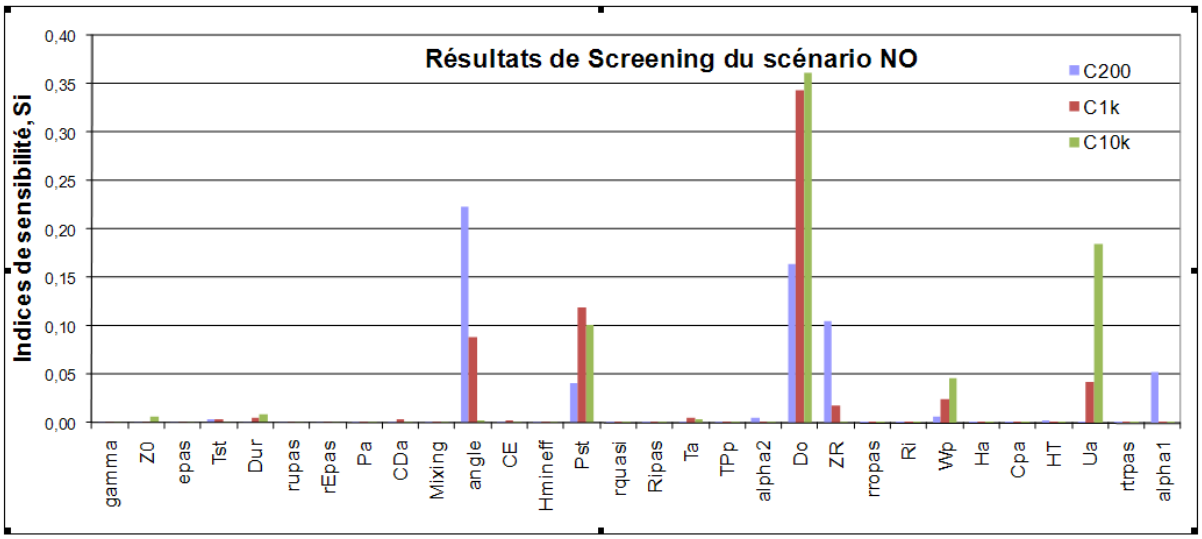


Figure II.2 Indices de sensibilité du 1er ordre pour le scénario de screening NO

Pour le screening, nous avons fait varier les paramètres du terme source (diamètre d'orifice, pression de stockage, température de stockage), les paramètres météorologiques (conditions atmosphériques, vitesse du vent, profil vertical du vent, ...), les conditions de rejet (hauteur de rejet, angle de rejet, ...), les paramètres liés aux choix

des modèles, les paramètres de modèle physique (α_1, α_2, ...). A partir des indices de sensibilité, on constate que les paramètres les plus influents (pour la plupart des sorties) appartiennent à la famille A, ce qui était prévisible. Ce sont : le diamètre d'orifice, D_O, la pression de stockage, P_{st}, l'angle de rejet, θ, et la hauteur de rejet, *ZR*. Par exemple, pour les sorties *C1k* et *C10k*, l'indice de sensibilité du 1er ordre relatif à D_O est environ égal à 0,35, ce qui implique que 35 % de la variance totale de la sortie est attribuée à la variation du diamètre d'orifice. Par conséquent, on peut penser que les effets des paramètres appartenant aux familles B, C et D sont masqués par l'influence prépondérante des paramètres de la famille A.

II.2.2.2 Stratégie d'étude

Ces premiers résultats nous ont amenés à mettre au point une stratégie d'étude et de définition des scénarios qui est illustrée dans la Figure II.3.

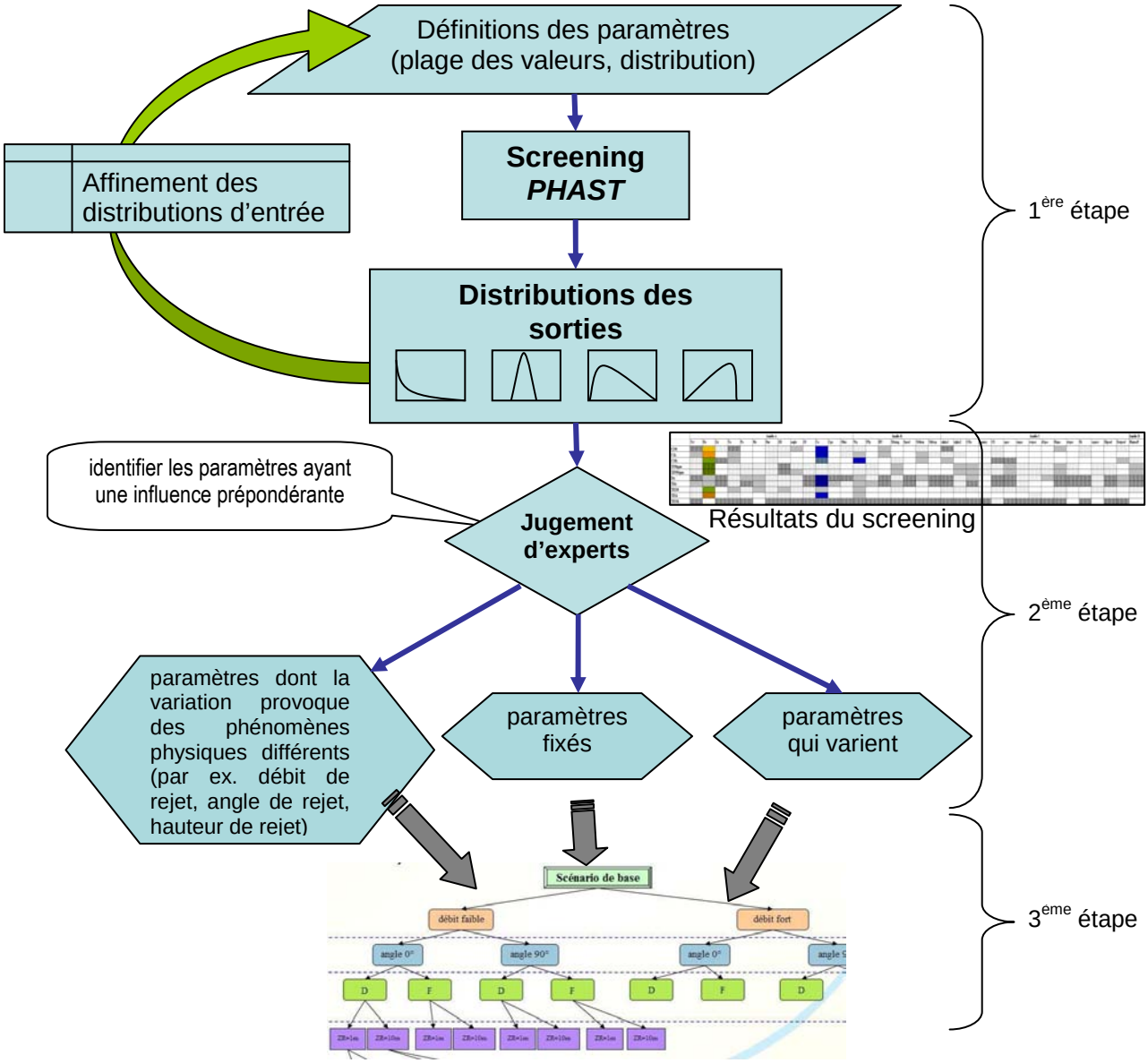


Figure II.3 Stratégie d'étude et de définition des scénarios

La première étape est une phase de type « screening ». Pour cela, on conduit une analyse de sensibilité pour un scénario de base en faisant varier tous les paramètres (les paramètres du terme source et les paramètres du modèle UDM). Un premier effort de recensement des plages raisonnables pour les paramètres est effectué en analysant les histogrammes des sorties. Si les distributions des valeurs des sorties ne sont pas réalistes[3], alors on modifie les plages de valeurs des paramètres d'entrée de façon à ce qu'elles le soient. Par exemple, avec des diamètres de brèche qui varient entre 0,001 m et 2 m, la valeur maximale du débit de rejet de NO est 35000 $kg{\cdot}s^{-1}$, ce qui est bien supérieur aux valeurs des débits habituellement observées. On a donc plafonné la valeur maximale du diamètre de fuite à 0,6 m, ce qui permet d'obtenir un débit maximum de l'ordre de 3000 $kg{\cdot}s^{-1}$, en accord avec les débits maximums obtenus dans les sites industriels.

Après avoir affiné les distributions des paramètres d'entrée, la deuxième étape permet de définir les paramètres qui seront fixés et ceux que l'on fera varier. Ce choix est effectué en examinant les indices de sensibilité du 1er ordre. A titre d'exemple, les résultats de l'analyse de sensibilité d'un scénario NO sont présentés dans le Tableau II.2. Les paramètres sont ordonnés suivant leur appartenance aux familles A, B, C et D, déjà définies dans le paragraphe I.2.5.5 (la définition et la signification des paramètres de la famille A se trouvent dans le Tableau I.7 et celles des paramètres des familles B, C, et D se trouvent dans le Tableau II.4).

Pour représenter les résultats d'indices de sensibilité du 1er ordre (S_i), nous avons défini une échelle de couleurs, allant du rouge (S_i égal à 1) au gris clair (S_i égal à 0), dans laquelle chaque nuance de couleur correspond à une valeur d'indice (Figure II.4).

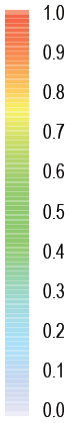
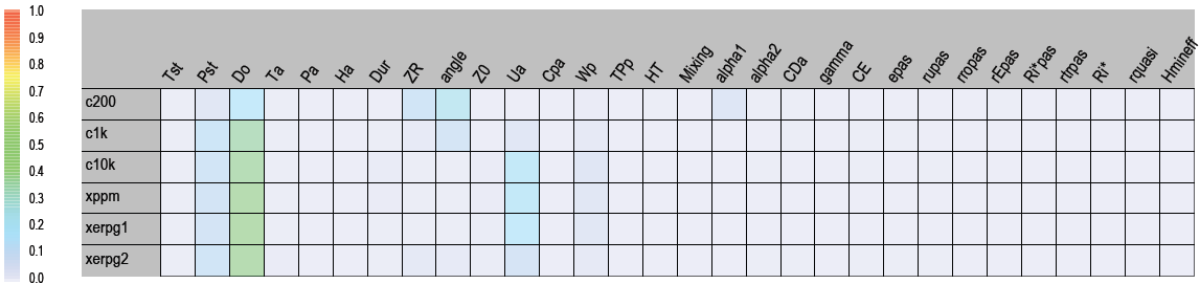


Figure II.4 Code couleur pour représenter les indices du 1er ordre (S_i)

Tableau II.2 Indices de sensibilité du 1er ordre pour le scénario de screening NO



[3] Ce jugement étant effectué avec l'aide experts chez les partenaires industriels du projet

Pour ce scénario, on trouve que la plupart des paramètres influents sont de la famille A : D_0, P_{st}, angle (de rejet), ZR et U_a. Les indices du 1er ordre des paramètres appartenant aux familles B, C, et D sont très petits (de l'ordre de 10^{-5} à 10^{-3}). Comme nous l'avons déjà dit précédemment, les influences des paramètres des familles B, C et D sont masquées par l'influence relativement importante des paramètres de la famille A. Nous fixons donc les paramètres de la famille A et nous étudions l'influence des autres paramètres.

La troisième étape consiste à établir l'arbre des scénarios permettant de discriminer des sous-scénarios correspondant à des cas de dispersion différents du point de vue phénoménologique. Pour cela, nous avons identifié quatre paramètres dits de « bifurcation » (débit de rejet, angle de rejet, couple classe de stabilité/vitesse du vent, hauteur de rejet) auxquels on attribue deux valeurs bien distinctes (1 et 2) qui servent à définir les branches de l'arbre du scénario. A titre d'exemple, nous présentons dans le Tableau II.3 les paramètres de « bifurcation » choisis pour les scénarios NO (le détail des calculs des débits figure dans le Chapitre III).

Tableau II.3 Paramètres de « bifurcation » pour les scénarios NO

Paramètres de « bifurcation »	**valeur 1**	**valeur 2**
Débit de rejet ($kg \cdot s^{-1}$)	Faible : 2,6	Fort : 411,6
Angle de rejet (°)	0	90
Classe de stabilité atmosphérique / Vitesse du vent ($m \cdot s^{-1}$)	(neutre) D / 5	(stable) F / 3
Hauteur de rejet (m)	Faible : 1	Élevée : 20

A partir de ces considérations, on déduit un arbre contenant les différents cas à simuler à partir d'un scénario de base (*cf.* Figure II.5). Pour les quatre paramètres de « bifurcation », le nombre total de scénarios étudiés pour chaque produit est égal au minimum à $2^4 = 16$. Nous avons de plus testé les couples A3 et D10 pour les rejets horizontaux et élevés car ils sont censés représenter des conditions de dispersion « défavorables » (c'est-à-dire conduisant à des distances de sécurité élevées) pour ce type de rejet.

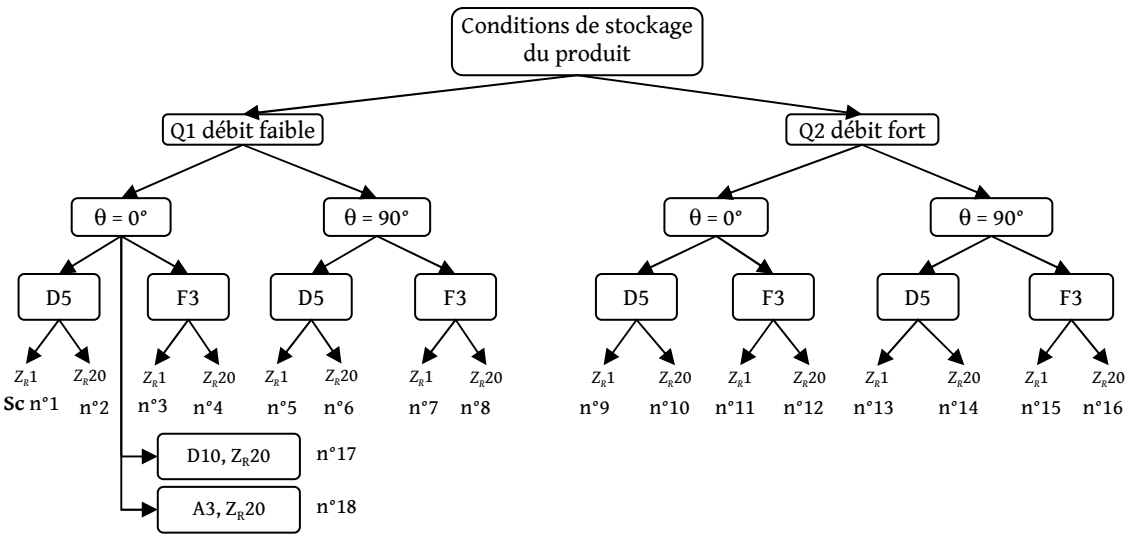


Figure II.5 Représentation arborescente des scénarios

II.3 Démarche expérimentale

Nous avons développé une méthodologie pour conduire l'analyse de sensibilité en reliant les logiciels *Phast* et *SimLab* (logiciel gratuit permettant d'effectuer des analyses de sensibilité et d'incertitude, développé par le Centre Commun de Recherche de la Commission Européenne d'Ispra).

La méthodologie comprend six étapes illustrées sur la Figure II.6 :

❶ Les descriptions de chaque paramètre (valeur min, valeur max et type de distribution (discrète, uniforme, normale)) sont définies par l'utilisateur, enregistrées dans le « Contrôleur PGA (*Phast Graphing Application*) » et envoyées vers *SimLab*.

❷ L'ensemble des N échantillons généré par *SimLab* selon une méthode d'échantillonnage aléatoire est enregistré dans le « Contrôleur PGA».

❸ et ❹ Pour chaque échantillon, les valeurs de sortie calculées par *Phast* sont transmises au « Contrôleur ».

❺ L'ensemble des valeurs de sortie est transféré à *SimLab*.

❻ *SimLab* calcule les indices de sensibilité (1er ordre, totaux,...) selon la méthode choisie (EFAST ou Sobol'). Toutefois, seule la méthode EFAST a été utilisée dans notre étude car le calcul des indices d'ordre supérieur à 2 aurait nécessité un temps de calcul plus important.

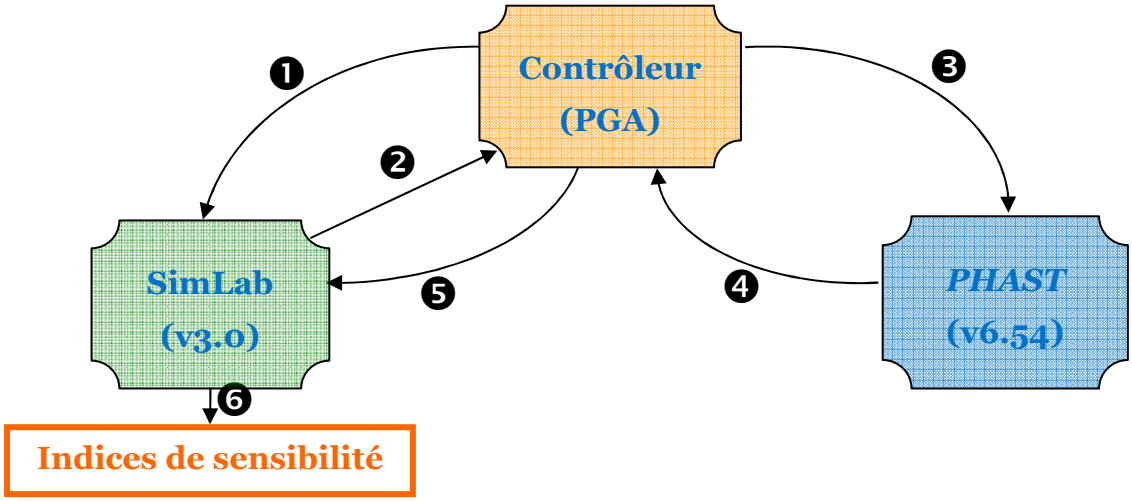


Figure II.6 Démarche expérimentale pour le calcul des indices de sensibilité

L'exécution automatisée de *Phast* (en « mode batch ») est rendue possible par des fonctionnalités spécifiques de la version 6.54 du logiciel. En début de thèse (avant que cette version soit disponible), nous avons effectué des expérimentations avec une version « tableur » de *Phast*, mieux adaptée aux exécutions en mode batch. Compte tenu de problèmes rencontrés avec cette version tableur (bugs logiciels, impossibilité d'accéder aux fonctionnalités de calcul de dose) et de notre souci d'assurer que nos

expérimentations représentent bien une utilisation industrielle de *Phast*, nous avons conduit la suite de la thèse avec le logiciel *Phast*.

La taille de chaque échantillon est de 20000 points (*cf.* § II.6.2) pour tous les scénarios à l'exception des scénarios de screening pour lesquels la taille de l'échantillon est de 30000 points car le nombre de paramètres est plus important (par exemple 36 paramètres pour le scénario de screening d'ammoniac). Le temps de calcul dépend du type de produit et du type de scénario. Par exemple, pour effectuer l'analyse de sensibilité d'un scénario de rejet horizontal du gaz NO avec une taille d'échantillon 20000 points, le temps de calcul est environ 24 heures en exécutant *Phast* sur plusieurs ordinateurs en parallèle. Le temps de calcul augmente lorsque le rejet est biphasique (par exemple pour l'ammoniac et le chlore).

II.4 Caractéristiques des paramètres étudiés

Comme on le verra dans la partie II.6, les résultats de l'analyse de sensibilité peuvent être relativement sensibles à la plage de valeurs et à la distribution choisie pour chaque paramètre d'entrée. Si pour certains paramètres, comme la température atmosphérique par exemple, ces données sont bien connues, pour les paramètres internes du modèle (la majorité des paramètres appartenant aux familles C et D) elles sont mal connues.

En ce qui concerne les paramètres de la famille A, les plages de valeurs étudiées, discutées dans le Chapitre III, sont choisies à partir de scénarios réalistes fournis par les partenaires industriels du projet. La plupart des paramètres varie de façon continue, sauf les paramètres de la famille B qui prennent des valeurs discrètes entières car ils permettent de choisir les sous-modèles de *Phast*. La distribution des paramètres des familles C et D n'est pas bien connue et donc, nous avons choisi la distribution uniforme entre les valeurs minimale et maximale. Pour définir les valeurs minimale et maximale de ces paramètres, nous avons procédé comme suit :

1. dans le logiciel *Phast*, des limites minimale et maximale sont définies pour la plupart des paramètres (*cf. Annexe 1*). Comme nous ne connaissions pas l'influence de ces paramètres, il a été décidé de les faire varier sur toute la plage de valeurs disponibles.

2. pour certains paramètres, la limite minimale et/ou maximale est infinie. Dans ce cas, nous avons choisi les bornes de la plage en nous basant sur des publications scientifiques ainsi que sur des discussions avec les partenaires du projet.

Les plages de valeurs des paramètres internes du modèle UDM étudiés sont présentées dans le Tableau II.4. Il faut noter que les paramètres S_{flux}, S_{pool}, M_{thrm}, M_{drop}, Ri_{pool} et Ent_{pool} n'interviennent que dans le cas d'un rejet biphasique ou liquide (ils ne concernent donc pas les scénarios de rejet de NO).

Tableau II.4 Plages de valeurs des paramètres du modèle UDM

Paramètres (unité) [*valeur par défaut dans Phast*]		***famille***	**Limites *Phast***	**Plage étudiée**
Flux solaire radiatif ($W \cdot m^{-2}$) [*500*]	S_{flux}	*A*	[0 – 1200]	[0 – 1200]
Profil vertical de la vitesse du vent (1-constante mesurée à 10 m, 2-loi puissance) [*2*]	W_p	*B*	1, 2	1, 2
Profil vertical de T et P (1-constant, 2-linéaire, 3- T log et P linéaire) [*3*]	TP_p		1, 2, 3	1, 2, 3
Transfert de chaleur entre le nuage et le sol (1-non, 2-oui) [*2*]	*HT*		1, 2	1, 2
Inversion de température (1-oui, 2-non) [*1*]	*Mixing*		1, 2	1, 2
Surface d'épandage du liquide (1-terre mouillée, 2-terre sèche, 3-béton, 4-béton étanche, 5-Eau profonde, 6- eau peu profonde, 7-rivière profonde, 8-rivière peu profonde, 9-définie par l'utilisateur) [*3*]	S_{pool}		1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9	1, 2, 3, 4
Modèle thermo. d'évaporation des gouttelettes (1-rainout et équilibre, 2- rainout et non-équilibre, -1-pas de rainout) [*2*]	M_{thrm}		1, 2, -1	1, 2
Méthode de résolution des équations nuage/gouttes (2-synchronisé, 6- rigoureux) [*2*]	M_{drop}		2, 6	2, 6
Coefficient d'entrainement « jet » [*0,17*]	α_1	*C*	[0,01 – 2]	[0,01 – 2]
Coefficient d'entrainement « cross-wind » [*0,35*]	α_2		[0,01 – 2]	[0,01 – 2]
Coefficient de trainée entre le nuage et l'air [*0*]	C_{Da}		[0 – 1]	[0 – 1]
Coefficient d'entrainement de coté du nuage dense [*0*]	γ		[0 – 2]	[0 – 2]
Coefficient d'étalement du nuage dense [*1,15*]	C_E		[0 – 2]	[0 – 2]
Coefficient d'entrainement passif dans le champ proche [*1*]	e_{pas}		[0 – ∞	[0 – 1]
Différence max. entre la vitesse nuage/air ambiant [*0,1*]	r_u^{pas}		[0 – ∞	[0 – 1]
Différence max. entre la densité nuage/air ambiant [*0,015*]	r_{ro}^{pas}		[0,01 – 2]	[0,01 – 2]
Fraction max. de l'entrainement non-passif [*0,3*]	r_E^{pas}		[0 – 1]	[0 – 1]
Nombre de Richardson maximum [*15*]	Ri_*^{pas}		[0 – ∞	[0 – 50]
Facteur de multiplication pour la phase passive [*2*]	r_{tr}^{pas}		-∞ – +∞	[1,01 – 2]
Nombre de Richardson pour le décollement du nuage [*-20*]	Ri		-∞ – 0]	[-100 – 0]
Paramètres de transition quasi-instantanée [*0,8*]	r_{quasi}		[0,1 – 10]	[0,1 – 10]
Nombre de Richardson pour la transition passive au dessus de la flaque [*0,015*]	Ri_{pool}		-∞ – +∞	[0 – 10]
Paramètre d'entrainement de l'évaporation de flaque [*1,5*]	Ent_{pool}		[0 – 2]	[0 – 2]
Hauteur effective minimale du nuage (m) [*0,02*]	H_{mineff}	*D*	[0,01 – 1]	[0,01 – 1]

Dans la suite, nous présentons les paramètres dont les plages de valeurs étudiées sont différentes de celles préconisées dans *Phast*.

II.4.1 Paramètres de la famille B

- W_p

Il existe deux profils de la vitesse du vent dans *Phast* : constant et loi puissance. Ce profil détermine la vitesse du vent à une hauteur donnée, par rapport à une valeur de référence fournie par l'utilisateur à une hauteur de référence (par défaut Z_{ref} est égale à 10 m). Le profil constant ne modifie pas la vitesse du vent en fonction de la hauteur et avec la loi puissance, la vitesse du vent augmente avec la hauteur. Pour la loi puissance, il existe une valeur limite de la hauteur (1 m par défaut) en dessous de laquelle la vitesse du vent est égale à la vitesse calculée à cette hauteur.

- TP_p

Les profils verticaux de la température et de la pression sont présentés dans la section I.2.4.3.

- *HT*

Ce paramètre permet de choisir une des trois options concernant le transfert de chaleur et/ou de vapeur d'eau entre la surface et le nuage : 1 – pas de transfert, 2 – transfert de chaleur seulement, 3 – transfert de chaleur et vapeur d'eau. Si la dispersion se fait sur l'eau, de la vapeur d'eau est ajoutée dans le nuage. Dans tous les scénarios étudiés, nous avons uniquement considéré de la dispersion sur terre. Le modèle de transfert de chaleur est détaillé dans le manuel de l'UDM.

- *Mixing*

Ce paramètre discret permet de prendre en compte ou non le phénomène d'inversion de température. La hauteur d'inversion dépend de la classe de stabilité (par exemple elle est égale à 100 m pour la classe F et à 800 m pour la classe D. Lorsque le phénomène d'inversion est activé le centre du nuage une fois arrivé à la hauteur d'inversion, y reste bloqué et ne peut donc pas la dépasser.

- S_{pool}

Ce paramètre permet de choisir la nature de la surface sur laquelle le liquide rejeté se répand. Le type de surface choisi conditionne les phénomènes d'étalement et d'évaporation de la flaque. Il existe une option qui permet à l'utilisateur de définir une surface autre que celles prévues par le programme. Pour cela, il doit introduire un certain nombre de propriétés liées à la surface telles que la diffusivité thermique, la rugosité de surface, la conductivité thermique.... La rugosité de surface sur laquelle le nuage se disperse, est définie dans les paramètres météorologiques. Dans tous les scénarios étudiés, nous avons considéré la dispersion du nuage sur terre seulement, donc les quatre premiers types de surface sont choisis.

- M_{thrm}

Ce paramètre permet de choisir le modèle thermodynamique permettant de simuler l'évaporation des gouttelettes dans le cas d'un rejet avec « rainout » : équilibre ou non-équilibre. Le modèle d'équilibre considère que la température des gouttelettes est égale à la température du nuage. Dans le cas du modèle non-équilibre, la température

des gouttelettes peut être différente de celle du nuage. Dans la plupart des cas, les gouttelettes sont refroidies à une température inférieure à celle du nuage, ce qui contribue à diminuer l'évaporation et donc à augmenter la quantité de « rainout ». Il existe une troisième option appelée « pas de rainout » qui correspond au cas où les gouttelettes restent dans le nuage. Pour étudier la dispersion du nuage en considérant le phénomène de formation de flaque et son évaporation, nous avons exclu la troisième option dans notre étude.

- $\underline{M_{drop}}$

Il existe deux méthodes pour résoudre le système d'équations différentielles qui régit le comportement de l'ensemble nuage et gouttelettes : synchronisée et rigoureuse. Avant la version 6.5 de *Phast*, seule la méthode synchronisée était disponible. Avec cette méthode, les équations différentielles des gouttes et du nuage sont intégrées séparément par la méthode de type Runge-Kutta-Merson. Dans les cas où le rejet est près du sol avec des tailles de gouttes importantes, cette méthode peut entraîner des imprécisions et des instabilités numériques. La deuxième méthode qualifiée de rigoureuse permet une intégration globale du système. La comparaison des deux méthodes est présentée dans le document de DNV intitulé « Droplet Size Theory document ».

II.4.2 Paramètres de la famille C

- e_{pas}

Ce paramètre intervient dans le calcul du terme d'entrainement passif dans le champ proche, $E_{pas}^{\ nf}$. DNV recommande de choisir soit 0 soit 1, où la valeur 0 correspond à la non prise en compte de ce phénomène et où la valeur 1 permet de modéliser complètement cet effet. Nous avons choisi de faire varier e_{pas} entre 0 et 1 de façon continue.

- Ri_{pool}

Ce paramètre est une valeur limite du nombre de Richardson. *Ri* est le rapport entre l'énergie potentielle gravitationnelle du nuage et son énergie cinétique. Lorsque le nombre de Richardson relatif au nuage issu de l'évaporation de la flaque est inférieur à cette valeur limite, ce terme source secondaire n'est pas considéré comme ayant un comportement de gaz dense. Il sera donc modélisé comme un gaz passif ou un jet. Dans le cas contraire, c'est-à-dire quand Ri est supérieur à Ri_{pool}, le nuage est assimilé à un gaz lourd. La valeur par défaut de Ri_{pool} dans *Phast*, égale à 0,015, n'est pas justifiée.

- $r_{tr}^{\ pas}$

Ce paramètre conditionne la longueur de la zone de transition qui s'étend de la distance $x_{tr}^{\ pas}$ à la distance $x_{tr}^{\ pas} \cdot r_{tr}^{\ pas}$. La valeur par défaut est égale à 2, ce qui permet d'avoir une phase de transition relativement étendue et donc d'éviter des discontinuités de comportement du nuage entre le champ proche et le champ lointain. Ce paramètre n'a pas de limite dans *Phast*. Nous avons attribué à ce paramètre des valeurs comprises entre 1,01 et 2 (la valeur 1 est à exclure car elle revient à annuler la phase de transition qui est la particularité du modèle UDM), ce qui revient à réduire la phase de transition et donc à avancer le passage dans la phase purement passive. Le choix de valeurs de ce paramètre supérieures à la valeur par défaut reviendrait probablement à repousser l'endroit dans l'espace où le calcul est "pur passif" alors même que les critères de transition sont satisfaits depuis longtemps.

II.5 Sorties étudiées

Les sorties du modèle UDM sont exprimées en termes de concentrations et de distances. Les sorties relatives aux scénarios NO, NH_3, Cl_2 et HF sont calculées à la hauteur moyenne d'une personne (Z = 1,5 m), alors que pour les scénarios N_2 et n-hexane, les sorties sont calculées à Z = 0 m car pour un rejet près du sol (ZR = 1 m), les concentrations correspondant aux seuils cibles ne sont jamais atteintes pour une hauteur de 1,5 m.

II.5.1 Sorties « concentrations »

Pour les produits NO, NH_3, Cl_2 et HF, nous avons choisi trois types de sortie :

- *C200* : Concentration à 200 m dans la direction du vent (X), ppm
- *C1k* : Concentration à 1 km dans la direction du vent (X), ppm
- *C10k* : Concentration à 10 km dans la direction du vent (X), ppm

Pour l'azote (N_2) et le n-hexane, nous avons conservé les mêmes symboles des sorties « concentrations » que pour NO, NH_3, Cl_2 et HF pour faciliter le traitement informatique des résultats mais les distances auxquelles sont calculées ces concentrations se situent toutes dans le champ proche. En effet, les distances correspondant aux différents seuils de concentration sont près de la source.

Pour N_2 :

- *C200* : Concentration à 20 m dans la direction du vent (X), ppm
- *C1k* : Concentration à 50 m dans la direction du vent (X), ppm
- *C10k* : Concentration à 100 m dans la direction du vent (X), ppm

Pour n-hexane :

- *C200* : Concentration à 100 m dans la direction du vent (X), ppm
- *C1k* : Concentration à 200 m dans la direction du vent (X), ppm
- *C10k* : Concentration à 500 m dans la direction du vent (X), ppm

II.5.2 Sorties « distances »

Pour les produits NO, NH_3, Cl_2, N_2 et HF, les sorties « distances » X correspondant à une concentration donnée sont définies dans le Tableau II.5.

Tableau II.5 Définition des sorties « distances »

Symbole de la sortie	NO	NH_3	Cl_2	N_2	HF
	Concentration en ppm				
Xppm	100	354 (SEI)	19 (SEI)	$1{,}43 \cdot 10^5$ (SEI)	100 (SEI)
Xerpg1	80 (SEI)	3400 (SEL1%)	110 (SEL1%)	$4{,}52 \cdot 10^5$ (SEL1%)	189 (SEL1%)
Xerpg2	600 (SEL1%)	3633 (SEL5%)	127 (SEL5%)	$5 \cdot 10^5$(SEL5%)	283 (SEL5%)

SEI : Seuil des effets irréversibles, SEL1% et SEL5% : Seuil des effets létaux 1% et 5%

Pour N_2, les seuils d'effets toxiques égaux à 14,3 %, 45,2 % et 50 % mol en azote correspondent respectivement à 18 %, 11,5 % et 10,5 % mol d'oxygène dans l'air. On considère que la respiration d'un air contenant moins de 18 % en O2 devient dangereuse. En dessous de 11 % mol en O_2, il est possible de perdre connaissance (EIGA, 2006).

Pour l'hexane, nous avons également pris en compte des sorties spécifiques à l'inflammabilité du produit :

- $X_{lflfrac}$: distance correspond à 50 % de L.I.E. ($5{,}25 \cdot 10^3$ ppm), m
- X_{lfl} : distance correspond à L.I.E. ($10{,}5 \cdot 10^3$ ppm), m
- X_{ufl} : distance correspond à la L.S.E. ($76{,}8 \cdot 10^3$ ppm), m

Il faut noter que quelquefois la distance correspondant à une concentration donnée est toujours inférieure à la valeur cible (*cf.* Figure II.7). Dans ce cas la valeur de la distance *X* est prise égale 0.

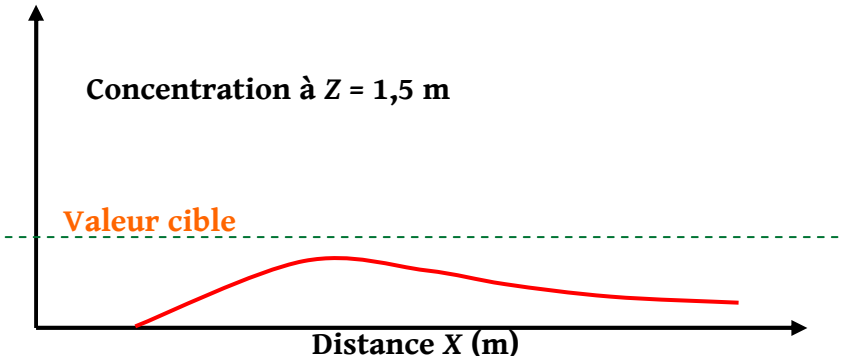


Figure II.7 Cas où la sortie « distance » correspondant à la valeur cible n'est jamais atteinte

En outre, le logiciel *Phast* applique une valeur limite sur la distance *X*, qui est fixée par défaut à 50000 m. Cette limitation permet d'éviter que les calculs conduisent à un temps d'exécution trop important. Dans les cas où la sortie « distance » est supérieure à 50000 m, alors la valeur de la sortie est bornée à 50000 m (effet de « cutoff », *cf.* Figure II.8).

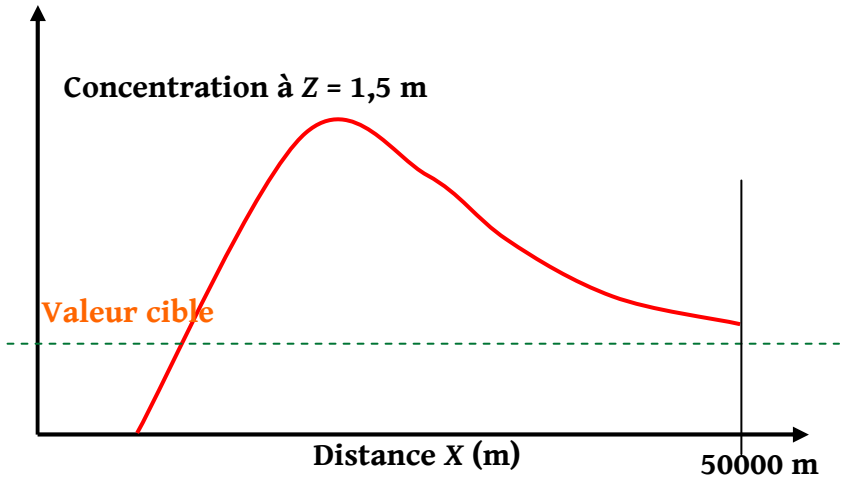


Figure II.8 Cas où la sortie « distance » est supérieure à la valeur limite 50000 m

II.6 Études préliminaires

Nous avons effectué les trois études préliminaires suivantes :

- Comparaison des indices de sensibilité calculés par l'outil que nous avons développé (*PGA*, qui relie les logiciels *SimLab* et *Phast*) et ceux estimés par des exécutions sur la formulation analytique du TNO, pour un scénario de rejet d'un gaz passif. Cette comparaison a été effectuée dans le but de valider notre banc de test expérimental et notre outillage statistique.
- Évolution des indices de sensibilité en fonction de la taille de l'échantillon, dans le but de déterminer la taille optimale de l'échantillon.
- Répétabilité du calcul des indices de sensibilité afin de vérifier la reproductibilité des résultats avec notre outil de calcul.

II.6.1 Dispersion passive de l'air : comparaison des indices de sensibilité

Le cas de base utilisé pour les études préliminaires de sensibilité globale correspond à celui décrit dans UDM Verification Manual (2006), pour lequel une étude de sensibilité globale de type « OAT » a été menée. Il s'agit de la dispersion atmosphérique passive d'un rejet continu et isotherme d'air dont la vitesse de rejet est égale à la vitesse du vent. *Phast* contient dans sa base de données un produit appelé « air » dont on peut simuler la dispersion dans l'air ambiant.

Les principales hypothèses du cas de base sont récapitulées ci-après :

- Dispersion passive isotherme et continue sur une durée de 360 000 s (100 heures) d'air à 50 m de hauteur, avec un débit de 0,05 $kg \cdot s^{-1}$, une température de 298 K et la vitesse de rejet 5 $m \cdot s^{-1}$.
- Vitesse du vent de 5 $m \cdot s^{-1}$ mesurée à 10 m de hauteur. La vitesse du vent est supposée constante en fonction de la hauteur.
- Profils linéaire de pression et logarithmique de température, en fonction de l'altitude.
- Classe de stabilité D (neutre) et le flux solaire de 500 $W \cdot m^{-2}$.
- Masse molaire de l'air de 28,966 $g \cdot mol^{-1}$.
- Dispersion sur le sol sec (à température de 298 K) de rugosité de surface égale à 0,1 m (terrain agricole, par exemple plaine avec arbres dispersés).
- « Averaging time » (temps d'intégration ou intervalle de lissage) de 600 s. Le « Core Averaging time » sera pris égal à l'« Averaging time ».

Pour ce cas de base, le profil de concentration analytique (donné par les équations BWM/TNO, Duijm et al., 1996) et le profil calculé par *Phast* ont été déterminés.

Le profil de dispersion passive selon le modèle gaussien, de type « panache », est donné par :

$$C(x,y,z)=\frac{Q}{2\pi U_a \sigma_y \sigma_z} e^{\frac{-y^2}{2\sigma_y^2}}\left(e^{\frac{-(z-Z_R)^2}{2\sigma_z^2}}+e^{\frac{-(z+Z_R)^2}{2\sigma_z^2}}\right)$$

où, Q = le débit de rejet (kg·s^{-1}),

U_a = la vitesse du vent selon la direction x (m·s^{-1}),

Z_R = la hauteur de rejet (m),

σ_y et σ_z = les coefficients de dispersion selon les directions y et z (écart type), donnés par les formules TNO suivantes (Duijm et al., 1996) :

$$\sigma_y(x)=\left(\frac{T_{av}}{600}\right)^{0,2} ax^b$$

$$\sigma_z(x)=(10Z0)^{0,53x^{-0,22}} cx^d$$

Ici, T_{av} est l'averaging time (s), $C_{Z_0}=(10z_0)^{0,53x^{-0,22}}$ le facteur de correction dû à la rugosité Z_0 de la surface et les paramètres a, b, c, d sont donnés en fonction de la classe de stabilité dans le Tableau II.6 :

Tableau II.6 Classes de stabilité et paramètres associés (Duijm et al., 1996)

Classe de stabilité	a (m)	b (-)	c (m)	d (-)
A	0,527	0,865	0,28	0,90
B	0,371	0,866	0,23	0,85
C	0,209	0,896	0,22	0,80
D	0,128	0,905	0,20	0,76
E	0,098	0,902	0,15	0,73
F	0,065	0,902	0,12	0,67

Les concentrations en « air » au centre du nuage et au sol en fonction de la distance X selon la direction du vent sont présentées dans la Figure II.9.

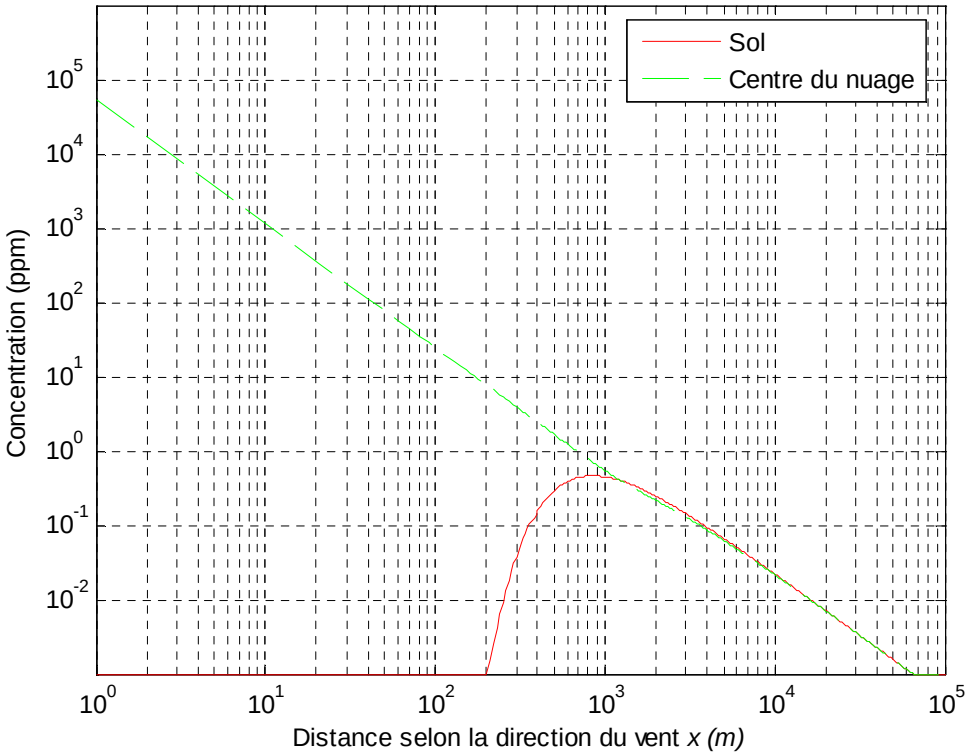


Figure II.9 Concentration (ppm) en fonction de la direction X (m) pour le rejet passif

Concernant l'analyse de sensibilité globale, les divers paramètres d'entrée et leurs distributions, ainsi que les diverses sorties (réponses) du modèle sont récapitulés dans le Tableau II.7 et le Tableau II.8.

Tableau II.7 Paramètres étudiés pour le scénario passif

Paramètres étudiés	Loi de distribution	Plage étudiée	Famille
Hauteur de rejet, Z_0 (m)	Uniforme continue	[*0 – 700*]	A
Rugosité de surface, *ZR* (m)	Uniforme continue	[*0,0001 – 3*]	A
Vitesse du vent, U_a (m·s^{-1})	Uniforme continue	[*1 – 11*]	A
Débit de rejet, *Q* (kg·s^{-1})	Uniforme continue	[*0,005 – 50*]	A
Averaging time, T_{av} (s)	Uniforme continue	[*18,75 – 3600*]	D

Tableau II.8 Sorties considérées pour le scénario passif

Sorties	Description
C200	Concentration à X = 200 m
C1k	Concentration à X = 1000 m
C10k	Concentration à X = 10000 m
Xppm	Distance maximale correspondant à la concentration 1 ppm

Pour ces quatre sorties, nous avons comparé les indices sensibilité du 1er ordre et totaux estimés à l'aide de deux bancs de test expérimentaux dont les caractéristiques sont mentionnées dans le Tableau II.9.

Tableau II.9 Caractéristiques des 2 bancs de test mis en œuvre

	Modèle	Outil statistique	Banc de test
« TNO-Matlab »	formulation analytique du TNO	Simlab – méthode EFAST	Matlab
« *Phast*-PGA »	*Phast*	Simlab – méthode EFAST	PGA

On constate un assez bon accord entre les deux bancs de test, à titre d'exemple la comparaison des résultats pour deux sorties est représentée sur la Figure II.10 et la Figure II.11. Ce travail de comparaison nous a permis une première validation de l'outillage informatique et statistique que nous avons développé.

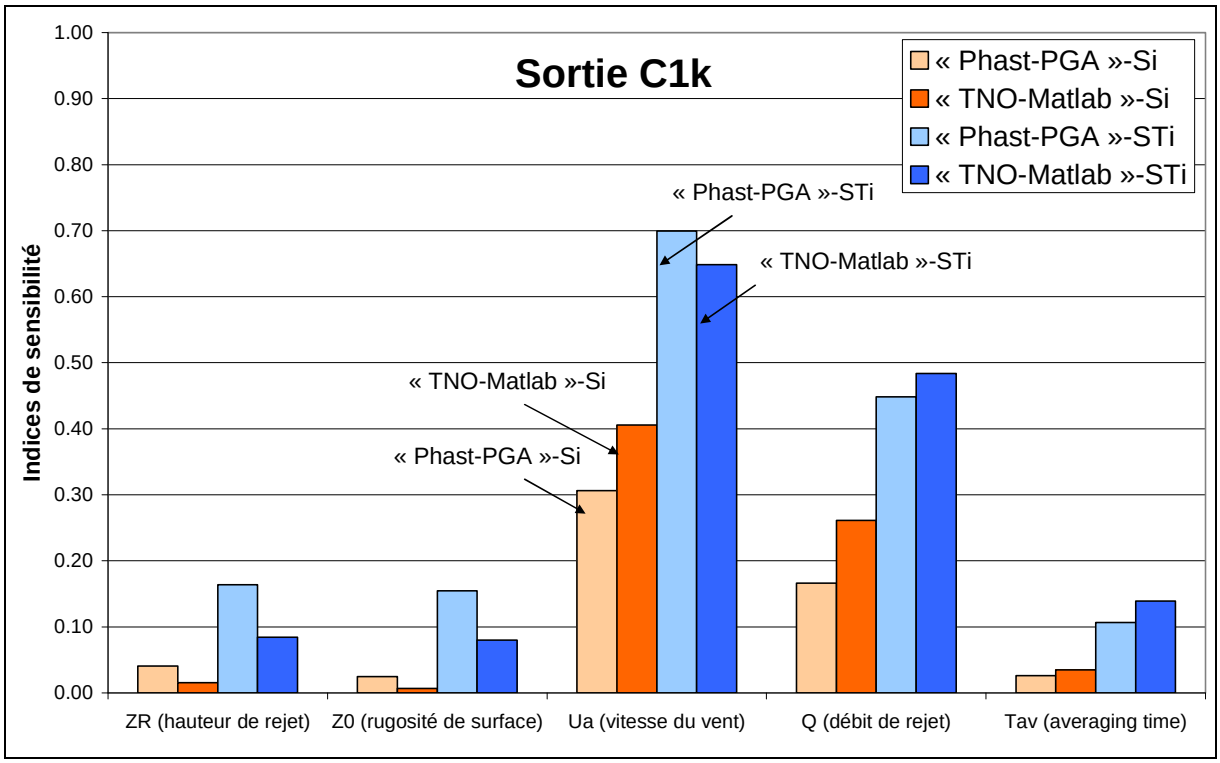


Figure II.10 Comparaison des indices de sensibilité issus des deux bancs de test pour la sortie concentration à 1 km

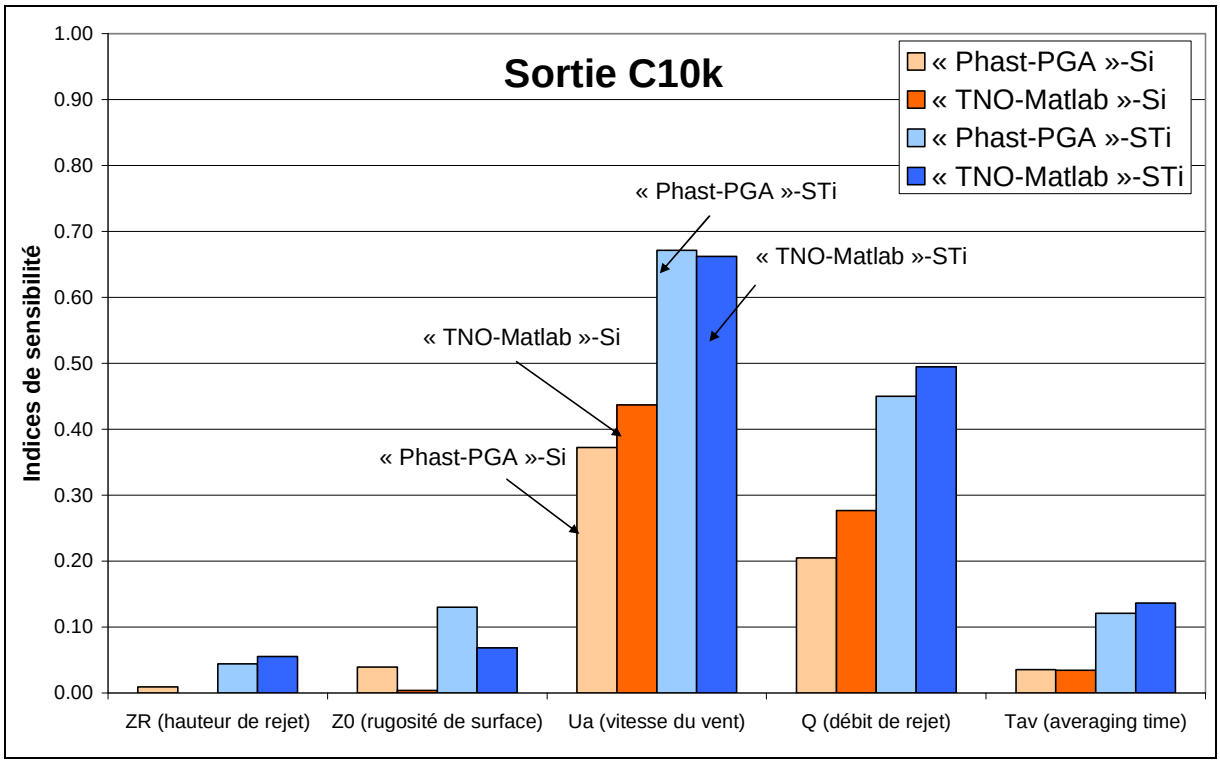


Figure II.11 Comparaison des indices de sensibilité issus des deux bancs de test pour la sortie concentration à 10 km

II.6.2 Choix de la taille de l'échantillon et répétabilité des calculs

Le choix de la taille de l'échantillon résulte d'un compromis entre la précision des indices et un temps de calcul raisonnable.

Pour le rejet horizontal de NO, nous avons effectué une analyse de sensibilité en faisant varier la taille de l'échantillon, en testant des tailles de 10000, 20000, 30000 et 50000. Cette étude a été réalisée en faisant varier simultanément 18 paramètres. Les indices de sensibilité de 1er ordre pour la sortie distance *X* correspondant à 600 ppm (seuil des effets létaux à 1%), sont présentés sur la Figure II.12. Les éléments présents dans la légende sont les paramètres pour lesquels nous avons estimé les indices de sensibilité. Les trois points pour chaque paramètre pour la taille de l'échantillon 20000 représentent les résultats de l'étude de répétabilité (dans laquelle nous avons effectué l'analyse d'indices trois fois pour le même scénario, avec des échantillonnages de même taille mais correspondant à des tirages aléatoires différents).

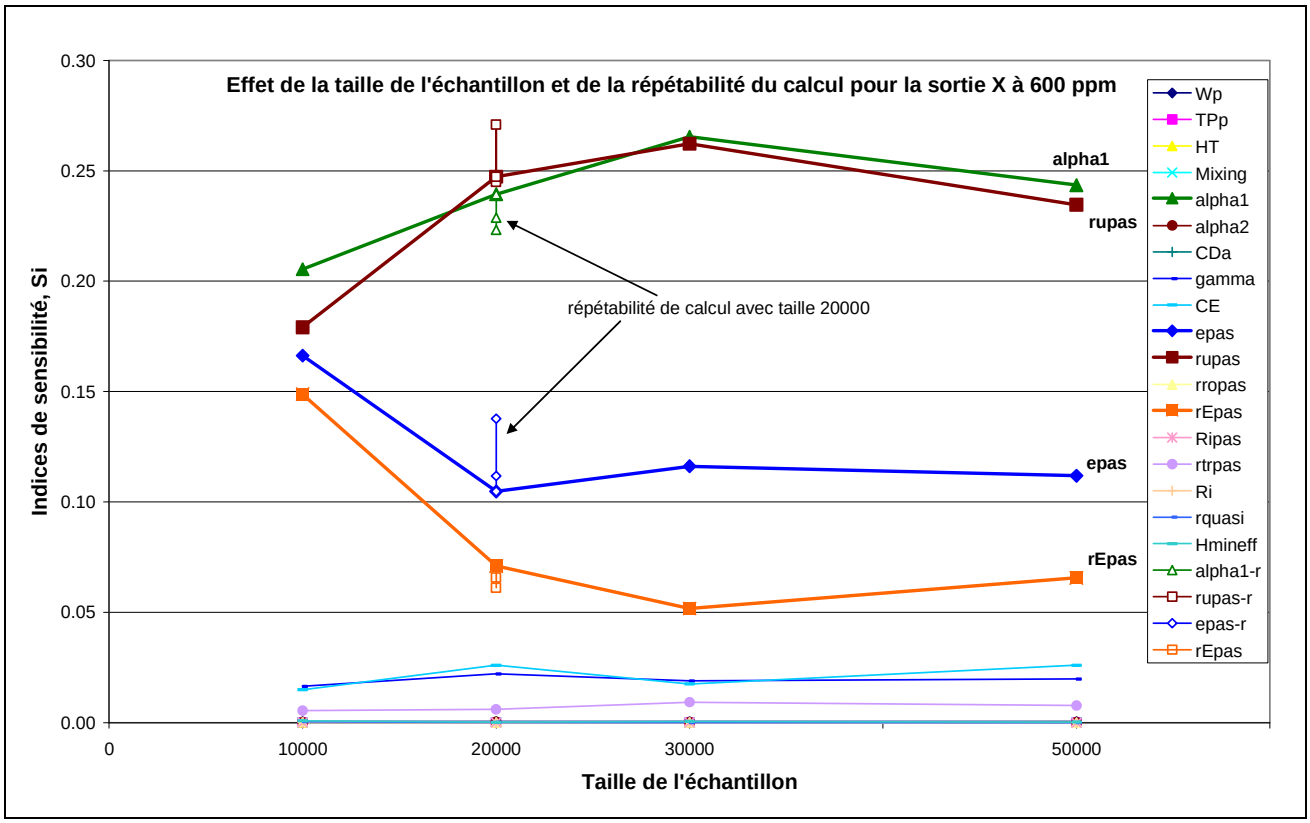


Figure II.12 Effet de la taille de l'échantillon et de la répétabilité du calcul pour la sortie distance X correspondant à une concentration de 600 ppm

En ce qui concerne la taille de l'échantillon, on note que les indices de sensibilité diffèrent considérablement pour les échantillonnages à 10000 et 20000 points, mais qu'ils semblent atteindre une relative stabilité à partir d'une taille d'échantillon de 20000 points. On observe de plus que l'ordre des paramètres influents reste le même pour les différentes tailles d'échantillon : $(alpha1, r_u^{pas}) > e_{pas} > r_E^{pas}$.

Il est important de noter que la rapidité de convergence des indices de sensibilité (et donc la taille d'échantillon nécessaire pour obtenir un niveau de confiance acceptable) dépend à la fois du nombre de paramètres étudiés (de façon générale, estimer l'influence d'un plus grand nombre d'indices nécessite un plus grand nombre d'exécutions), et du degré de non-linéarité du modèle analysé (plus la surface de réponse est complexe, plus il faut un échantillonnage de grande taille pour apprécier cette complexité).

Les tailles d'échantillon que nous avons retenues par la suite (10000 exécutions pour le terme source (environ 10 paramètres), 20000 pour UDM (environ 25 paramètres), et 30000 pour la phase de screening (environ 35 paramètres), ont été choisies comme un bon compromis entre les conclusions de cette étude (et donc le niveau de confiance qu'on peut accorder aux indices) et la durée des calculs.

Concernant la répétabilité des calculs, nous avons effectué trois fois l'estimation des indices pour la taille d'échantillon retenue pour les scénarios UDM, c'est-à-dire à 20000 exécutions. Le but de cette expérimentation est d'évaluer le niveau d'incertitude dans l'estimation des indices de sensibilité. D'après le Tableau II.10, ce niveau d'incertitude est au maximum égal à 0,03.

Tableau II.10 Répétabilité des indices de sensibilité du 1er ordre des 4 paramètres influents

Paramètre	Indice S_i		
	Min	Max	Etendue
alpha1	0.22	0.24	0.02
r_u^{pas}	0.24	0.27	0.03
e_{pas}	0.10	0.14	0.03
r_E^{pas}	0.06	0.07	0.01

Notons toutefois que la taille d'échantillon appropriée est fonction du degré de non-linéarité du modèle, et que cette non-linéarité peut varier en fonction de détails du scénario. Il est donc important de garder à l'esprit que les indices que nous présenterons par la suite sont des estimations, et non des valeurs analytiques.

II.7 Conclusion

Nous avons tout d'abord sélectionné un panel de produits générant des scénarios de rejets représentatifs de situations accidentelles décrites dans les études de danger. Pour chaque produit, nous avons déterminé un ensemble de sous-scénarios caractérisés par des conditions de rejet différentes (combinaisons de débit, hauteur et angle de rejet, différentes conditions météorologiques). Cette « granularité fine » dans les scénarios étudiés est définie dans le but d'interpréter les sensibilités des paramètres sans la confusion qui résulterait du mélange de phénomènes physiques très différents.

Nous avons mis au point une démarche expérimentale automatique d'analyse de sensibilité en couplant les logiciels *Phast* et SimLab (outil PGA) et comprenant :

- une étape de « screening », ou criblage, permettant de comparer l'influence de l'ensemble des paramètres. Cette phase permet de comparer l'influence de paramètres qui concernent des grandeurs physiques (famille A) à celle des paramètres « internes » (familles B, C et D, dont l'influence est généralement moins bien connue des utilisateurs, régissant le choix de sous-modèles internes et leur paramétrage, ou concernant la résolution numérique).
- une étape d'analyse de l'influence globale des paramètres appartenant aux familles B, C et D. Ces paramètres sont étudiés sur une plage large (souvent les bornes minimales et maximales permises par le logiciel de modélisation) afin d'explorer des zones de l'espace d'entrée de l'outil qui sont méconnues des utilisateurs avertis (puisqu'en utilisation normale, les valeurs par défaut de ces paramètres sont implicitement sélectionnées).

Nous avons également mené des études préliminaires dans le but de valider notre outil de calcul (PGA) et de définir le choix « optimal » de la taille de l'échantillon (nombre d'exécutions par scénario). Nous avons enfin étudié la répétabilité du calcul des indices de sensibilité.

Chapitre III. RESULTATS ET DISCUSSIONS

III.1 Introduction

Nous présentons dans ce chapitre un extrait des résultats des différents types d'analyses de sensibilité (terme source, screening et modèle de dispersion de *Phast* (UDM)) qui nous ont paru les plus significatifs. L'ensemble des résultats figure dans l'*Annexe 2*. Le Tableau III.1 propose une synthèse de tous les scénarios étudiés (se référer au Chapitre II pour la définition des paramètres fixés). De plus, dans le cadre de ce projet de recherche, un logiciel spécifique « PGA » (*Phast* Graphing Application), permettant de parcourir les résultats de façon interactive, a été développé.

La discussion des résultats de l'analyse de sensibilité est effectuée par paramètre, par type de scénario et par produit. Nous présentons également une analyse de l'impact de petites variations des paramètres UDM autour de leur valeur par défaut, ce qui correspond davantage à une utilisation habituelle de *Phast*.

La dernière partie de ce chapitre porte sur deux études complémentaires : l'une relative à la prise en compte des paramètres corrélés dans l'analyse de sensibilité et l'autre relative à l'exploitation de notre banc de test expérimental dans une optique d'assurance de la qualité du logiciel *Phast*.

Tableau III.1 Récapitulatif de l'ensemble des scénarios étudiés

n°	Paramètres fixés	Familles de paramètres étudiés	NO	NH_3	Cl_2	HF	N_2	C_6H_{14}
Termes sources « Leak » et « Line rupture »								
TS		A, B, C	√	√	√	√		
Terme source « Leak » et UDM								
Screening	stabilité = D	A, B, C, D	√	√	√	√		
UDM								
1	Q1 θ0 D5 ZR1	B, C, D	√	√	√	√	√	
2	Q1 θ0 D5 ZR20		√	√	√	√	√	
3	Q1 θ0 F3 ZR1		√	√	√	√	√	
4	Q1 θ0 F3 ZR20		√	√	√	√	√	
5	Q1 θ90 D5 ZR1		√	√	√	√	√	
6	Q1 θ90 D5 ZR20		√	√	√	√		
7	Q1 θ90 F3 ZR1		√	√	√	√	√	
8	Q1 θ90 F3 ZR20		√	√	√	√		
9	Q2 θ0 D5 ZR1		√	√	√		√	√
10	Q2 θ0 D5 ZR20		√	√	√		√	√
11	Q2 θ0 F3 ZR1		√	√	√		√	√
12	Q2 θ0 F3 ZR20		√	√	√		√	√
13	Q2 θ90 D5 ZR1		√	√	√		√	√
14	Q2 θ90 D5 ZR20		√	√	√			
15	Q2 θ90 F3 ZR1		√	√	√		√	√
16	Q2 θ90 F3 ZR20		√	√	√			
17	Q1 θ0 D10 ZR20		√	√	√	√	√	√
18	Q1 θ0 A3 ZR20		√	√	√	√	√	√
Variation ± 10% des paramètres (Cas 1 : Terme source « Leak » + UDM, Cas 2 et 3 : UDM)								
Local 1	stabilité = D	A, B, C, D		√				
Local 2	Q1 θ0 F3 ZR1	B, C, D		√				
Local 3	Q1 θ0 F3 ZR1	C, D		√				

III.2 Représentations des résultats

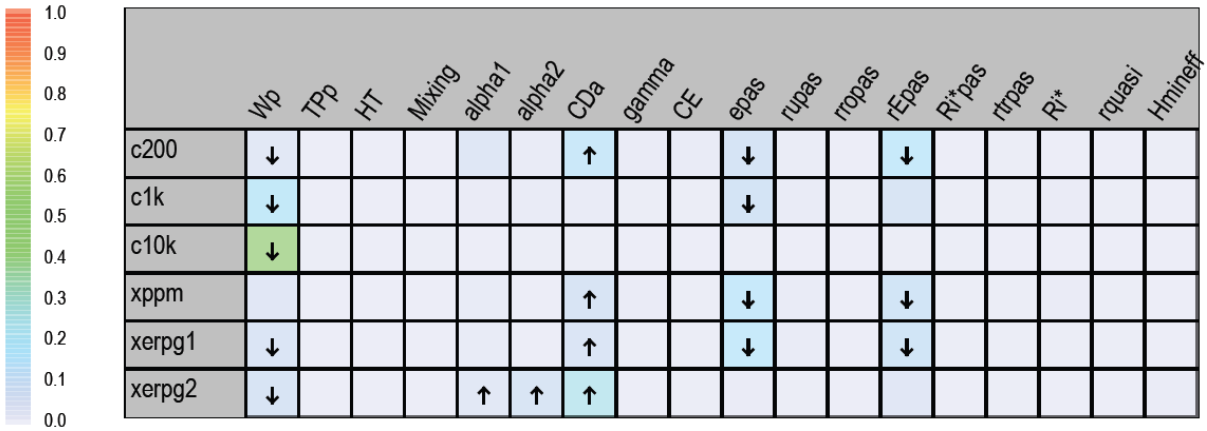
Dans ce paragraphe, nous montrons les différentes formes de visualisation des résultats issus des analyses de sensibilité et des analyses de la variabilité des sorties de *Phast*. Pour chaque scénario simulé, les résultats obtenus sont représentés sous différentes formes que nous allons passer en revue.

III.2.1 Tableau des indices de sensibilité du 1er ordre

Ce tableau reprend les indices du premier ordre (S_i), c'est-à-dire l'influence des variations du paramètre considéré sur la variance totale de la sortie étudiée, quand ce paramètre varie seul (*cf.* § I.3.4). L'échelle pour chaque case de la matrice varie de 0 à 1 (Figure II.4). Les différents paramètres étudiés figurent sur l'axe horizontal, alors que les sorties sont présentées verticalement.

Ce tableau répond à la question : *pour un produit donné et dans des conditions de rejet précises, quels paramètres ont la plus grande influence sur la variabilité de la sortie considérée ?*

Tableau III.2 Indices de sensibilité du 1er ordre du scénario 5 de NO



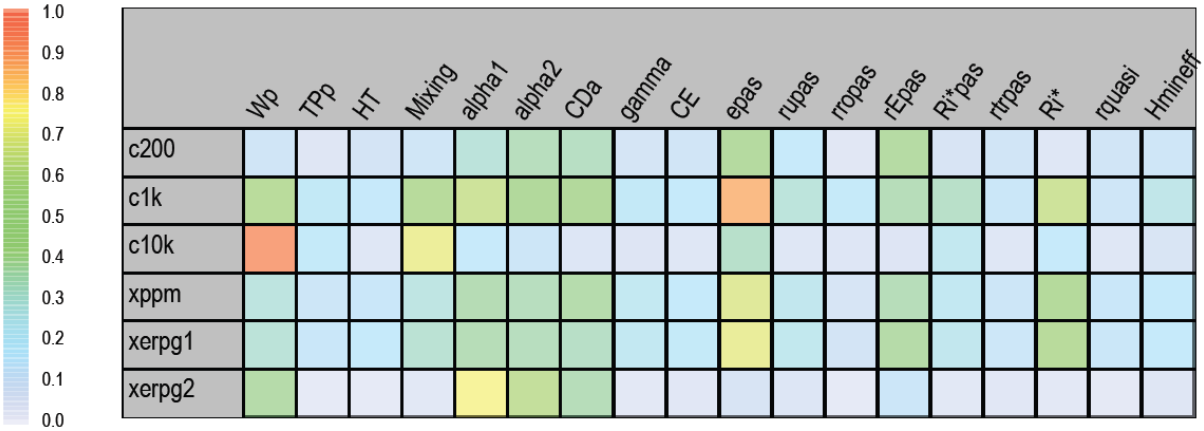
A titre d'exemple, nous montrons le tableau relatif au scénario 5 de NO (Tableau III.2). Dans ce tableau, une flèche dirigée vers le haut indique que le coefficient de corrélation linéaire (*cf.* § III.2.4) est supérieur à 0,2, ce qui indique que lorsque le paramètre croît, la sortie croît également. Une flèche dirigée vers le bas indique que le coefficient de corrélation linéaire est inférieur à -0,2, ce qui indique que lorsque le paramètre augmente, la valeur de la sortie baisse. L'absence de flèche indique que la corrélation entre le paramètre et la sortie n'est pas significative.

III.2.2 Tableau des indices totaux

Ce tableau reprend les indices totaux (S_{Ti}), c'est-à-dire l'influence totale des variations du paramètre considéré sur la sortie étudiée, y compris ses interactions avec les autres paramètres (*cf.* § I.3.4). Les indices totaux (S_{Ti}) sont représentés à l'aide de la même échelle couleur que les indices du 1er ordre.

A titre d'exemple, nous montrons le tableau relatif à un scénario NO (Tableau III.3). Ce tableau répond à la question : *quels paramètres exercent la plus grande influence sur la sortie considérée (prise en compte de l'effet intrinsèque du paramètre ainsi que des interactions avec les autres paramètres) ?*

Tableau III.3 Indices de sensibilité totaux du scénario 5 de NO

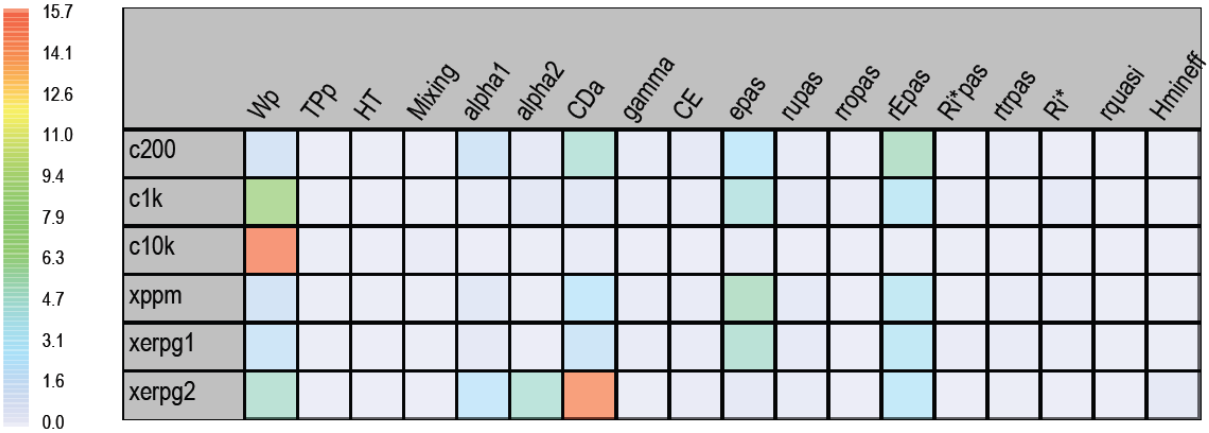


Si une case du tableau correspond à une valeur nulle de S_{Ti} (gris clair), alors ce paramètre n'est pas influent sur la sortie considérée, ni seul, ni en interaction avec les autres paramètres. Ce tableau répond également à la question : *pour un scénario donné, quel paramètre n'a aucune influence sur la sortie du modèle ?*

III.2.3 Tableau d'influence

Le tableau d'influence contient les valeurs des *CVSi* qui représentent le produit de l'indice de sensibilité du premier ordre par le coefficient de variation de la sortie considérée (*cf.* § I.3.6) (par exemple, pour le scénario 5 de NO dans le Tableau III.4).

Tableau III.4 Influence mesurée par la grandeur CVSi (scénario 5 de NO)



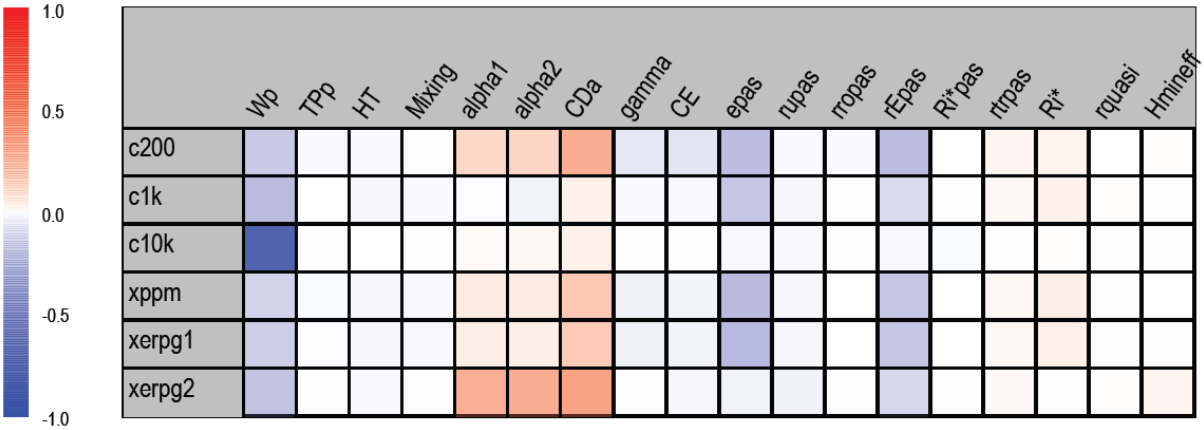
L'échelle sur ce tableau varie entre 0 et la plus grande valeur de la grandeur *CVSi* (il existe toujours une case rouge dans ces tableaux correspondant au plus grand produit du *CV* par l'indice de sensibilité de premier ordre).

Ce tableau répond à la question *: quels paramètres contribuent le plus à une variation « physiquement » mesurable d'une sortie ?*

III.2.4 Corrélation

Ce tableau de corrélation représente les coefficients de corrélation linéaire (au sens de Pearson) entre le paramètre et la sortie considérée. L'échelle sur ces graphiques varie de -1 (indiquant une relation exactement linéaire inverse entre le paramètre et la sortie) et 1 (indiquant une relation exactement linéaire entre le paramètre et la sortie).

Tableau III.5 Degré de corrélation linéaire entre les paramètres et les sorties du scénario 5 de NO



Ces corrélations sont également intégrées dans le tableau des S_i avec les flèches, comme expliqué dans la section précédente.

III.2.5 Histogrammes des sorties

Pour chaque sortie du modèle, l'histogramme représente la distribution des valeurs de cette sortie (leur fréquence d'apparition dans chaque plage de la sortie). A titre d'exemple, l'histogramme de la sortie *C200* (concentration à 200 m) relative au scénario 1 de NO est représenté sur la Figure III.1.

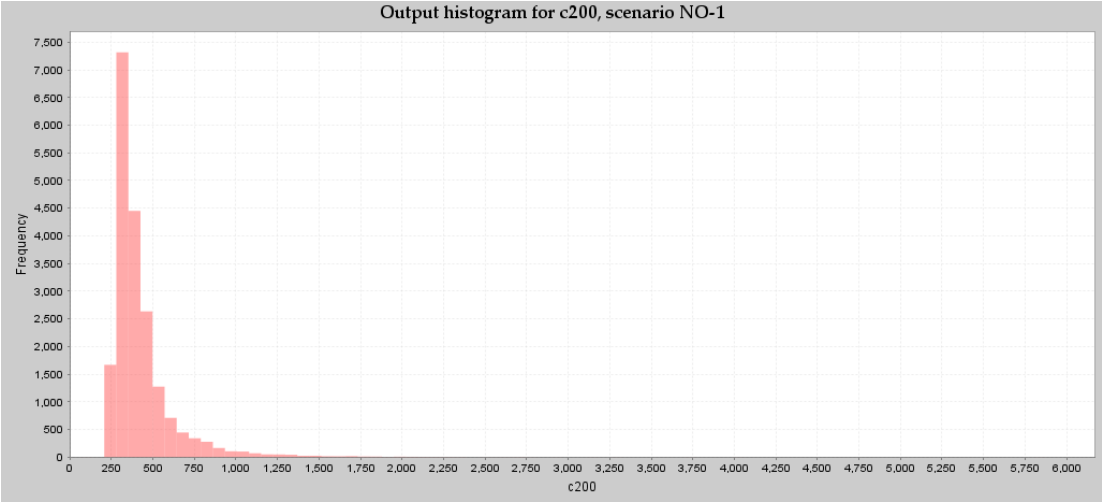


Figure III.1 Exemple d'histogramme de la sortie C200

III.2.6 Tableau relatif à la variabilité des sorties

Le tableau relatif à la variabilité des sorties comprend, pour un scénario donné, les valeurs minimales et maximales des sorties, la moyenne, la médiane et le coefficient de variation de la distribution (*cf.* Tableau III.6). La colonne « Errors » du tableau indique le nombre d'exécutions de *Phast* qui se sont soldées par un échec qui correspond à une erreur interne de *Phast* (problème de convergence numérique, par exemple). Les sorties correspondant aux erreurs sont ramenées à 0.

Tableau III.6 Exemple des données relatives à la variabilité des sorties du modèle (scénario 5 de NO)

Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
c200	0.00	552.56	156.10	147.39	33.16	0	18	0
c1k	3.80	271.86	15.89	15.44	45.54	0	0	0
c10k	0.27	6.59	0.49	0.53	32.43	0	0	0
xppm	0.00	1565.75	279.47	268.57	33.78	0	218	0
xerpg1	0.00	1659.03	329.35	318.03	29.89	0	155	0
xerpg2	0.00	802.33	38.53	40.46	63.74	0	1100	0

La colonne « =0 » représente le nombre d'exécutions de *Phast* pour lesquelles la valeur de sortie est égale à 0 (*cf.* § II.5.2). La colonne « =50k » représente le nombre d'exécutions de *Phast* pour lesquelles la sortie correspondant à la distance *X* est limitée à 50000 m (*cf.* § II.5.2). Ces deux dernières colonnes aident à interpréter les valeurs de *CV*.

III.2.7 Scénarios pour lesquels un paramètre est sensible

Pour chaque paramètre, il est possible de représenter la liste des scénarios et des sorties pour lesquelles ce paramètre est influent (*cf.* Figure III.2). Cette figure est construite en listant les 60 plus grandes valeurs de Si pour le paramètre considéré (tous

scénarios et toutes sorties confondues[4]) ; ces valeurs de S_i sont ensuite regroupées par scénario. Les scénarios sont ordonnés par ordre décroissant de la plus grande valeur de S_i.

En complément de cette présentation, il est possible, à l'aide de l'outil PGA évoqué ci-dessus, de filtrer ces résultats par produit et par sortie. Par exemple, la Figure III.3 montre l'influence de α_1 pour l'ensemble des scénarios de NO, NH_3 et Cl_2 sur la sortie C1k (concentration à 1 km).

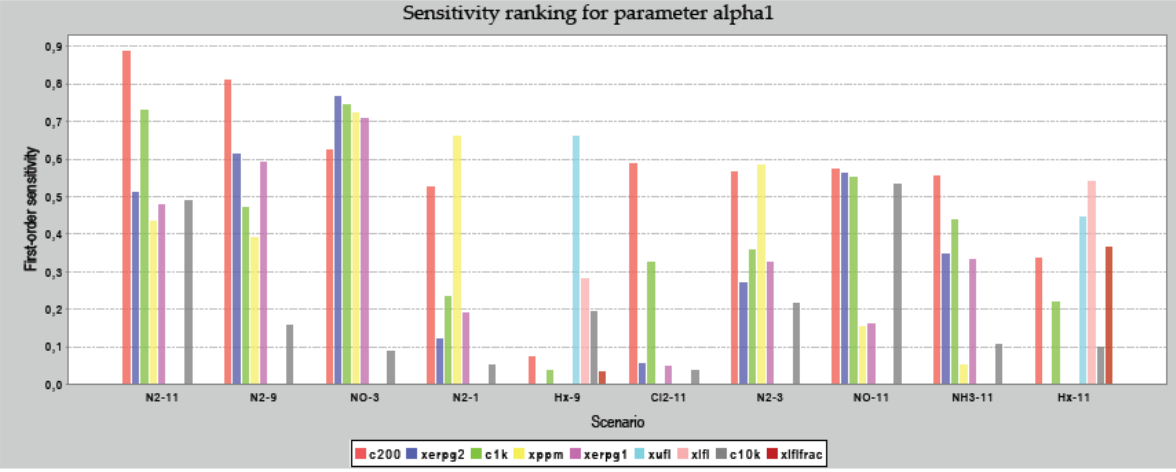


Figure III.2 Classement des scénarios selon le degré de sensibilité au paramètre alpha1

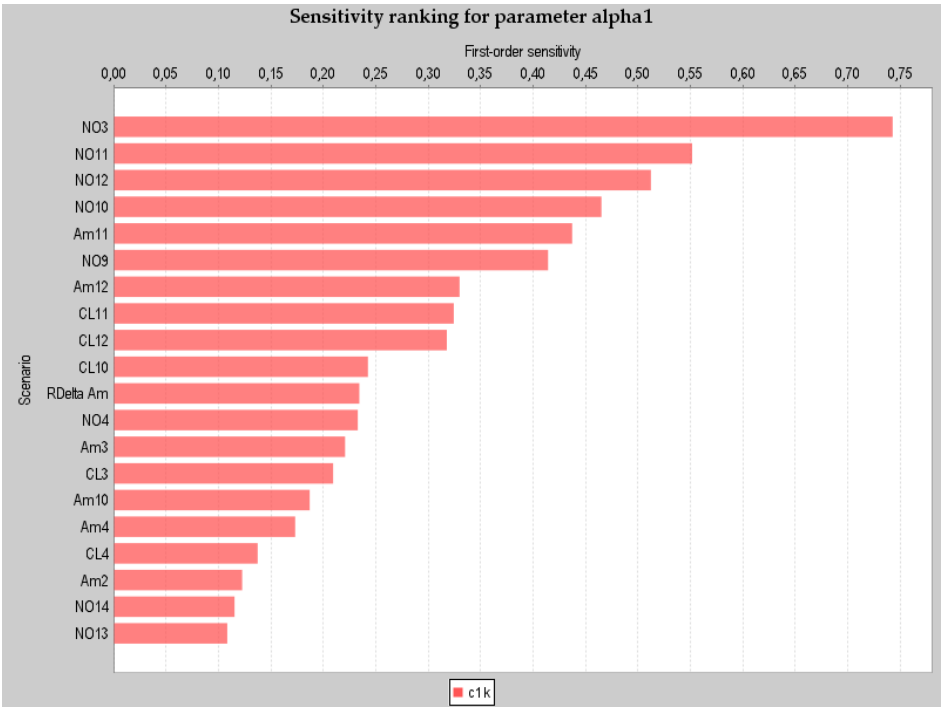


Figure III.3 Classement des scénarios selon le degré de sensibilité au paramètre alpha1 pour la sortie C1k

[4] L'ensemble des indices de sensibilité (de premier ordre et totaux), pour l'ensemble des expérimentations conduites, est stocké dans une base de données. Ceci nous permet d'extraire des informations en effectuant des filtrages par produit, par scénario et par sortie.

III.2.8 « Scatter plot » d'une sortie

La Figure III.4 représente un exemple de « scatter plot » pour le scénario 1 de NH_3 pour la sortie *C200* et le paramètre *alpha1*. Cette figure représente l'ensemble de 20000 points pour la sortie C200 en fonction du paramètre *alpha1*. Ce type de représentation permet de visualiser l'influence de la variabilité d'un paramètre sur la variabilité d'une sortie. Cette information peut se retrouver en regardant le tableau de corrélation (Tableau III.5), mais ce tableau ne relève pas distribution de sorties en fonction d'un paramètre.

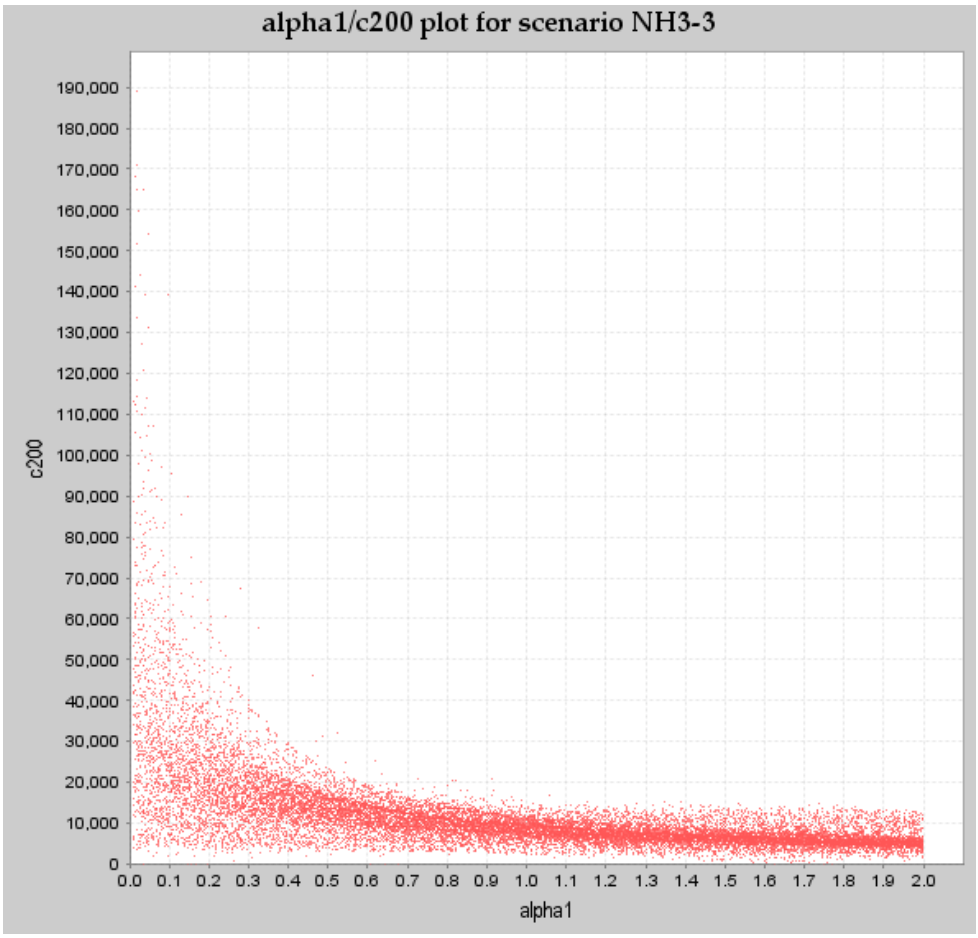


Figure III.4 Exemple de « scatter plot » pour le scénario 1 de NH_3 entre la sortie C200 et le paramètre alpha1

Par exemple, dans la Figure III.4, on note que C200 varie fortement pour les faibles valeurs du paramètre *alpha1* et par contre cette variation est faible pour les valeurs élevées de *alpha1*. En raison du grand nombre de « scatter plots » qui peuvent être créés pour l'ensemble des scénarios étudiés, l'accès à ces résultats est disponible uniquement avec l'outil PGA.

III.3 Analyse des termes sources

Nous avons étudié deux modèles de terme source : « Leak » et « Line rupture » (*cf.* § I.2.1.3). Dans ce paragraphe, nous présentons uniquement les résultats de l'analyse de sensibilité du terme source « Leak » et « Line rupture » pour le scénario NO. Chaque terme source a fait l'objet de 10000 exécutions[5]. L'ensemble des résultats de l'analyse de sensibilité des termes sources relatifs aux différents produits figure dans l'*Annexe 2*.

Les sorties étudiées pour les exécutions concernant les termes sources sont représentées dans le Tableau III.7.

Tableau III.7 Sorties étudiées pour les termes sources « Leak » et « Line rupture »

Sortie	symbole	unité
Débit de rejet	Q	$kg \cdot s^{-1}$
Vitesse de rejet	V_f	$m \cdot s^{-1}$
Température de rejet	T_f	K

III.3.1 Terme source « Leak »

Nous présentons les résultats du terme source « Leak » pour le scénario NO. La liste des paramètres étudiés se trouve dans le Tableau III.8. Dans ce cas, le NO est stocké à l'état de gaz sous pression à une température donnée.

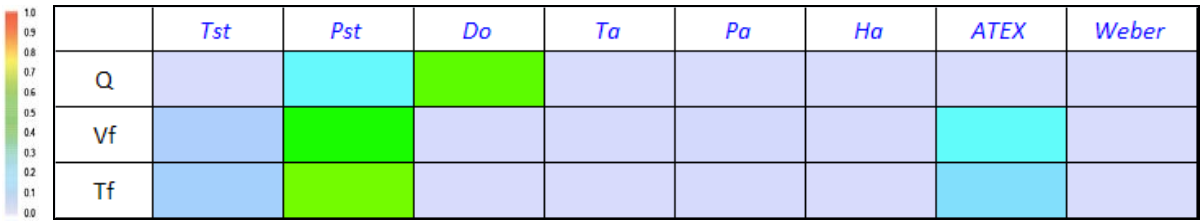
Tableau III.8 Paramètres étudiés pour le terme source « Leak » du scénario NO

Paramètres étudiés (unité)	symbole	min	max	distribution
Pression de stockage (relative) (Pa)	P_{st}	10^4	$4{,}9 \cdot 10^6$	uniforme, continue
Température de stockage (K)	T_{st}	248,15	323,15	uniforme, continue
Diamètre d'orifice (m)	D_o	0,015	0,6	uniforme, continue
Pression atmosphérique (Pa)	P_a	10^5	$1{,}2 \cdot 10^5$	uniforme, continue
Température atmosphérique (K)	T_a	223,15	323,15	uniforme, continue
Humidité atmosphérique (-)	H_a	0,3	1	uniforme, continue
Modèle d'expansion atmosphérique (1-isentropique, 2-conservation d'énergie)	*ATEX*	1, 2		uniforme, discrète
Nombre de Weber critique (-)	*Weber*	1	50	uniforme, continue

[5] Cette taille d'échantillon plus faible, en comparaison avec les 20000 exécutions pour les scénarios UDM, s'explique par le nombre réduit de paramètres concernés. En effet, la taille d'échantillon nécessaire est fonction du nombre de paramètres pour lesquels l'on souhaite estimer les indices de sensibilité, ainsi que du degré de non-linéarité du modèle.

Les indices de sensibilité du 1er ordre sont représentés dans le Tableau III.9.

Tableau III.9 Indices de sensibilité du 1er ordre (terme source « Leak », NO)



En observant le Tableau III.9, on constate que les paramètres influents sur les sorties dans l'ordre décroissant sont :

- Débit de rejet (Q) : paramètres D_0 puis P_{st}
- Vitesse finale de rejet (V_f) : paramètres P_{st} puis $ATEX$
- Température finale de rejet (T_f) : P_{st}, $ATEX$ puis T_{st}

Tableau III.10 Indices de sensibilité totaux (terme source « Leak », scénario NO)



Le Tableau III.10 représente les indices de sensibilité totaux. On constate que pour la sortie Q, les deux paramètres, D_0 et P_{st} sont influents, à la fois seuls et en interaction entre eux. Les autres paramètres n'ont pas d'influence sur le débit de rejet. Cette observation s'explique facilement compte tenu des plages de variation considérées. Par contre, pour la sortie V_f, outre l'influence directe des paramètres P_{st}, T_{st} et $ATEX$, on constate une influence de tous les paramètres en interaction entre eux.

Tableau III.11 Variabilité des sorties du modèle (terme source « Leak », NO)

Sorties	Min	Max	Médiane	Moyenne	CV (%)
Q (kg·s^{-1})	0	3141	271	515	117
V_f (m·s^{-1})	39	641	514	514	14
T_f (K)	121	308	145	151	20

Comme le montre le Tableau III.11, le coefficient de variation (CV) de la sortie Q est beaucoup plus important que celui des sorties V_f et T_f. L'allure de l'histogramme de chaque sortie (*cf.* par exemple l'histogramme de la sortie Q, dans la Figure III.5) révèle la

distribution des valeurs. Le pourcentage cumulatif des valeurs de sortie est représenté par une courbe bleue.

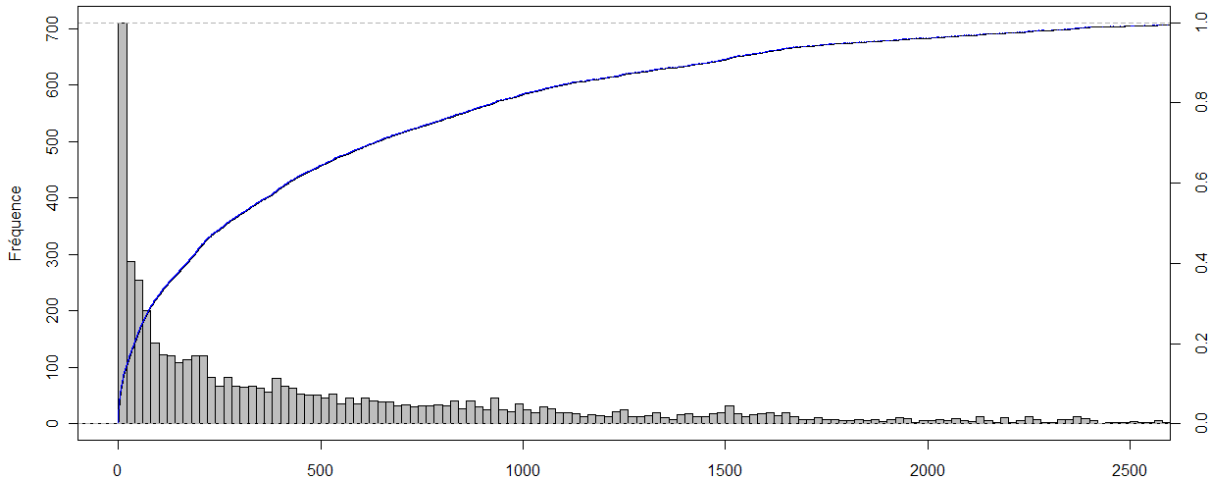


Figure III.5 Histogramme des débits de rejet, Q pour le scénario NO « Leak »

Les valeurs sont étendues sur une plage très large [0,0004 $kg{\cdot}s^{-1}$ – 3141 $kg{\cdot}s^{-1}$], mais 80% de ces valeurs sont inférieures à 1000 $kg{\cdot}s^{-1}$.

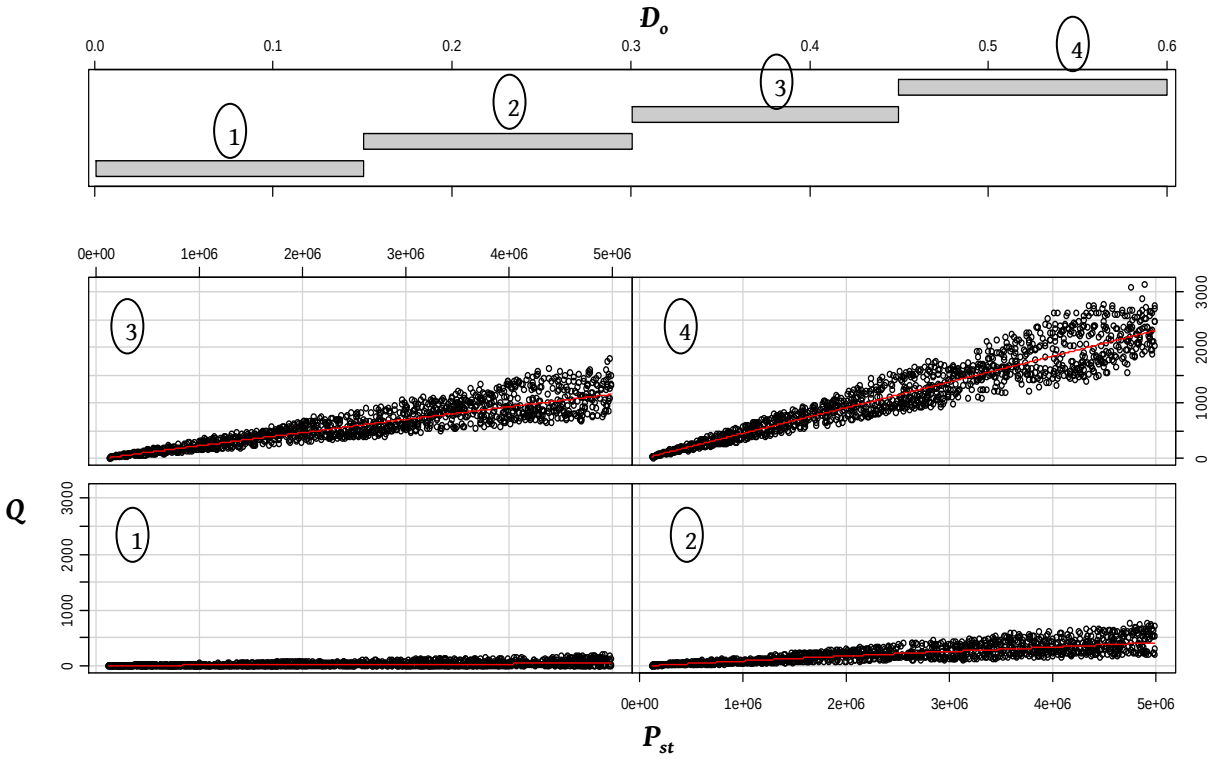


Figure III.6 Variation de Q en fonction des paramètres P_{st} et D_O

La Figure III.6 représente la variation de débit de rejet, Q ($kg{\cdot}s^{-1}$) en fonction de deux paramètres : la pression de stockage, P_{st} (Pa) et le diamètre d'orifice, D_O (m). Ce type de figure, appelé « coplot », permet d'analyser l'influence conjointe de deux paramètres sur une sortie. Chaque graphe représente la relation entre P_{st} et Q pour une plage des

valeurs de D_0 donnée. Le premier graphe, en bas à gauche, représente la variation de Q pour l'ensemble des valeurs de P_{st} et pour les valeurs de D_0 comprises entre 0,001 m et 0,15 m, alors que le graphe en haut à droite concerne des valeurs de D_0 comprises entre 0,45 et 0,6. La variation de Q par rapport à P_{st} est peu importante pour les faibles valeurs de D_0, et devient importante pour les valeurs élevées de D_0.

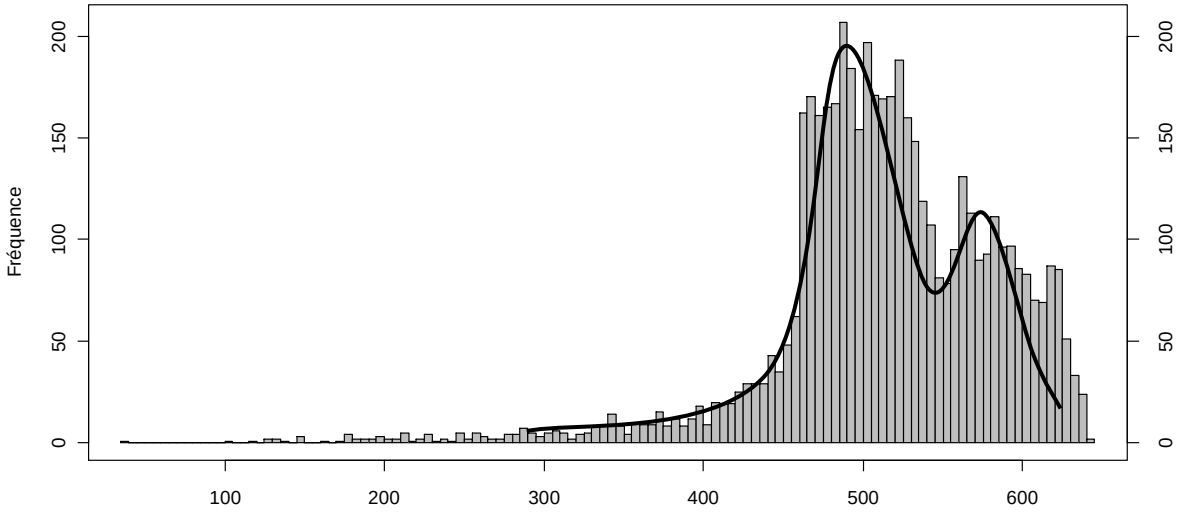


Figure III.7 Histogramme des vitesses finales de rejet, Vf pour le scénario 1 de NO

La Figure III.7 représente l'histogramme des vitesses finales de rejet pour le scénario 1 de NO. La forme de cet histogramme est représentée par une courbe bimodale avec un premier sommet à 500 $m{\cdot}s^{-1}$ et le deuxième sommet à environ 580 $m{\cdot}s^{-1}$.

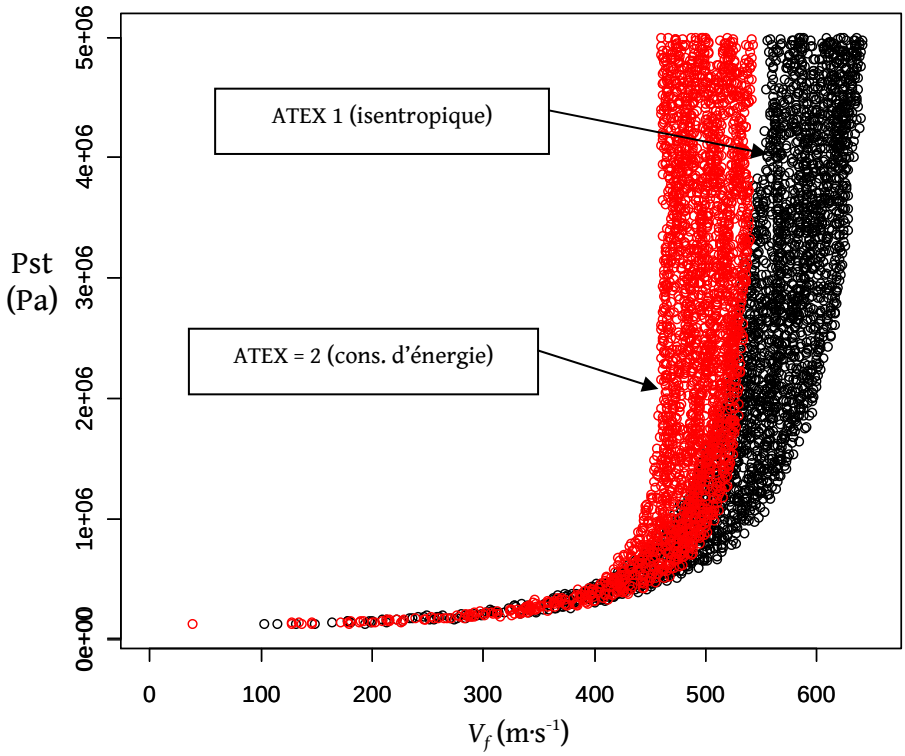


*Figure III.8 Valeurs de la vitesse finale de rejet V_f en fonction de P_{st} pour les deux modèles d'*ATEX

La Figure III.8 montre que la nature bimodale de l'histogramme de V_f est imputable aux deux modèles d'*ATEX*. Pour le modèle *ATEX*1, la plupart des valeurs de V_f est comprise entre 500 m·s^{-1} et 642 m·s^{-1} et pour le modèle *ATEX*2, la plupart des valeurs de V_f est comprise entre 400 m·s^{-1} et 540 m·s^{-1}. On constate que la valeur de V_f calculée par le modèle *ATEX*2 (basé sur la conservation de la quantité de mouvement) est inférieure à celle calculée par le modèle *ATEX*1 (basé sur la conservation d'entropie).

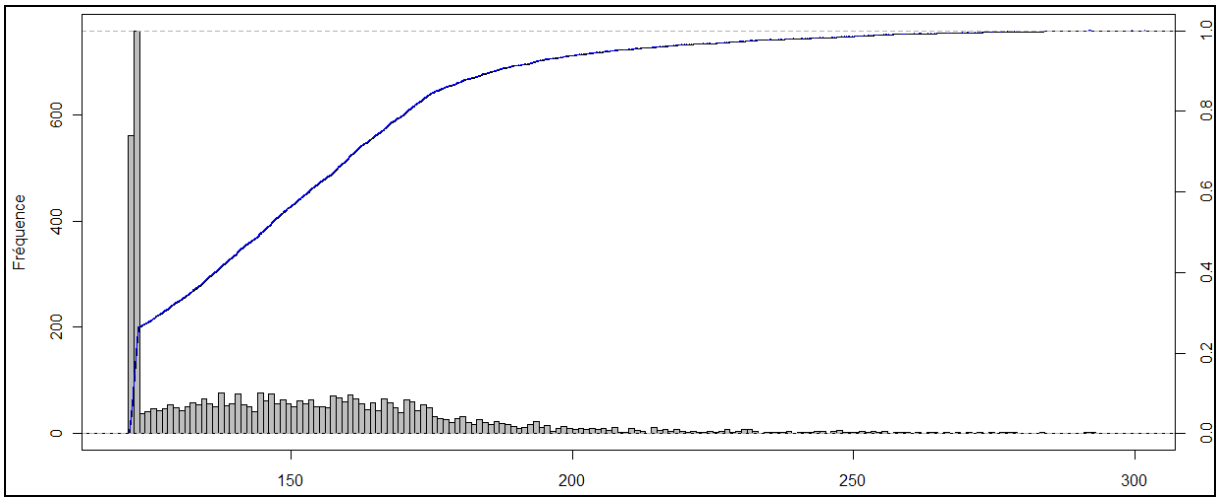


Figure III.9 Histogramme des températures finales de rejet, T_f pour le scénario 1 de NO

L'histogramme des T_f de la Figure III.9 montre que les valeurs sont réparties sur deux plages, ce qui est dû à la variation du modèle d'*ATEX*. Les valeurs très faibles de T_f correspondent au modèle d'*ATEX* isentropique.

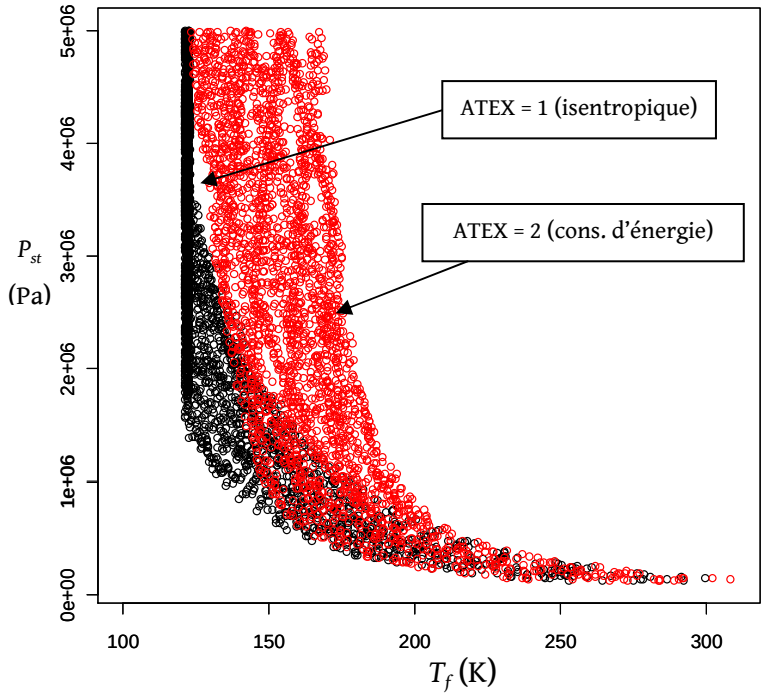


*Figure III.10 Variation de T_f en fonction de P_{st} pour les deux modèles d'*ATEX

La Figure III.10 montre que la température finale de rejet calculée par le modèle *ATEX*1 est inférieure à celle calculée par le modèle *ATEX*2. Dans la notice technique de *Phast* [*ATEX* Theory Manual, p.5], il est précisé que le modèle *ATEX*1 prédit une température finale de rejet trop basse. Par conséquent, la V_f calculée par *ATEX*1 est supérieure à celle calculée par le modèle *ATEX*2.

La Figure III.11 représente la variation de T_f en fonction de P_{st} et T_{st}. On note que la variation de T_f est importante quand les valeurs de P_{st} sont petites.

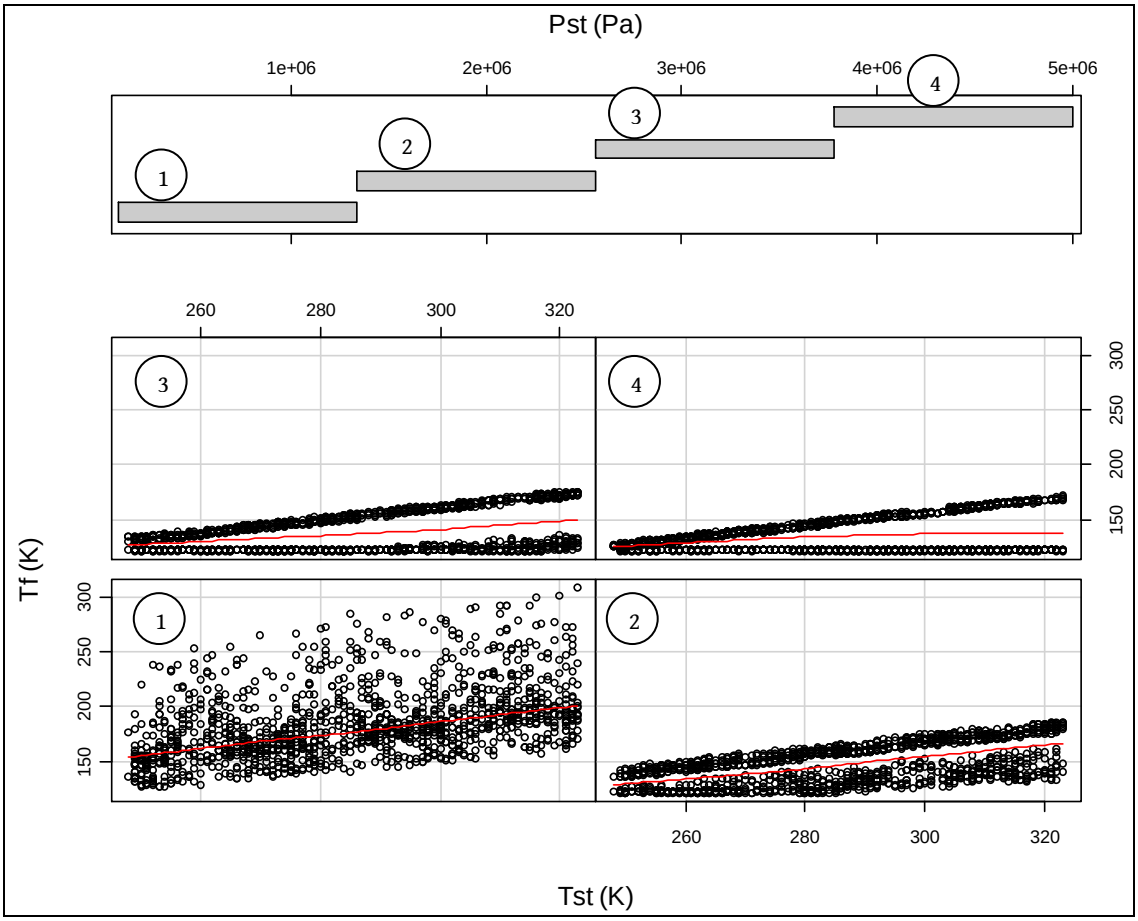


Figure III.11 Variation de T_f en fonction de T_{st} et de P_{st}

En analysant les sorties du modèle, on observe que dans environ 25 % des cas, on obtient une fraction liquide à la sortie du rejet supérieure à 0 alors que le rejet devrait être en phase gaz (le stockage de NO est en phase gaz). Dans ces cas, le modèle d'*ATEX* utilisé est le modèle isentropique (*ATEX*1). L'apparition des gouttelettes (de taille comprise entre 0,03 µm et 3,2 µm) modifie la composition du nuage, la vitesse du rejet dépend de l'influence conjointe des paramètres.

Une analyse de sensibilité a été effectuée en fixant le modèle d'*ATEX* à la valeur par défaut dans *Phast* appelée « closest to initial conditions » (*cf.* § I.2.1.3 c). Nous avons observé que dans 99 % des cas, le modèle *ATEX* choisi par *Phast* est le modèle de conservation d'énergie (*ATEX*2) et qu'il n'y a pas de formation de gouttelettes à la sortie du rejet, ce qui parait logique.

III.3.2 Terme source « Line rupture »

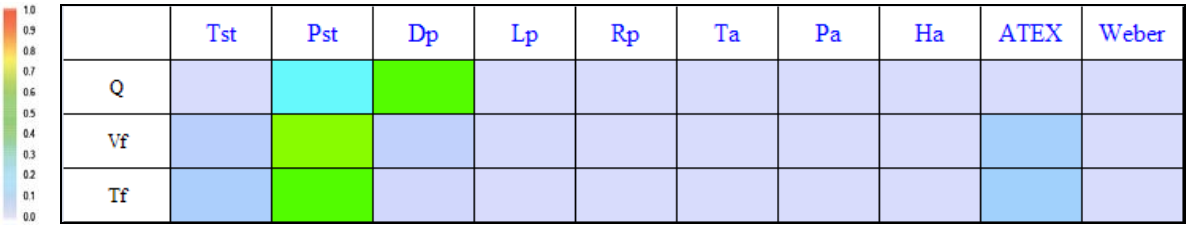
Le Tableau III.12 décrit les paramètres que l'on a fait varier pour l'analyse de sensibilité du terme source « Line rupture » pour le scénario NO.

Tableau III.12 Liste des paramètres étudiés pour l'analyse du terme source « Line rupture »

Paramètres	symbole	min	max	distribution	unité
Pression de stockage (relative)	P_{st}	10^4	$4.9 \cdot 10^6$	uniforme, continue	Pa
Température de stockage	T_{st}	248,15	323,15	uniforme, continue	K
Diamètre de canalisation	D_p	0,015	0,6	uniforme, continue	m
Longueur de canalisation	L_p	0,01	10	uniforme, continue	m
Rugosité de canalisation	R_p	10^{-10}	10^{-2}	uniforme, continue	m
Pression atmosphérique	P_a	10^5	$1{,}2 \cdot 10^5$	uniforme, continue	Pa
Température atmosphérique	T_a	223,15	323,15	uniforme, continue	K
Humidité atmosphérique	H_a	0,3	1	uniforme, continue	-
Modèle d'expansion atmosphérique (1-isentropique, 2-conservation d'énergie)	*ATEX*	1, 2		uniforme, discrète	-
Nombre de Weber critique	*Weber*	1	50	uniforme, continue	-

Le Tableau III.13 représente les indices de sensibilité du 1er ordre pour les sorties du modèle.

Tableau III.13 Indices de sensibilité de 1er ordre (terme source « Line rupture », scénario NO)



On note que les paramètres influents sur les sorties, dans l'ordre décroissant, sont :

- Débit de rejet : D_p puis P_{st}
- Vitesse finale de rejet : P_{st} puis *ATEX* puis T_{st}
- Température finale de rejet : P_{st} puis *ATEX* puis T_{st}

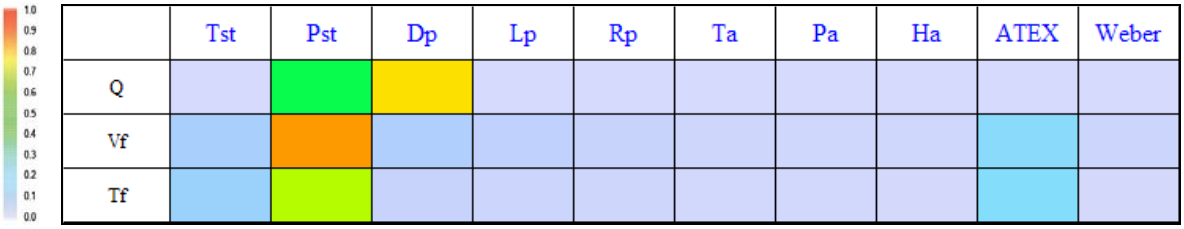
Les résultats de l'analyse de sensibilité pour le terme source « Line rupture » montrent le même type d'influence des paramètres sur les sorties Q, V_f et T_f que pour le terme source « Leak ».

On remarque que la longueur de la canalisation n'est pas influente sur les sorties.

Tableau III.14 Variabilité des sorties du modèle (terme source « Line rupture », scénario NO)

Sorties	min	max	médiane	moyenne	CV (%)
Q ($kg \cdot s^{-1}$)	0,01	3098	266	519	118
V_f ($m \cdot s^{-1}$)	17	652	517	504	17
T_f (K)	121	319	160	163	22

Tableau III.15 Indices de sensibilité totaux (terme source « Line rupture », scénario NO)



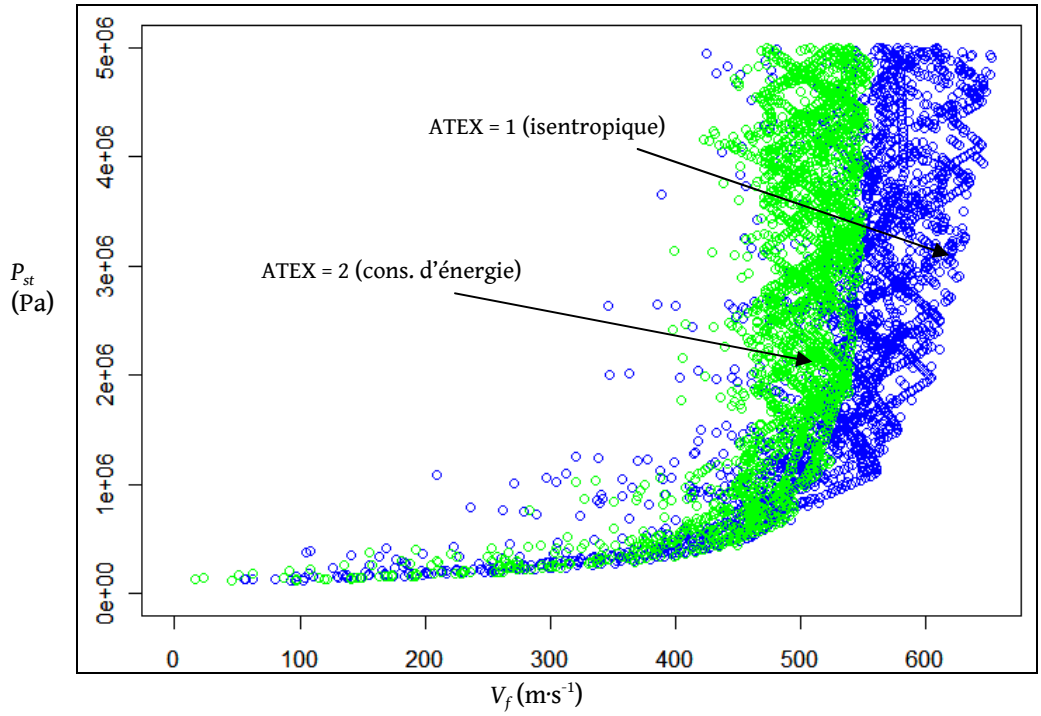


*Figure III.12 Variation de V_f en fonction de P_{st} pour les deux modèles d'*ATEX

III.4 Screening

Les scénarios de « screening » ou criblage sont effectués en faisant varier l'ensemble des paramètres. Les échantillons sont de taille 30000 (cette taille plus importante d'échantillon s'explique par le nombre plus important de paramètres). Le tableau suivant montre les paramètres que nous faisons varier pour les scénarios de screening.

Tableau III.16 Paramètres étudiés pour les scénarios de screening

Paramètres (unité) [*valeur par défaut dans Phast*]		**Plage étudiée**	***famille***
Température de stockage (K)	T_{st}	selon le produit	*A*
Pression de stockage relative (Pa)	P_{st}		
Diamètre d'orifice (m)	D_o		
Hauteur du liquide dans le réservoir (m)	L_h	[0 – 30]	
Température atmosphérique (K)	T_a	[223,15 – 323,15]	
Pression atmosphérique (Pa)	P_a	[10^4 – 1,2·10^5]	
Humidité relative atmosphérique	H_a	[0,3 – 1]	
Durée de rejet (s)	*Dur*	[18,75 – 3600]	
Hauteur de rejet (m)	*ZR*	[1 – 50]	
Angle de rejet (degré)	θ	[0 – 90]	
Rugosité de surface (m)	*Z0*	[0.0001 – 3]	
Vitesse du vent (m·s^{-1})	U_a	[1 – 15]	
Capacité thermique atmosphérique (J·kg^{-1}·K^{-1}) [*1004*]	C_{pa}	[800 – 1200]	
Flux solaire radiatif (W·m^{-2}) [*500*]	S_{flux}	[0 – 1200]	
Profil vertical du vent (vitesse : 1-constante mesurée à 10 m, 2-loi puissance) [*2*]	W_p	1, 2	*B*
Profil vertical de T et P (1-constant, 2-linéaire, 3- T log et P linéaire) [*3*]	TP_p	1, 2, 3	
Transfert de chaleur entre le nuage et le sol (1-non, 2-oui) [*2*]	*HT*	1, 2	
Inversion de température (1-oui, 2-non) [*1*]	*Mixing*	1, 2	
Surface d'épandage du liquide (1-terre mouillée, 2-terre sèche, 3-béton, 4-béton étanche, 5-Eau profonde, 6- eau peu profonde, 7-rivière profonde, 8-rivière peu profonde, 9-définie par l'utilisateur) [*3*]	S_{pool}	1, 2, 3, 4	
Modèle thermo. d'évaporation des gouttelettes (1-rainout et équilibre, 2- rainout et non-équilibre, -1-pas de rainout) [*2*]	M_{thrm}	1, 2	

Méthode de résolution des équations nuage/gouttes (2- synchronisé, 6- rigoureux) [*2*]	M_{drop}	2, 6	
Coefficient d'entrainement « jet » [*0,17*]	α_1	[0,01 – 2]	*C*
Coefficient d'entrainement « crosswind » [*0,35*]	α_2	[0,01 – 2]	
Coefficient de trainée entre le nuage et l'air [*0*]	C_{Da}	[0 – 1]	
Coefficient d'entrainement de coté du nuage dense [*0*]	γ	[0 – 2]	
Coefficient d'étalement du nuage dense [*1,15*]	C_E	[0 – 2]	
Coefficient d'entrainement passif dans le champ proche [*1*]	e_{pas}	[0 – 1]	
Différence max. entre la vitesse nuage/air ambiant [*0,1*]	r_u^{pas}	[0 – 1]	
Différence max. entre la densité nuage/air ambiant [*0,015*]	r_{ro}^{pas}	[0,01 – 2]	
Fraction max. de l'entrainement non-passif [*0,3*]	r_E^{pas}	[0 – 1]	
Nombre de Richardson maximum [*15*]	Ri_*^{pas}	[0 – 50]	
Facteur de multiplication pour la phase passive [*2*]	r_{tr}^{pas}	[1,01 – 2]	
Nombre de Richardson pour le décollement du nuage [*-20*]	Ri_*	[-100 – 0]	
Paramètres de transition quasi-instantanée [*0,8*]	r_{quasi}	[0,1 – 10]	
Nombre de Richardson pour la transition passive au dessus de la flaque [*0,015*]	Ri_{pool}	[0 – 10]	
Paramètre d'entrainement de l'évaporation de flaque [*1,5*]	Ent_{pool}	[0 – 2]	
Hauteur effective minimale du nuage (m) [*0,02*]	H_{mineff}	[0,01 – 1]	*D*

Il est important de noter que, dans cette phase de screening, les paramètres « *core averaging time* » et « *toxic averaging time* » de *Phast* sont fixés à la durée du rejet, qui varie sur une plage large. Le paramètre « averaging time » (*cf.* § I.2.5.4) fait souvent l'objet de débats parmi les utilisateurs de *Phast*, puisque son impact sur les résultats est parfois important, et il n'existe pas de consigne claire sur la meilleure valeur à choisir. Nous avons choisi cette configuration pour nous approcher au plus des pratiques d'utilisateurs avertis de l'outil. Toutefois, pour les durées de rejet courtes, le temps de passage du nuage peut être très supérieur à l'« averaging time », ce qui implique que l'outil surestimera la concentration.

De façon générale, il est difficile d'interpréter physiquement dans le détail les résultats de l'étape de screening, dans la mesure où un grand nombre de paramètres varient de façon simultanée. Dans ce paragraphe, nous présentons les résultats de screening des scénarios NO et NH_3.

III.4.1 Screening du scénario NO

Le Tableau III.16 liste l'ensemble des paramètres étudiés pour le scénario de screening NO. Il faut noter que les paramètres L_h, S_{flux}, S_{pool}, M_{thrm}, M_{drop}, Ri_{pool} et Ent_{pool} ne concernent pas le scénario NO parce que le rejet est en phase gaz et donc ces paramètres

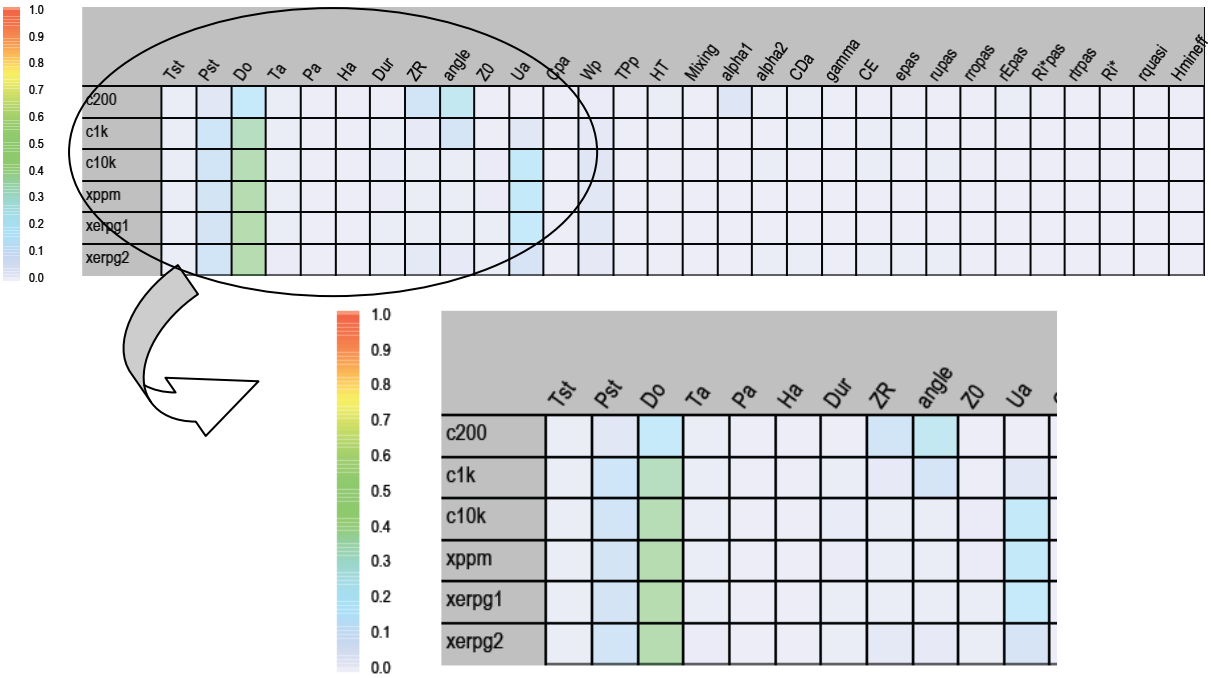
sont fixés à leur valeur par défaut dans *Phast*. Les plages des trois paramètres T_{st}, P_{st} et D_O sont définis dans le Tableau III.17.

Tableau III.17 Paramètres étudiés pour le scénario du screening NO

Paramètres (unité)	***symbole***	**Plage étudiée**	***famille***
Température de stockage (K)	T_{st}	[248,15 – 323,15]	*A*
Pression de stockage (Pa)	P_{st}	[1,01·10^5 – 5·10^6]	
Diamètre d'orifice (m)	D_o	[0,001 – 0,6]	

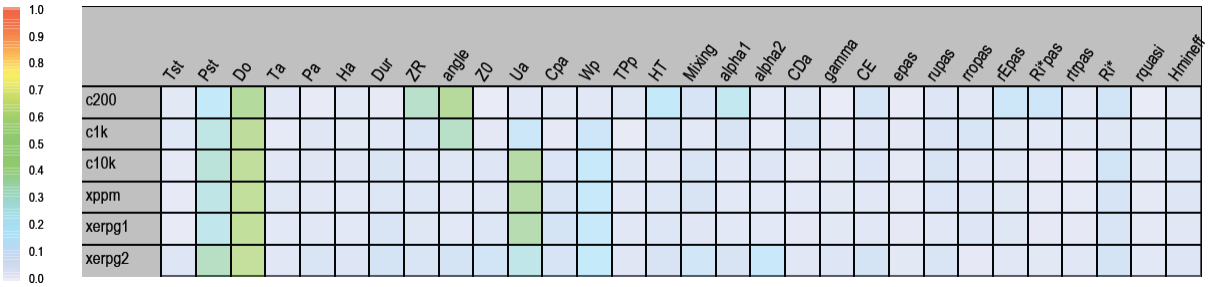
Le Tableau III.18 montre les indices de sensibilité du 1er ordre.

Tableau III.18 Indices de sensibilité de 1er ordre du scénario de screening NO



On note que les paramètres influents sur la plupart des sorties sont ceux de la famille A (c'est-à-dire, ceux dont l'influence est « connue » des utilisateurs de l'outil). Le cas contraire (voire une influence d'un paramètre « interne » de *Phast* lors de l'étape de criblage), aurait été inquiétant, puisqu'indiquant que les réglages internes auraient une influence supérieure à des entrées physiques. Parmi les paramètres de la famille A, les paramètres de terme source, D_O et P_{st}, ont une influence plus importante sur toutes les sorties. En outre, l'angle de rejet et la hauteur de rejet ont une influence dans le champ proche et la vitesse du vent est influente dans le champ lointain.

Tableau III.19 Indices de sensibilité totaux du scénario de screening NO



Le Tableau III.19 montre les indices totaux de sensibilité pour le scénario de screening du NO. On note qu'il y a des interactions entre les paramètres de la famille A et qu'il y a peu d'interactions entre les autres paramètres.

Tableau III.20 Données relatives à la variabilité des sorties pour le screening NO

Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
c200	0.00	27229.20	1154.13	603.85	143.71	1	624	0
c1k	0.00	9112.56	561.52	366.82	112.26	0	32	0
c10k	0.00	1254.58	54.37	24.05	142.72	2	3	0
xppm	0.00	51033.71	5762.26	3417.26	122.07	0	3557	97
xerpg1	0.00	50059.70	5851.81	3469.93	122.60	0	3349	109
xerpg2	0.00	21975.16	813.84	328.27	146.20	0	11718	0

Le Tableau III.20 montre les données relatives à la variabilité des sorties. Les valeurs de *CV*, qui sont la mesure de la dispersion des sorties, sont relativement élevées. A titre d'exemples, les histogrammes des sorties *C1k* et *Xppm* sont représentés sur la Figure III.13 et la Figure III.14.

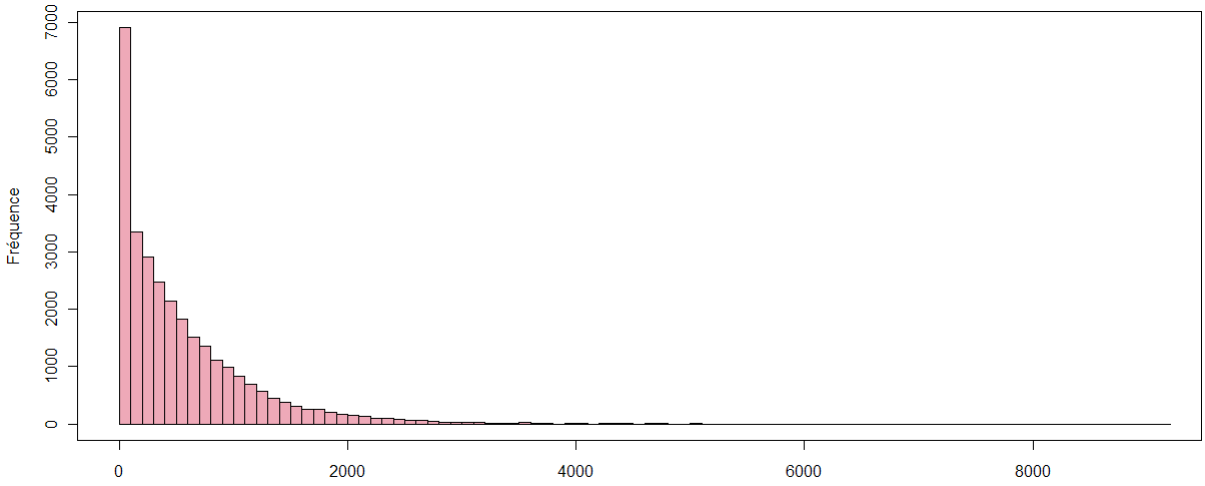


Figure III.13 Histogramme de sortie C1k (scénario de screening NO)

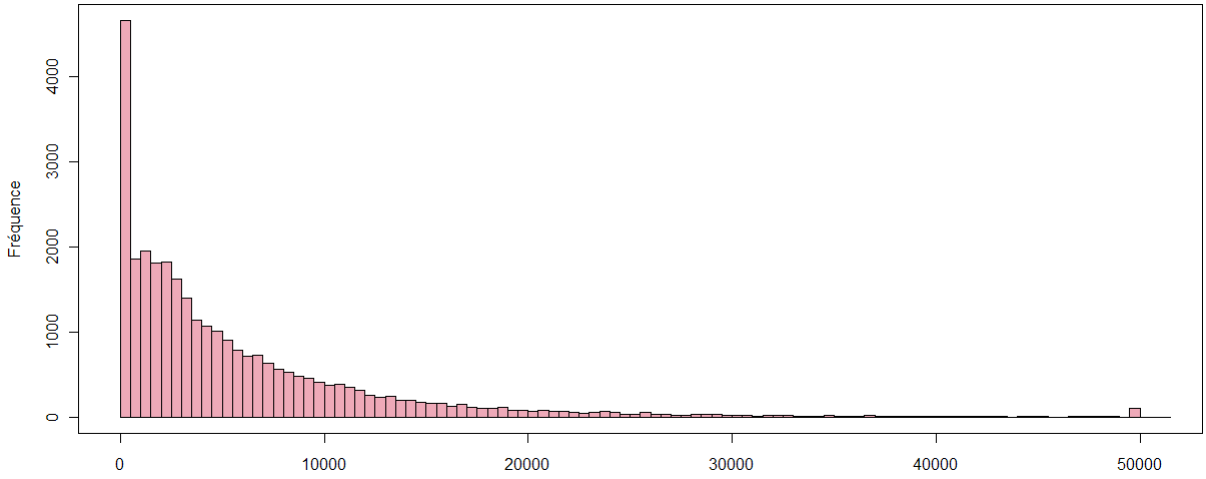
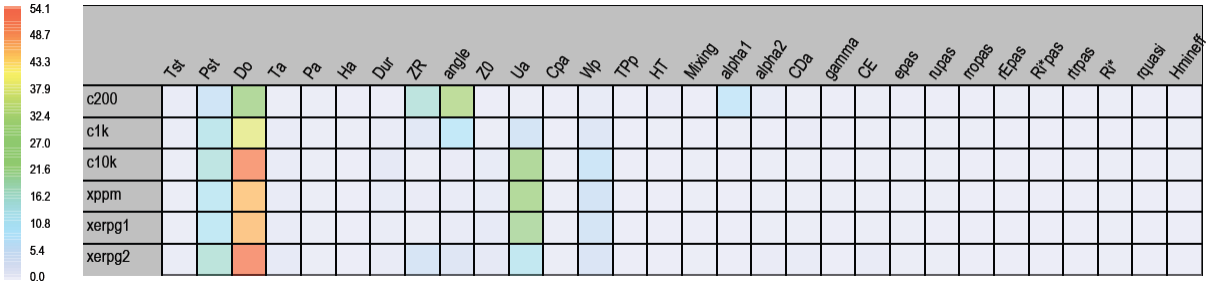


Figure III.14 Histogramme de sortie Xppm (scénario de screening NO)

Le Tableau III.21 montre les résultats de *CVSi*. On note que l'influence de D_0 augmente lorsque l'on passe du champ proche (*C200*) au champ lointain (*C10k*). Dans le champ proche, la concentration est influencée par plusieurs paramètres qui conditionnent l'orientation de la dispersion du rejet, mais dans le champ lointain, quand la hauteur du nuage se stabilise, la concentration est principalement influencée par D_0 et U_a (phase de dispersion passive).

Tableau III.21 Influence mesurée par la grandeur CVSi du scénario de screening NO



En examinant la Figure III.15 et la Figure III.16, on note qu'il existe une corrélation linéaire positive entre D_0 et *C200* et linéaire négative entre U_a et *C10k*.

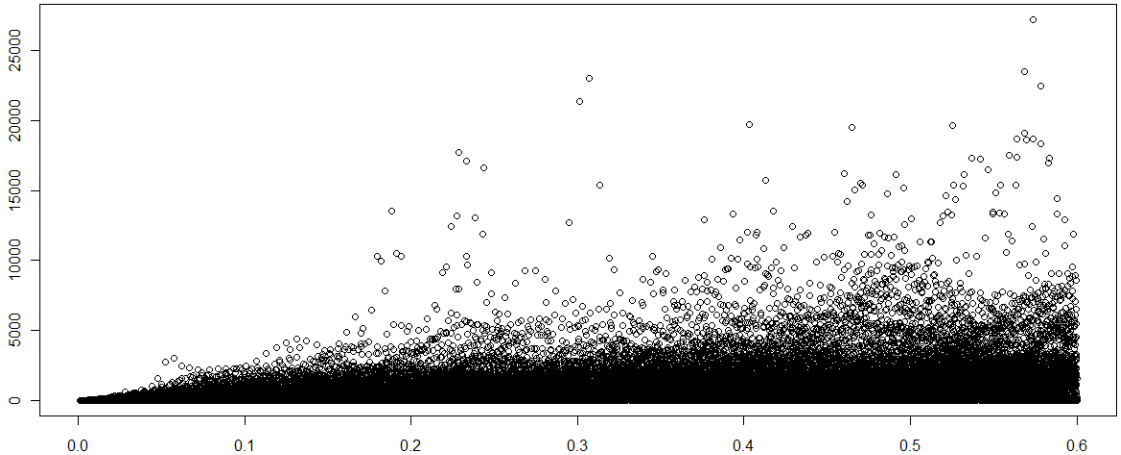


Figure III.15 Variation de C200 en fonction de D_0 (scénario de screening NO)

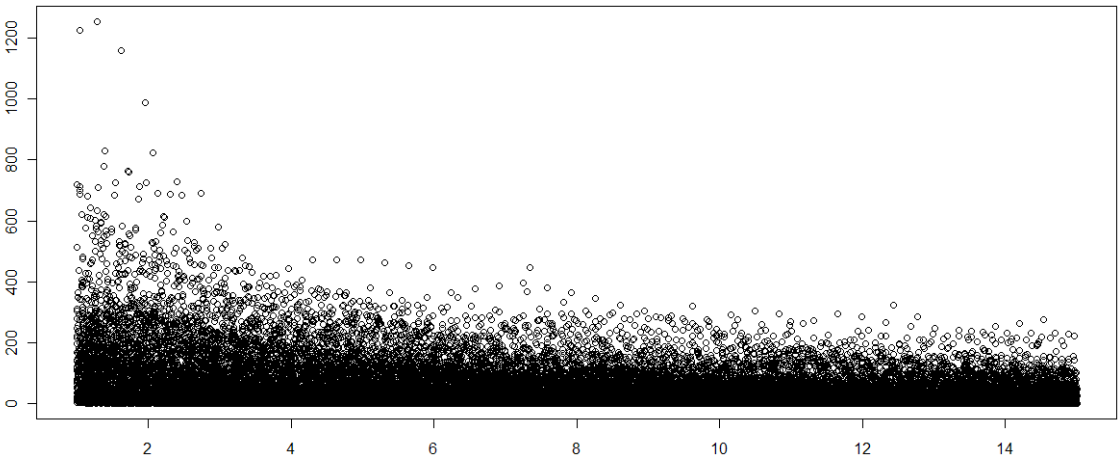


Figure III.16 Variation de C10k en fonction de U_a (scénario de screening NO)

III.4.2 Screening du scénario NH_3

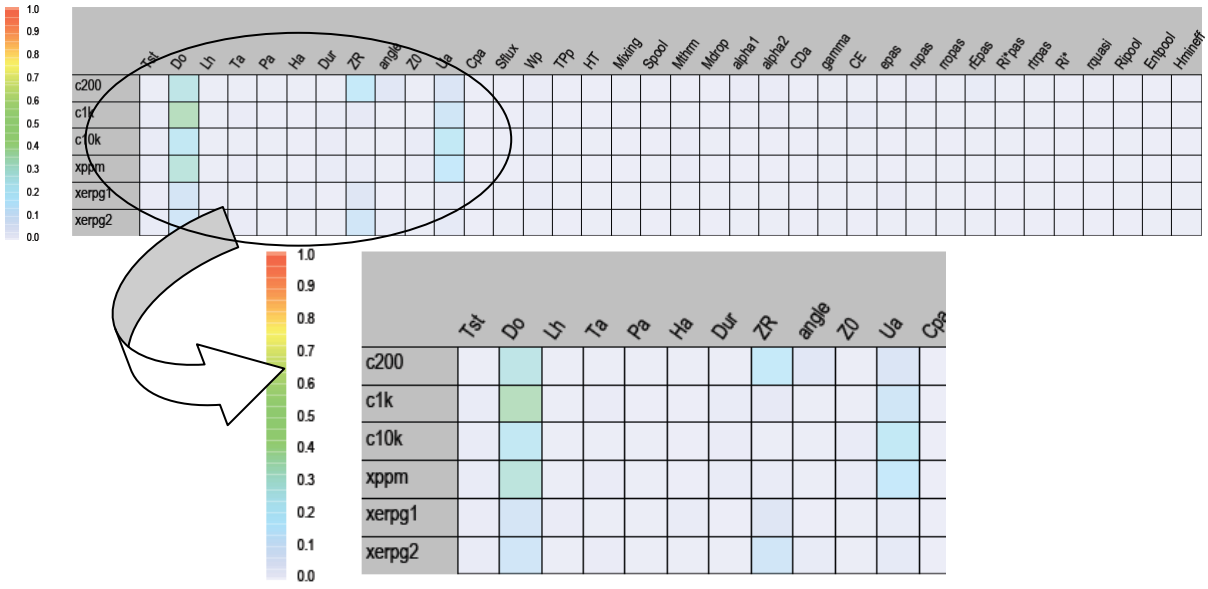
L'ammoniac est stocké sous forme de liquide saturé à la pression de vapeur saturante à une température donnée. Les paramètres étudiés pour le scénario de screening NH_3 figurent dans le Tableau III.22.

Tableau III.22 Paramètres étudiés pour le scénario de screening NH_3

Paramètres (unité)		Plage étudiée	*famille*
Température de stockage (K)	T_{st}	[253,15 – 313,15]	*A*
Diamètre d'orifice (m)	D_o	[0,001 – 0,16]	

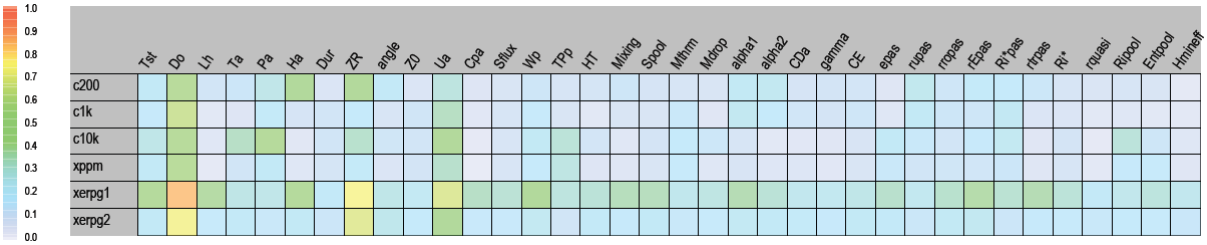
Les indices de sensibilité de 1er ordre pour le scénario NH_3 sont visualisés dans le Tableau III.23.

Tableau III.23 Indices de sensibilité de 1er ordre du scénario de screening NH_3



On observe que le paramètre le plus influent sur toutes les sorties est D_o. De plus, dans le champ proche, la hauteur de rejet, *ZR*, a une influence non négligeable. L'influence de la vitesse du vent (U_a) augmente lorsqu'on passe du champ moyen au champ lointain.

Tableau III.24 Indices de sensibilité totaux du scénario de screening NH_3



Le Tableau III.24 relatif aux indices totaux de sensibilité appelle deux commentaires principaux :

- certains paramètres « internes » présentent une influence non négligeable (par exemple, autour de 0,3 pour *alpha1*) en interaction. La méthode d'analyse de sensibilité que nous avons utilisée, EFAST, ne permet pas de décomposer cet effet d'interaction pour déterminer avec quels autres paramètres cette influence se produit.
- Pour les sorties *Xerpg1* et *Xerpg2*, on constate des effets en interaction pour l'ensemble des paramètres (contrairement aux résultats pour le produit NO). Il est important de noter que ces deux sorties sont affectées par un grand nombre de cas de « cutoff » (pour la sortie *Xerpg2*, plus de 16000 exécutions sur les 30000 résultent en une sortie à 50000 ou à 0, comme expliqué à la section II.5.2). Nous ne comprenons pas pourquoi ces effets de « cutoff » se répercutent de façon si importante sur les indices totaux.

A titre d'exemples, les histogrammes des sorties *C200* et *Xppm* sont représentés sur la Figure III.17 et la Figure III.18.

Tableau III.25 Données relatives à la variabilité des sorties pour le scénario de screening NH3

Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
c200	0.00	103910.00	3125.00	1937.10	127.04	498	246	0
c1k	0.00	46188.00	757.94	464.98	138.53	498	3	0
c10k	0.00	6153.70	37.62	16.95	221.70	498	0	0
xppm	0.00	50000.00	1658.51	1218.75	109.56	498	4691	2
xerpg1	0.00	50000.00	7064.71	659.93	234.23	498	4697	3807
xerpg2	0.00	50000.00	19387.85	439.45	124.82	498	4697	11340

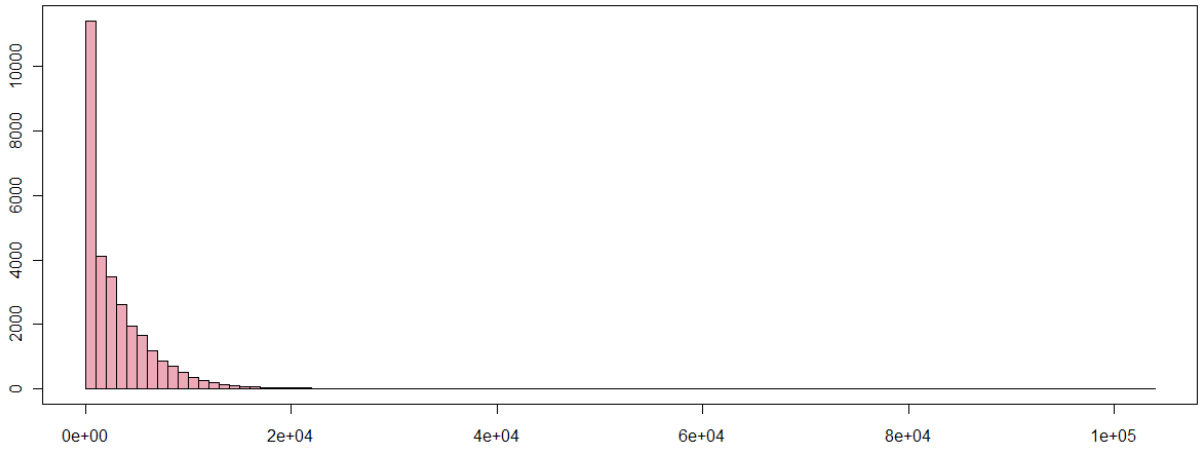


Figure III.17 Histogramme de la sortie C200 du scénario de screening NH_3

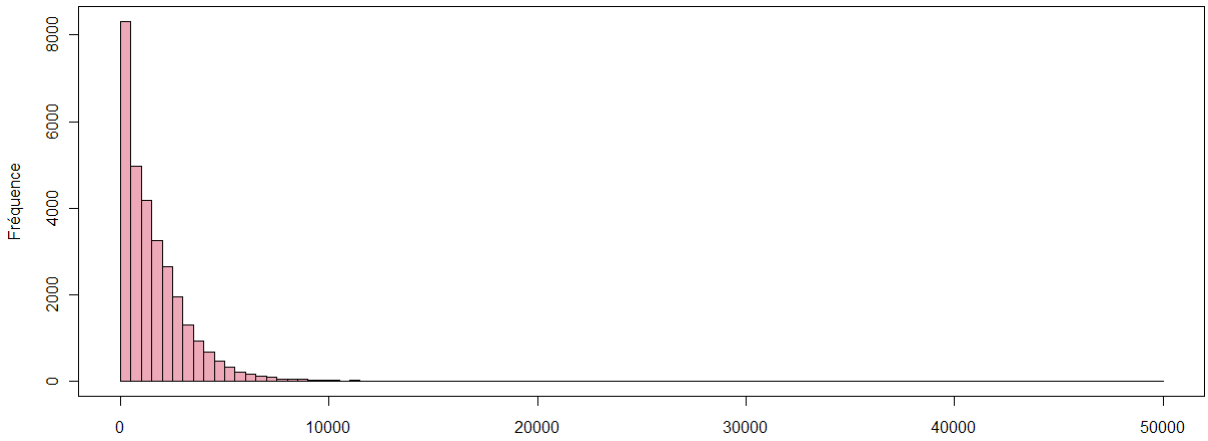
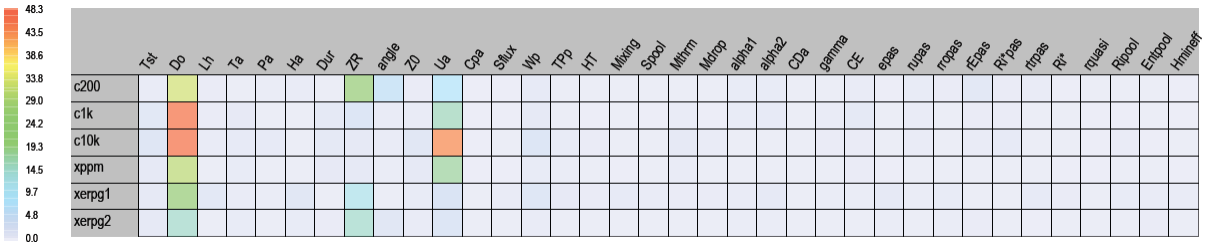


Figure III.18 Histogramme de la sortie Xppm (à 600 ppm) du scénario de screening NH_3

Tableau III.26 Influence mesurée par la grandeur CVSi du scénario de screening NH_3



On note, à l'examen du Tableau III.26, que les paramètres les plus influents sur les sorties sont D_o, ZR, angle de rejet et U_a. La corrélation entre le diamètre de fuite et la sortie *C200* est représentée dans la Figure III.19.

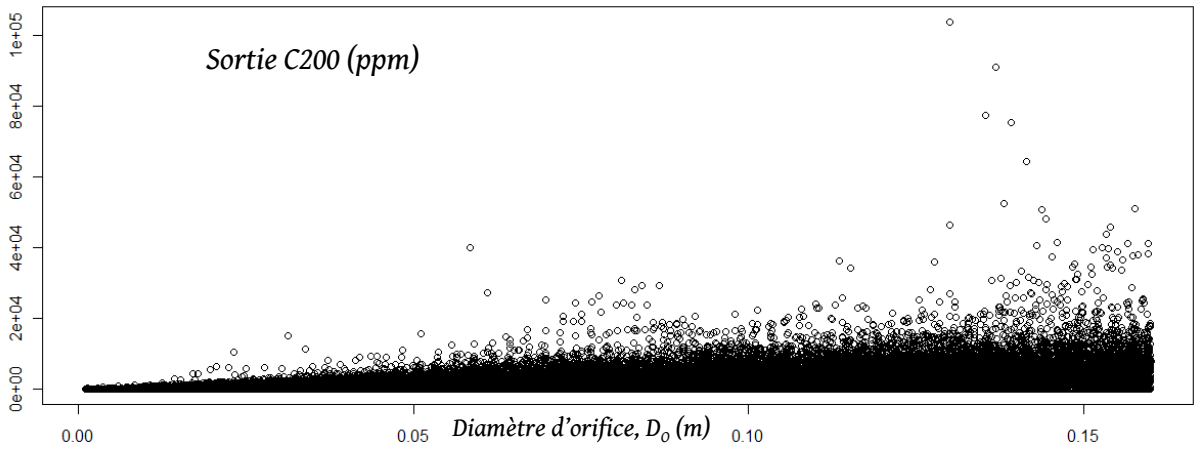


Figure III.19 « Scatter plot » de C200 en fonction de D_0 (scénario de screening NH_3)

On note que la concentration dans le champ proche *C200* augmente lorsque D_o croit, ce qui s'explique par l'augmentation du débit de rejet.

III.5 Analyse de l'UDM

Nous avons effectué l'analyse de sensibilité du modèle UDM de *Phast* pour des rejets relatifs aux différents produits sélectionnés. Tous les scénarios de rejet étudiés, listés dans le Tableau III.1, sont en mode continu d'une durée de 1 heure.

III.5.1 Paramètres fixés et paramètres étudiés

Dans cette partie, nous présentons, pour chaque produit, les paramètres de « bifurcation », les paramètres fixés et les paramètres que nous avons fait varier.

III.5.1.1 Paramètres de bifurcation

Pour définir les scénarios représentatifs pour chaque produit, nous avons choisi des paramètres dits « de bifurcation » qui sont rappelés dans le tableau suivant :

Tableau III.27 Paramètres de « bifurcation »

Paramètres de bifurcation	valeur 1	valeur 2
Débit de rejet ($kg \cdot s^{-1}$)	Q1	Q2
Angle de rejet (degré)	0	90
Couple classe de stabilité / vitesse du vent	D / 5	F / 3
Hauteur de rejet (m)	1	20

Le calcul du terme source avec deux différentes conditions de stockage et deux diamètres de brèche permet de définir deux valeurs du débit de rejet *Q1* et *Q2*. Les résultats de terme source comprennent le débit de rejet, Q, la vitesse de rejet, V_f, la température de rejet, T_f, la fraction liquide dans le rejet, L_f et la taille de gouttes, D_d. Le calcul de la dispersion avec UDM correspond à un ensemble de valeurs de $\{Q, V_f, T_f, L_f, D_d\}$ fixe pour chaque produit. Le Tableau III.28 contient les conditions de stockage et les résultats du terme source pour chaque produit étudié.

Tableau III.28 Conditions de stockage et résultats du terme source

	Conditions de stockage					Résultats du terme source				
	T_{st}	P_{st}	L_h	D_o		Q	V_f	T_f	L_f	D_d
unité	*K*	*Pa (relative)*	*m*	*m*		$kg \cdot s^{-1}$	$m \cdot s^{-1}$	*K*	-	*µm*
NO (gaz sous pression à 283,15 K)										
Q1	283,15	$24 \cdot 10^5$	--	0,025		2,61	498,6	153,7	0	0
Q2	283,15	$9 \cdot 10^5$	--	0,500		411,6	476,6	168,7	0	0
NH_3 (liquide saturé à 273,15 K)										
Q1	273,15	$5,12 \cdot 10^5$	0	0,050		27,1	144,4	239,7	0,894	16,8
Q2	273,15	$5,12 \cdot 10^5$	0	0,160		277,8	144,4	239,7	0,894	16,8
Cl_2 (liquide saturé à 293,15 K)										
Q1	293,15	$5,78 \cdot 10^5$	0	0,025		12,4	104,8	239,2	0,843	25,0
Q2	293,15	$5,78 \cdot 10^5$	0	0,160		506,8	104,8	239,2	0,843	25,0
HF (liquide sous pression et à 298,15 K)										
Q1	298,15	$2,5 \cdot 10^5$	0	0,032		10,5	27,0	292,8	0,964	123,3
Q2	--	--	--	--		--	--	--	--	--
N_2 (liquide sous pression $0,05 \cdot 10^5$ Pa relative et à la température 77,75 K)										
Q1	77,75	$0,05 \cdot 10^5$	15	0,040		10,6	17,5	77,4	0,996	295,2
Q2	77,75	$0,05 \cdot 10^5$	15	0,160		170,2	17,5	77,4	0,996	295,2
n-hexane (liquide à 293,15 K et à la pression atmosphérique)										
Q1	--	--	--	--		--	--	--	--	--
Q2	293,15	0	20	0,200		260,8	20.9	293,1	1	431,1

Voici quelques remarques relatives aux conditions de stockage et aux paramètres de bifurcation :

- Pour les produits HF et n-hexane, nous avons effectué l'analyse de sensibilité pour un seul débit de rejet.
- Le stockage des produits NH_3, Cl_2 et HF est en phase liquide pressurisé saturée avec une pression de stockage égale à la pression de vapeur saturante à la température donnée. Pour ces trois produits, la hauteur du liquide, L_h, dans le réservoir est prise égale à 0 car l'influence de ce paramètre est négligeable sur le calcul du terme source.
- Pour les produits azote et n-hexane, la pression de stockage étant proche de la pression atmosphérique, nous avons imposé une hauteur du liquide dans le réservoir, L_h pour le calcul du débit de rejet (après discussion avec les partenaires, nous avons pris L_h égale à 15 m pour N_2 et à 20 m pour n-hexane).
- Pour les scénarios de rejet de N_2, la hauteur 2 de rejet maximale est égale à 15 m ; elle est de 20 m pour les autres produits. En effet, lorsque la hauteur de rejet est

égale à 20 m, les sorties correspondant à la distance d'effet sont égales à 0 (la concentration est inférieure à la valeur de seuil cible).

Etant donné que les scénarios n-hexane produisent une grande flaque de liquide et que *Phast* ne simule pas de façon optimale l'évaporation d'une flaque ainsi que l'interaction entre la flaque et le nuage, nous avons décidé de modéliser ces scénarios en tenant compte de la présence d'une cuvette de rétention circulaire de diamètre 87 m (superficie égale à 6000 m^2), ce qui correspond au volume total de l'n-hexane rejeté. Pour ces scénarios, nous avons fixé la durée de rejet à 1800 s pour limiter le volume de la flaque et éviter le débordement de la cuvette de rétention.

III.5.1.2 Paramètres fixés

Pour effectuer l'analyse de sensibilité du modèle UDM, outre les paramètres de bifurcation, nous avons fixé les valeurs des paramètres de la famille A, qui sont décrits dans le Tableau III.29.

Tableau III.29 Paramètres fixés

	Paramètres fixés (unité)		**Valeur étudiée**
1	Température atmosphérique (K)	T_a	288,15
2	Pression atmosphérique (Pa)	P_a	$1{,}013 \cdot 10^5$
3	Humidité relative atmosphérique (-)	H_a	0,7
4	Durée de rejet (s)	*Dur*	3600
5	Rugosité de surface (m)	*Z0*	0,951
6	Capacité thermique atmosphérique ($J \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1}$)	C_{pa}	1004
7	Toxic averaging time (s)	T_{av}	3600
8	Core averaning time (s)	T_{av}^{core}	3600

III.5.1.3 Paramètres étudiés

Les paramètres étudiés pour l'analyse de sensibilité d'UDM sont décrits dans le Tableau III.30.

Tableau III.30 Paramètres étudiés

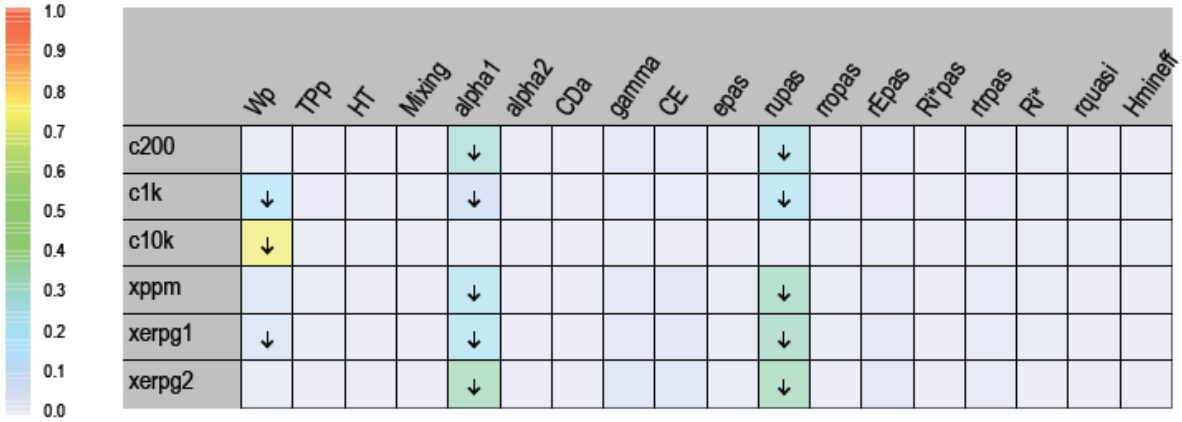
	Paramètres (unité) [*valeur par défaut dans Phast*]		**Plage étudiée**	***famille***
1	Flux solaire radiatif ($W \cdot m^{-2}$) [*500*]	S_{flux}	[0 – 1200]	*A*
2	Profil vertical de la vitesse du vent (1-constante mesurée à 10 m, 2-loi puissance) [*2*]	W_p	1, 2	*B*
3	Profil vertical de T et P (1-constant, 2-linéaire, 3- T log et P linéaire) [*3*]	TP_p	1, 2, 3	
4	Transfert de chaleur entre le nuage et le sol (1-non, 2-oui) [*2*]	*HT*	1, 2	
5	Inversion de température (1-oui, 2-non) [*1*]	*Mixing*	1, 2	
6	Surface d'épandage du liquide (1-terre mouillée, 2-terre sèche, 3-béton, 4-béton étanche, 5-Eau profonde, 6- eau peu profonde, 7-rivière profonde, 8-rivière peu profonde, 9-définie par l'utilisateur) [*3*]	S_{pool}	1, 2, 3, 4	
7	Modèle thermo d'évaporation des gouttelettes (1-rainout et équilibre, 2- rainout et non-équilibre, -1-pas de rainout) [*2*]	M_{thrm}	1, 2	
8	Méthode de résolution des équations nuage/gouttes (2-synchronisé, 6- rigoureux) [*2*]	M_{drop}	2, 6	
9	Coefficient d'entrainement « jet » [*0,17*]	α_1	[0,01 – 2]	*C*
10	Coefficient d'entrainement « cross-wind » [*0,35*]	α_2	[0,01 – 2]	
11	Coefficient de trainée entre le nuage et l'air [*0*]	C_{Da}	[0 – 1]	
12	Coefficient d'entrainement de coté du nuage dense [*0*]	γ	[0 – 2]	
13	Coefficient d'étalement du nuage dense [*1,15*]	C_E	[0 – 2]	
14	Coefficient d'entrainement passif dans le champ proche [*1*]	e_{pas}	[0 – 1]	
15	Différence max. entre les vitesses nuage/air ambiant [*0,1*]	r_u^{pas}	[0 – 1]	
16	Différence max. entre les densités nuage/air ambiant [*0,015*]	r_{ro}^{pas}	[0,01 – 2]	
17	Fraction max. de l'entrainement non-passif [*0,3*]	r_E^{pas}	[0 – 1]	
18	Nombre de Richardson maximum [*15*]	Ri_*^{pas}	[0 – 50]	
19	Facteur de multiplication pour la phase passive [*2*]	r_{tr}^{pas}	[1,01 – 2]	
20	Nombre de Richardson pour le décollement du nuage [*-20*]	Ri_*	[-100 – 0]	
21	Paramètres de transition quasi-instantanée [*0,8*]	r_{quasi}	[0,1 – 10]	
22	Nombre de Richardson pour la transition passive au dessus de la flaque [*0,015*]	Ri_{pool}	[0 – 10]	
23	Paramètre d'entrainement de l'évaporation de flaque [*1,5*]	Ent_{pool}	[0 – 2]	
24	Hauteur effective minimale du nuage (m) [*0,02*]	H_{mineff}	[0,01 – 1]	*D*

Les paramètres S_{flux}, S_{pool}, M_{thrm}, M_{drop}, Ri_{pool}, Ent_{pool} ne concernent pas les scénarios de rejet de NO parce que le rejet est en phase gaz. Ces paramètres sont fixés à la valeur par défaut.

III.5.2 Résultats pour le scénario NO-1

Nous présentons les résultats du scénario 1 de rejet de NO en phase gaz. Le scénario NO-1 est défini comme un rejet : horizontal (ZR = 1 m), débit de rejet faible et couple classe de stabilité / vitesse du vent égale à D/5.

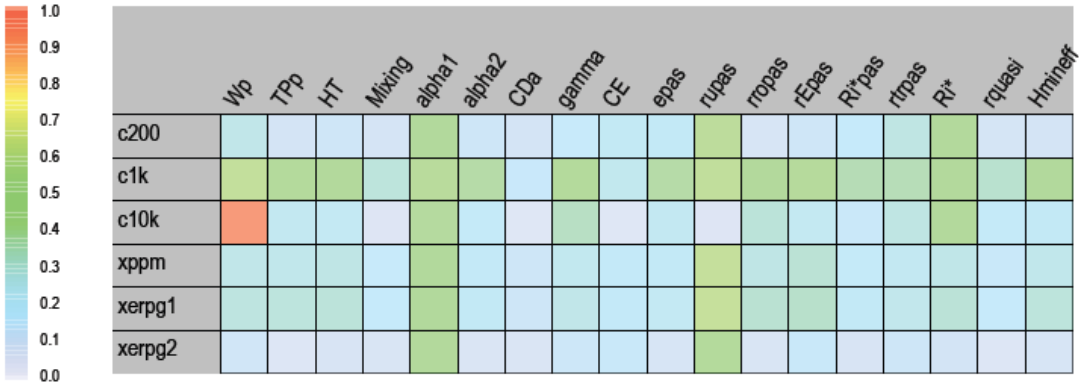
Tableau III.31 Indices de sensibilité du 1er ordre du scénario NO-1



Le Tableau III.31 montre les indices de sensibilité de 1er ordre. On constate que les paramètres les plus influents sont W_p, α_1 et r_u^{pas}. Le paramètre α_1 est influent dans le champ proche et cette influence diminue au cours de la dispersion dans la direction du vent. Ceci s'explique le phénomène de jet est prépondérant dans le champ proche à cause d'une forte différence entre la vitesse de rejet initiale (environ 500 m·s^{-1}) et la vitesse du vent (5 m·s^{-1}) .

Pour ce scénario de rejet en phase gaz, le paramètre r_u^{pas} (qui est un des paramètres de la transition passive) est très influent. Le débit d'entrainement de l'air dans le nuage varie considérablement selon la phase de dispersion, et donc ce paramètre est influent dans le champ proche (*C200*) et dans le champ moyen (*C1k*). Dans le champ lointain, le seul paramètre W_p est influent. La flèche vers le bas dans la case *alpha1-C200* indique une corrélation linéaire négative : si on augmente *alpha1*, la concentration à 200 m diminue.

Tableau III.32 Indices de sensibilité totaux du scénario NO-1



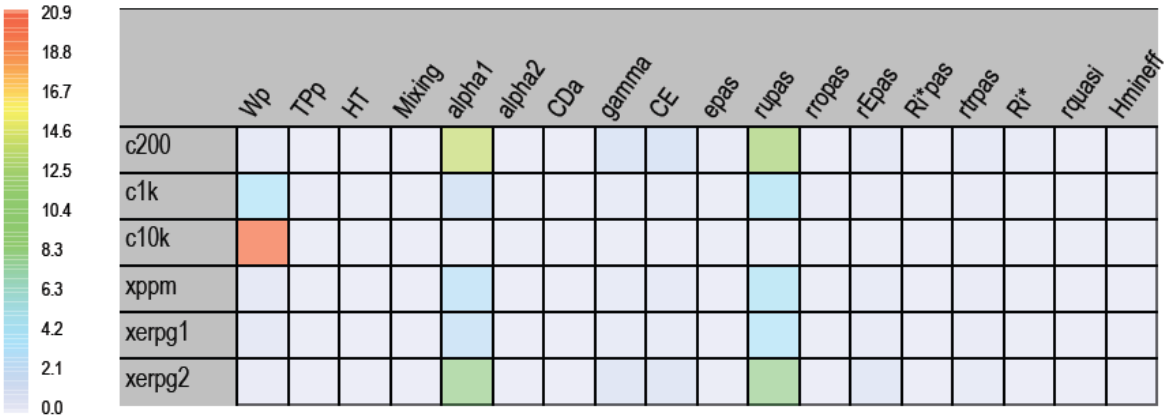
Le Tableau III.32 donne les indices totaux de sensibilité. En comparant ce tableau avec le Tableau III.31, on constate qu'il y a beaucoup d'influence des paramètres en interaction sur les sorties du modèle. Ces résultats révèlent des informations qualitatives sur l'influence globale des paramètres sur la sortie. Par exemple, en comparant les indices S_i et S_{Ti} pour les sorties *C200* et *C1k*, on constate qu'il y a beaucoup d'interactions pour la sortie *C1k* par rapport à la sortie *C200*, c'est-à-dire que la concentration dans le champ moyen est influencée par la variation simultanée des paramètres. Toutefois, ces résultats ne permettent pas d'analyser finement les effets dus aux interactions des paramètres. Pour cela, il faudrait effectuer une analyse de sensibilité avec la méthode Sobol' par exemple qui permet de calculer les indices d'ordre supérieur à 1.

Tableau III.33 Données relatives aux sorties du modèle pour le scénario NO1

Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
c200	62.33	5873.64	427.99	365.69	50.26	0	0	0
c1k	8.20	129.09	23.52	23.03	20.78	0	0	0
c10k	0.31	4.71	0.57	0.70	28.50	0	0	0
xppm	127.97	1183.84	434.37	422.89	12.73	0	0	0
xerpg1	157.52	1367.20	494.47	482.33	11.71	0	0	0
xerpg2	24.03	466.42	156.97	149.37	23.93	0	0	0

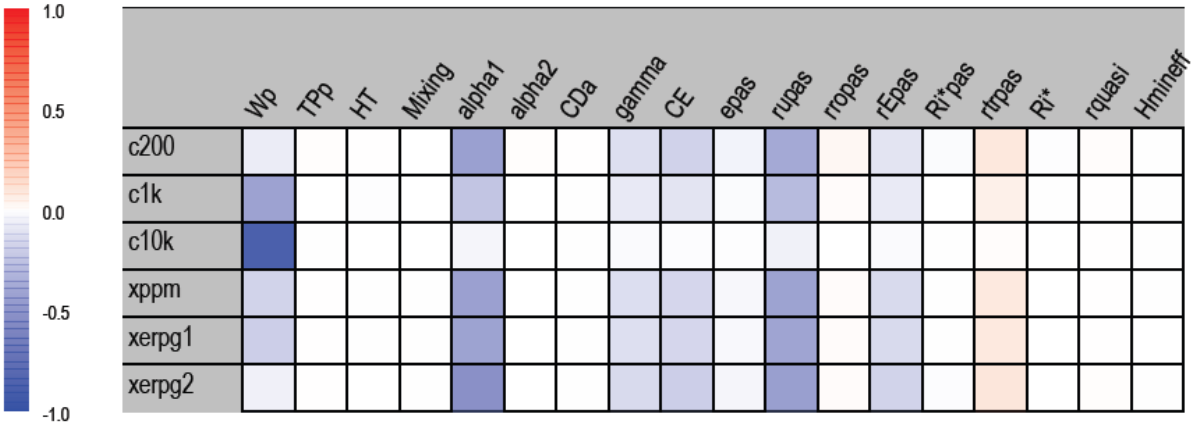
Le Tableau III.33 fournit des données relatives à la variabilité des différentes sorties. On remarque que la variabilité de *C200* est deux fois plus importante que celle de *C1k*.

Tableau III.34 Influence mesurée par la grandeur CVSi du scénario NO-1



Le Tableau III.34 des *CVSi* intègre à la fois la sensibilité d'un paramètre et la variabilité de la sortie. On peut comparer l'influence d'un paramètre sur les différentes sorties du modèle. Par exemple, l'influence de rupas est plus élevée sur la sortie *C200* que sur la sortie *C1k*.

Tableau III.35 Corrélation entre les paramètres et les sorties du scénario NO-1



Le Tableau III.35 indique les corrélations entre les paramètres et la sortie considérée. Dans ce scénario, toutes les sorties ont une corrélation négative avec les paramètres influents. Par exemple, la concentration à 200 m diminue lorsque α_1 ou r_u^{pas} augmente.

III.5.3 Analyse par paramètre

Dans cette partie nous présentons l'influence de chaque paramètre sur l'ensemble des scénarios de NO, NH_3, et Cl_2. L'analyse des résultats de scénarios HF, N_2 et n-hexane est présentée séparément dans la section suivante parce que pour les scénarios N_2 et n-hexane, les sorties de ces scénarios sont assez différentes par rapport aux autres produits. Dans les scénarios HF, nous avons fait varier l'humidité atmosphérique et donc, l'influence des paramètres est différente.

Nous présentons, pour chaque paramètre, sa signification, son rôle dans le calcul de la dispersion du nuage, son influence sur les sorties du modèle UDM et la corrélation du paramètre avec les sorties du modèle.

III.5.3.1 Influence du paramètre α_1

Le paramètre α_1 apparait dans le calcul d'E_{jet}. Cet entrainement se produit à cause de la différence entre la vitesse du nuage et la vitesse du vent selon l'équation suivante :

$$E_{jet} = (0.5 \cdot \pi^{-0.5} \cdot \alpha_1) \cdot P_{above} \cdot \rho_a \cdot \left| u_{cld} - u_a \cos\theta \right|$$

où, E_{jet} = débit d'entrainement « jet », $kg \cdot m^{-1} \cdot s^{-1}$

P_{above} = périmètre du nuage, m

ρ_a = densité de l'air, $kg \cdot m^{-3}$

θ = angle du nuage avec le sol, degré

u_{cld} = vitesse du nuage, $m \cdot s^{-1}$

u_a = vitesse du vent, $m \cdot s^{-1}$

Le débit d'entrainement E_{jet} est directement proportionnel à α_1. Le périmètre, P_{above}, est le périmètre du nuage au dessus du sol, qui diminue après que le nuage touche le sol.

Il est important de noter que nous avons fait varier les paramètres α_1, α_2 et C_{Da} de façon indépendante, alors qu'en vérité ces paramètres sont fortement corrélés entre eux ; en effet, il s'agit de valeurs tirées de la littérature, elles-mêmes tirées d'essais en grandeur nature. Il aurait été plus judicieux de considérer ce triplet de valeurs comme un seul paramètre discret, pouvant prendre les différentes valeurs proposées dans la littérature :

- Modèle de Spalding, qui est utilisé dans SAFETI v5.2 : α_1 = 0,11, α_2 = 0,23 et C_{Da} = 0,15
- Modèle de Morton, à partir de *Phast* v6.0 : α_1 = 0,17, α_2 = 0,35 et C_{Da} = 0
- Modèle de Morton, avec la suggestion d'Ooms (1972) : α_1 = 0,17, α_2 = 0,35 et C_{Da} = 0,13
- Modèle de Morton, avec la corrélation d'Ooms (1972) (qui inclut un terme supplémentaire $cos(\theta)$ pour l'entrainement « crosswind ») : α_1 = 0,17, α_2 = 0,43 et C_{Da} = 0,13

Le manuel de vérification d'UDM (Chapitre 3, DNV, 2005) montre une analyse de sensibilité conduite par DNV sur ces trois paramètres avec les quatre jeux de valeurs de $\{\alpha_1, \alpha_2, C_{Da}\}$ pour comparer leur influence sur la dispersion. La comparaison est faite avec les données expérimentales et le calcul par les autres corrélations pour les produits de type gaz neutre et gaz léger (méthane). À partir de la version 6.0 de *Phast*, les valeurs par défaut de α_1, de α_2 et de C_{Da} sont respectivement égales à 0,17, 0,35 et 0 car ce jeu de valeurs permet de bien représenter les résultats obtenus avec la corrélation empirique de Pratte et Baines (UDM Verification Manual, Ch. 3, page 3.8). Cette comparaison est particulièrement bien calée pour un rejet avec la vitesse de rejet élevée où la précision de calcul est plus importante. En effet, avec une vitesse de rejet moins élevée, la phase jet (entrainement « jet » et « crosswind ») ne sera pas dominante pendant longtemps et la phase passive devient dominante plus tôt (plus près du point de rejet).

On constate une influence forte du paramètre en champ proche et pour la plupart des rejets horizontaux, comme le montre la Figure III.20. Dans le champ proche, la vitesse de rejet est assez élevée (environ 105 $m{\cdot}s^{-1}$ pour le chlore, 144 $m{\cdot}s^{-1}$ pour l'ammoniac et environ 500 $m{\cdot}s^{-1}$ pour NO, *cf.* Tableau III.28) par rapport à la vitesse du vent (entre 3 $m{\cdot}s^{-1}$ et 10 $m{\cdot}s^{-1}$) et donc, l'entrainement « jet » est un phénomène dominant. L'entrainement « jet » devient moins important quand la vitesse du nuage diminue au cours de la dispersion, ce qui explique l'influence faible de α_1 sur la sortie *C1k* et généralement nulle sur la sortie *C10k*. Cette tendance est observée dans la plupart des scénarios horizontaux et pour ces trois produits (*cf.* Figure III.21).

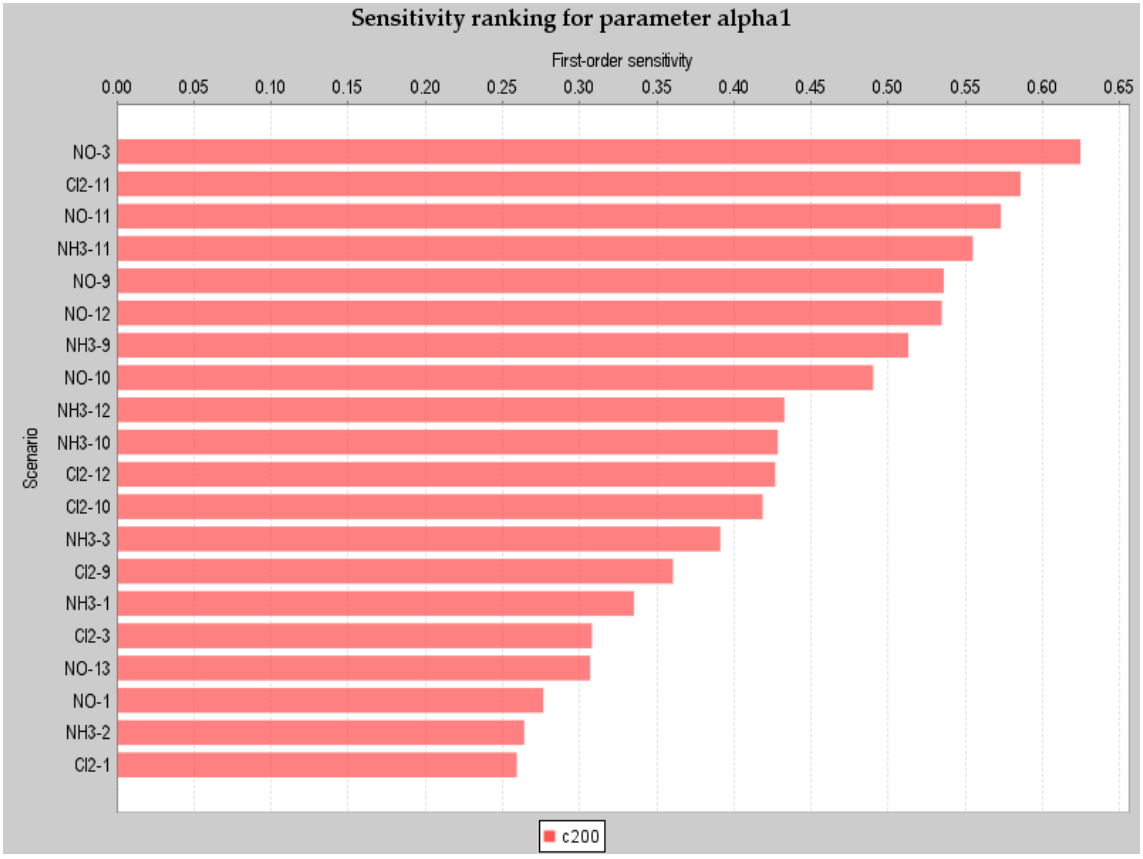


Figure III.20 Classement des scénarios selon l'influence de alpha1 sur la sortie C200

En examinant le classement des scénarios pour les trois produits NO, NH_3 et Cl_2, selon l'influence de α_1 sur la sortie *C200*, on observe que α_1 est plus influent pour les scénarios avec le débit de rejet élevé (scénarios n° 9, 10, 11, 12), à l'exception du scénario NO-3. L'influence très élevée de α_1 pour le scénario NO-3 peut s'expliquer par les caractéristiques spécifiques de ce scénario : conditions météorologiques stables F3, rejet horizontal près du sol et donc la différence (u_{cld} – u_a) est importante. Pour ces trois produits, les scénarios n° 1 et 3 (rejet horizontal près du sol) sont aussi apparents dans la Figure III.20 avec une influence de α_1 assez importante sur la sortie *C200*. Ces résultats permettent de conclure que le paramètre α_1 est très influent pour les rejets horizontaux et près du sol.

L'influence de α_1 dans le champ moyen (sur la sortie *C1k*) est plus importante pour les scénarios NO par rapport aux autres produits, comme le montre la Figure III.21. Cette influence assez élevée dans le champ moyen pour les scénarios NO est due à la vitesse de rejet très élevée par rapport aux deux autres produits.

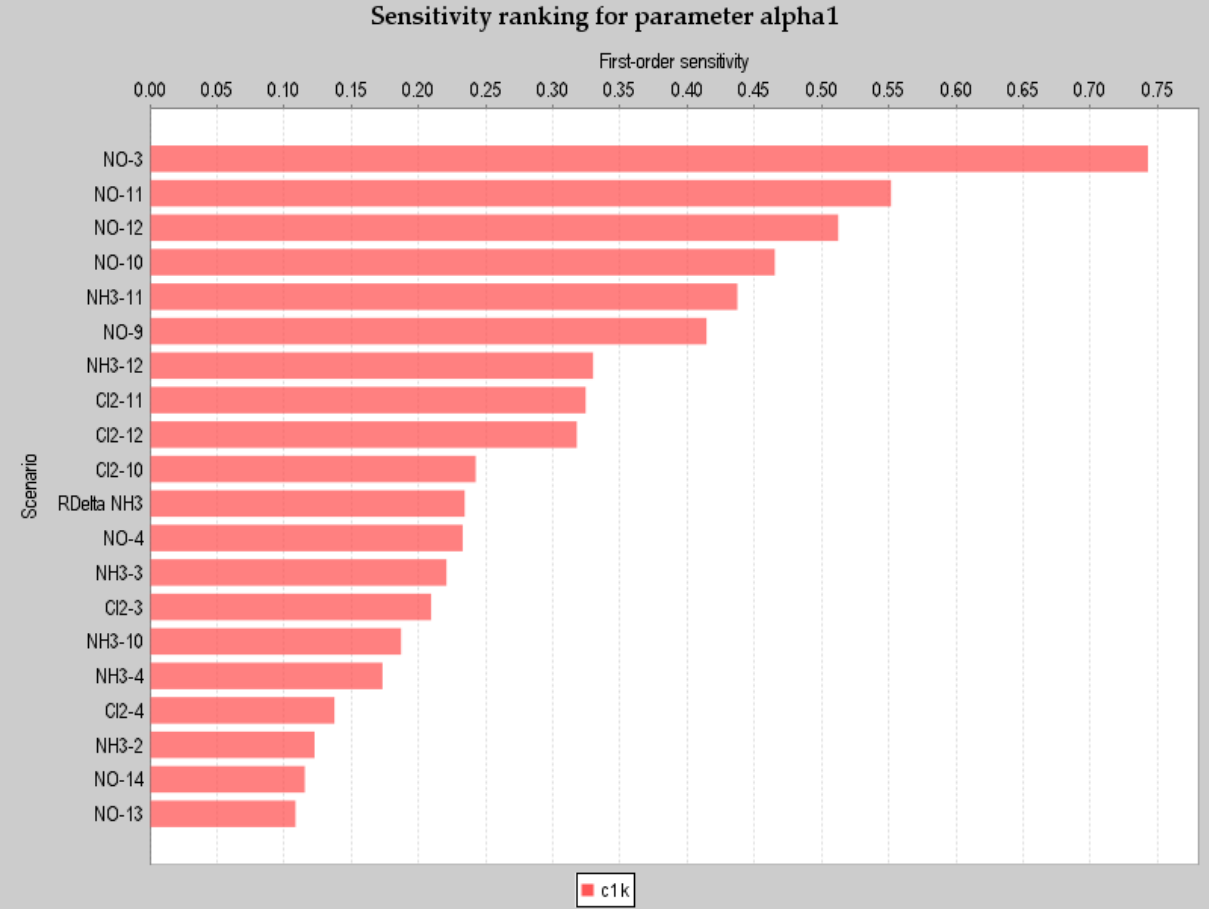


Figure III.21 Classement des scénarios selon l'influence de alpha1 pour la sortie C1k

Dans le champ lointain (pour la sortie *C10k*), l'influence de α_1 est très faible (S_i < 0,1), sauf pour les scénarios NO-11 (S_i = 0,53) et NO-12 (S_i = 0,35).

Quand le paramètre α_1 est influent, la corrélation linéaire entre α_1 et les sorties est toujours négative (c'est-à-dire la concentration diminue avec l'augmentation de α_1), sauf pour les rejets verticaux du NO (c'est-à-dire pour les scénarios NO-5, NO-6, NO-7, NO-8, NO-13, NO-14, NO-15 et NO-16). Dans ces cas, en augmentant α_1, le débit d'entrainement

« jet » augmente, et, dans le champ proche, la profondeur du nuage augmente. A cause de cela, la concentration à 200 m (qui est évaluée à Z = 1,5 m) augmente. Avec une faible valeur de α_1, le nuage gazeux de NO reste largement au dessus du sol car l'entrainement jet devient négligeable.

Cette corrélation linéaire positive entre α_1 et *C200* n'est pas observée pour les scénarios NH_3 et Cl_2, parce que ces deux produits sont rejetés à une vitesse de rejet moins élevée que celle de NO et que dans le champ proche, ils se comportent comme un nuage dense et arrivent au sol très rapidement et donc la concentration au sol diminue toujours en augmentant l'entrainement « jet » (α_1).

III.5.3.2 Influence du paramètre α_2

Le paramètre α_2 apparait dans le calcul d'E_{cross} (UDM Theory Manual, page 33). Cet entrainement apparait à cause des mouvements du nuage dans la direction Z (perpendiculaire au vent). Cet entrainement, dit « crosswind », est associé à la formation de tourbillons pendant les mouvements ascendant et descendant du nuage.

$$E_{cross} = \alpha_2 \cdot \rho_a \cdot P_{above} \cdot \left| u_a \sin\theta \right|$$

Lorsque le rejet est horizontal, E_{cross} est nul alors que pour un rejet vertical E_{cross} est maximum.

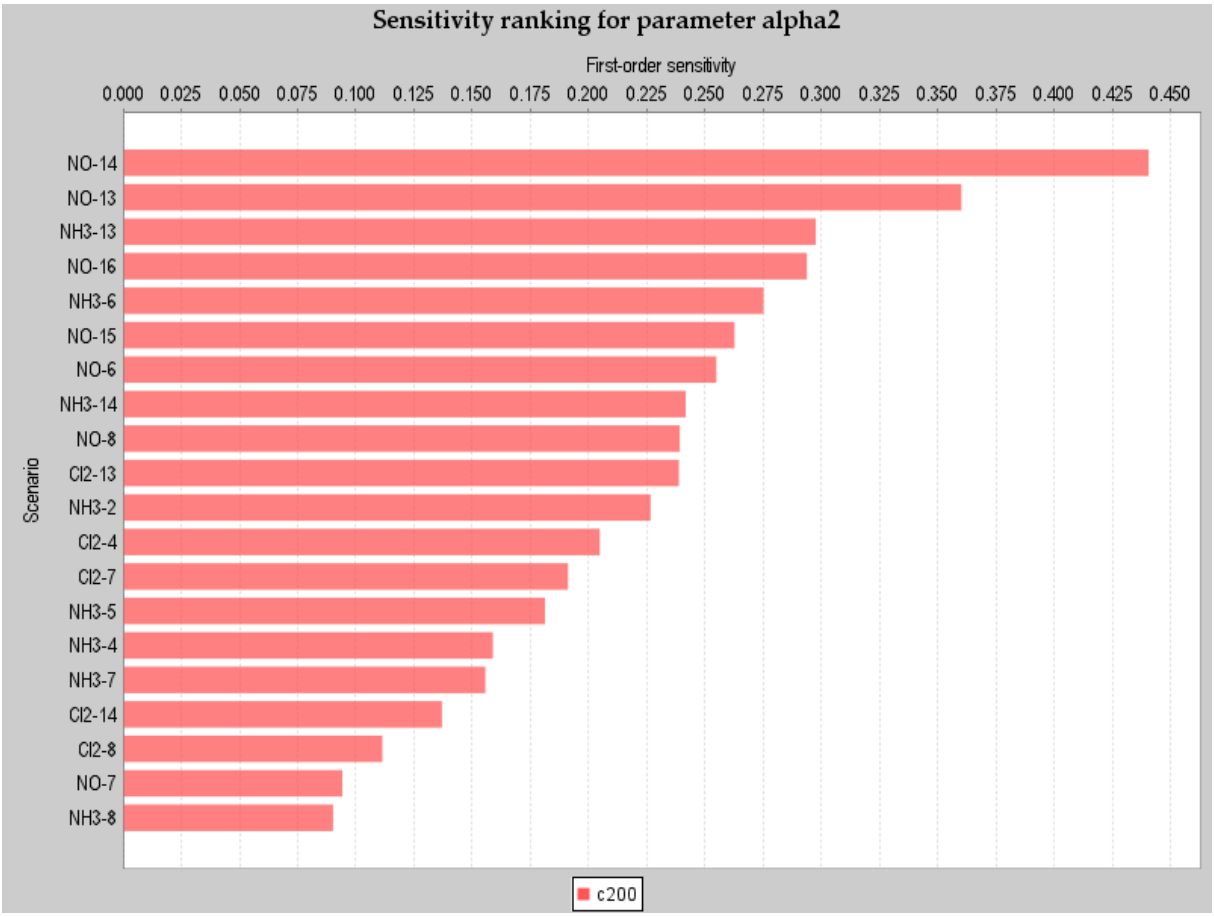


Figure III.22 Classement des scénarios selon l'influence de alpha2 sur la sortie C200

On constate l'influence plus ou moins importante de α_2 sur la sortie *C200* pour presque tous les scénarios de rejet verticaux (*cf.* Figure III.22). Un rejet vertical résulte en un jet qui monte et puis descend vers le sol. Pour certains scénarios horizontaux où le rejet se fait en hauteur (*ZR* = 20 m), le paramètre α_2 est aussi influent pour les gaz denses, comme par exemple pour les scénarios NH3-2 et NH3-4.

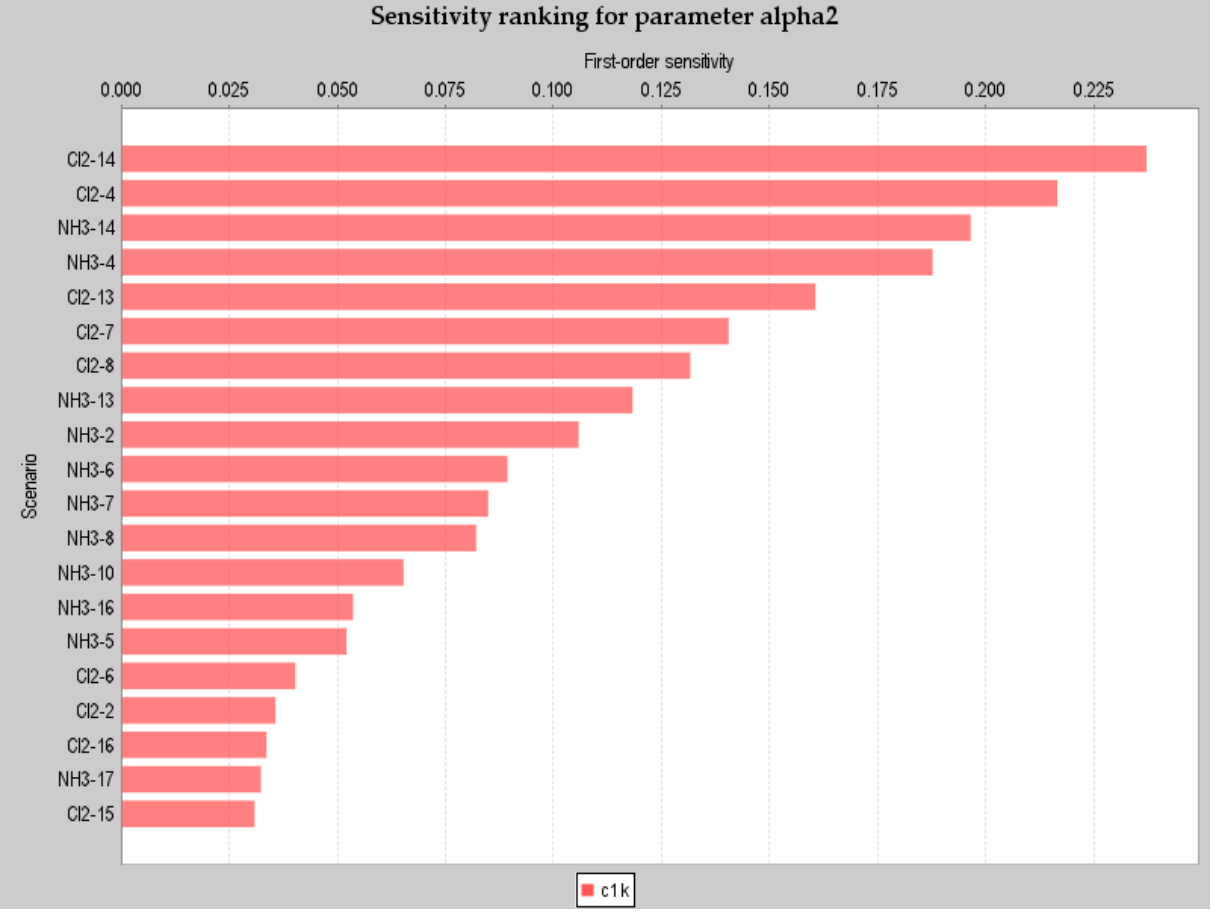


Figure III.23 Classement des scénarios selon l'influence de alpha2 sur la sortie C1k

L'influence de α_2 est très faible (S_i < 0,02) pour les scénarios NO à cause du comportement passif du nuage gazeux. Mais pour les scénarios NH_3 et Cl_2, α_2 est influent jusqu'au champ moyen (*cf.* Figure III.23), tout particulièrement pour les rejets verticaux avec le débit fort et les rejets horizontaux avec *ZR* = 20 m. L'influence de ce paramètre devient nulle (S_i < 0.075) dans le champ lointain pour tous les scénarios.

La corrélation entre α_2 et les sorties est toujours négative, sauf pour les rejets verticaux du NO, comme cela a été expliqué pour le paramètre α_1.

III.5.3.3 Influence du paramètre C_{Da}

Le paramètre C_{Da} intervient dans le calcul de la force de trainée entre le nuage et l'air, F_{drag}^{air}, qui est perpendiculaire à la droite qui relie les centres du nuage (*cf.* UDM Theory Manual, page 43). Pendant la phase de jet, la force de trainée F_{drag}^{air} entre le nuage et l'air est proportionnelle au coefficient de traînée, C_{Da} selon l'équation suivante :

$$F_{drag}^{air} = C_{Da} \cdot P_{above} \cdot \rho_a \cdot (u_a \cdot \sin\theta)^2$$

La valeur par défaut de C_{Da} dans *Phast* est égale à 0, ce qui annule (néglige) la contribution de cette force.

On constate une influence de ce paramètre en champ proche (la sortie *C200*, Figure III.24) et moyen (la sortie *C1k*, Figure III.25) pour les scénarios NO (rejet en phase gaz) et pour les rejets verticaux. Cette influence devient quasi-nulle en champ lointain car θ devient égal à 0 (axe du nuage est horizontal). Cela explique l'influence faible ou nulle de ce paramètre pour les scénarios horizontaux (tous les produits) et les rejets biphasiques avec un nuage plus lourd que l'air (NH_3, Cl_2), qui arrive au sol très rapidement.

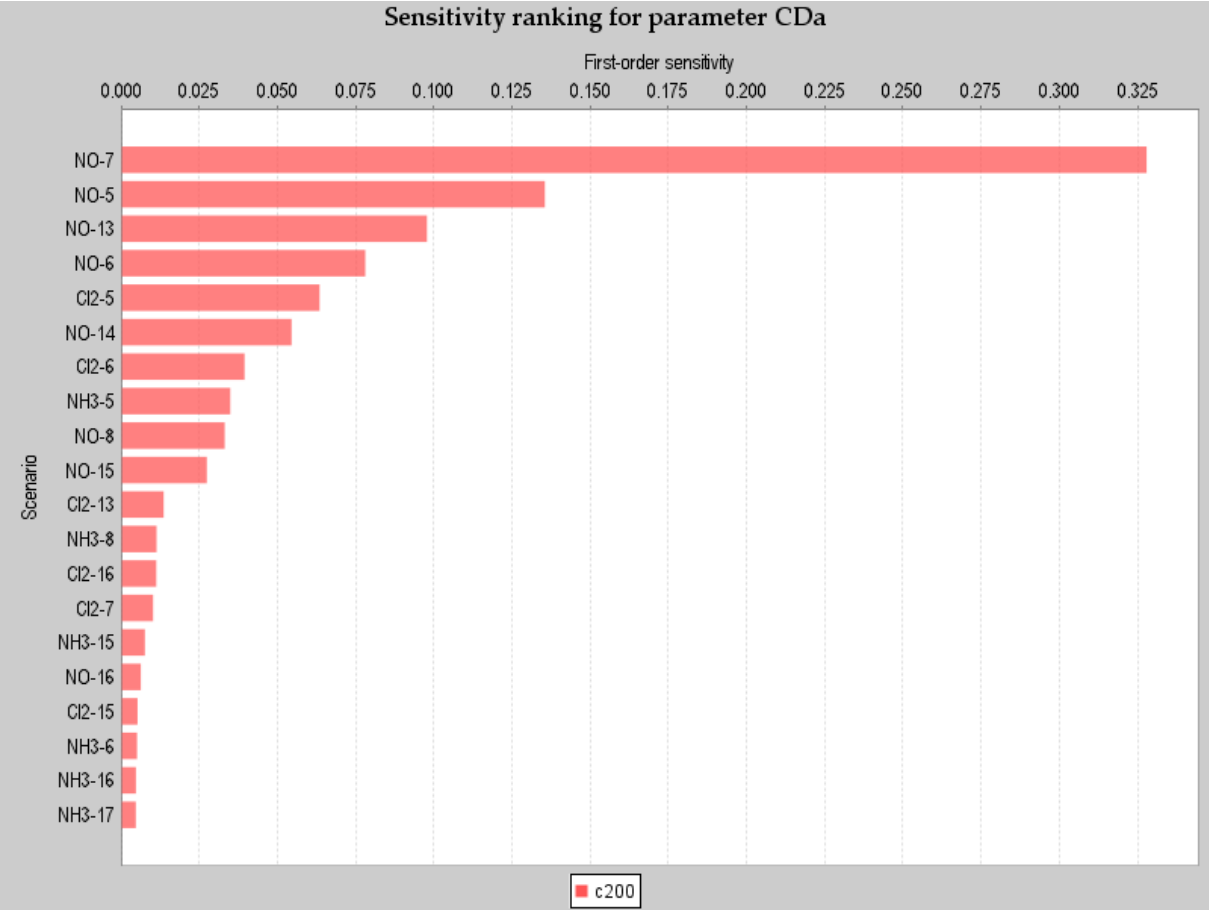


Figure III.24 Classement des scénarios selon l'influence de C_{Da} sur la sortie C200

Sur la Figure III.24, on constate que C_{Da} est influent sur *C200* pour le scénario NO-7 (rejet vertical, près du sol et F3) car la valeur de P_{above} est importante (par rapport à un nuage qui touche le sol dans le champ proche) et sinθ est supérieur à 0. En revanche, pour les rejets horizontaux (qui ne sont pas présents dans la Figure III.24), C_{Da} n'est pas influent notamment à cause de $\sin\theta$ qui est nul.

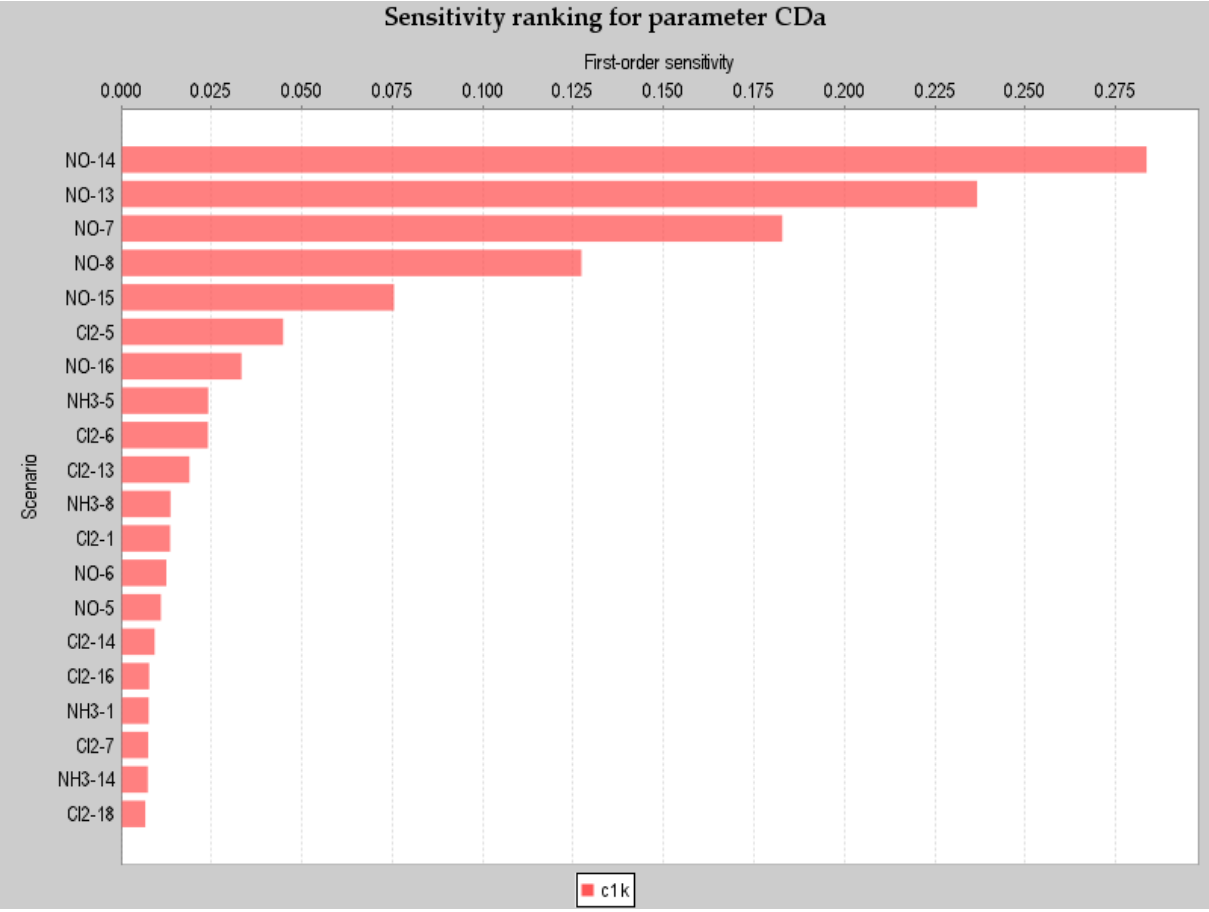


Figure III.25 Classement des scénarios selon l'influence de C_{Da} sur la sortie C1k

La Figure III.26 montre la vue de côté du nuage de NO pour le scénario NO-7 (Q1 θ90 F3 ZR1) avec la valeur de C_{Da} égale à 0 (valeur par défaut dans *Phast*) et la Figure III.27 montre le nuage du NO pour le même scénario avec C_{Da} = 1. On constate que dans le cas où C_{Da} = 1, la concentration dans le champ proche à Z = 1,5 est supérieure à celle dans le cas où C_{Da} = 0. Le nuage devient moins profond quand la valeur de C_{Da} = 1 par rapport au cas où C_{Da} = 0.

Pour un rejet en phase gaz, vertical mais en hauteur (ZR = 20 m), la concentration à 200 m n'est pas influencée par ce paramètre parce que la hauteur du nuage est assez élevée.

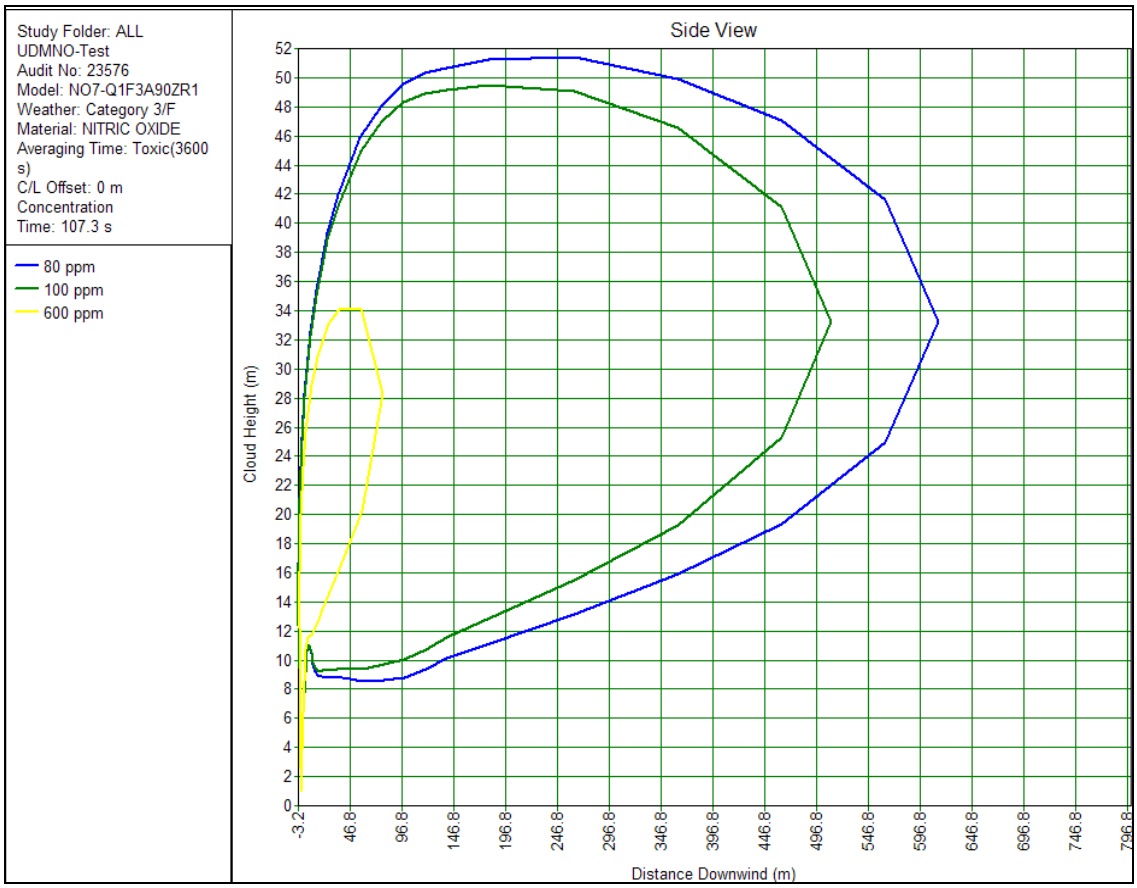


Figure III.26 Nuage du NO pour le scénario NO-7 avec C_{Da} = 0 (valeur par défaut)

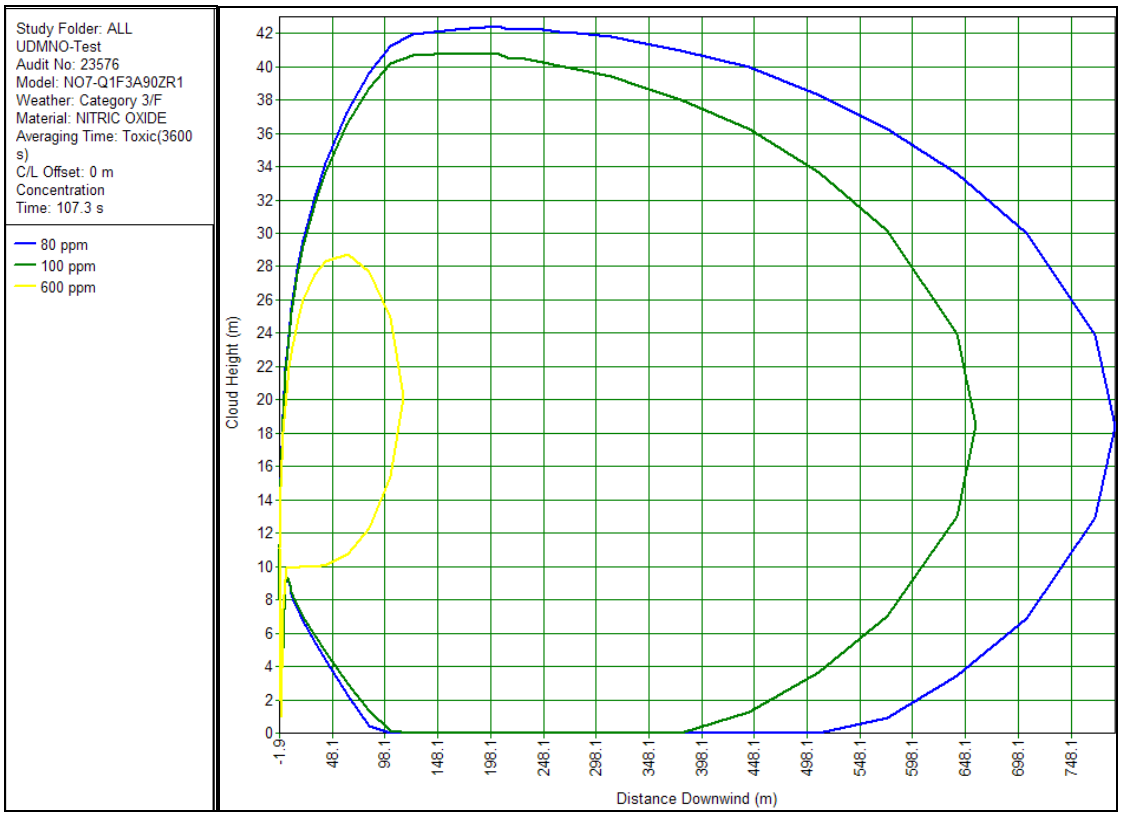


Figure III.27 Nuage du NO pour le scénario NO-7 avec C_{Da} = 1

Pour les scénarios de rejets verticaux, la corrélation linéaire entre C_{Da} et les sorties est toujours positive comme cela a été expliqué pour le scénario NO-7. La Figure III.28 montre l'ensemble des valeurs de *C200* en fonction de C_{Da}.

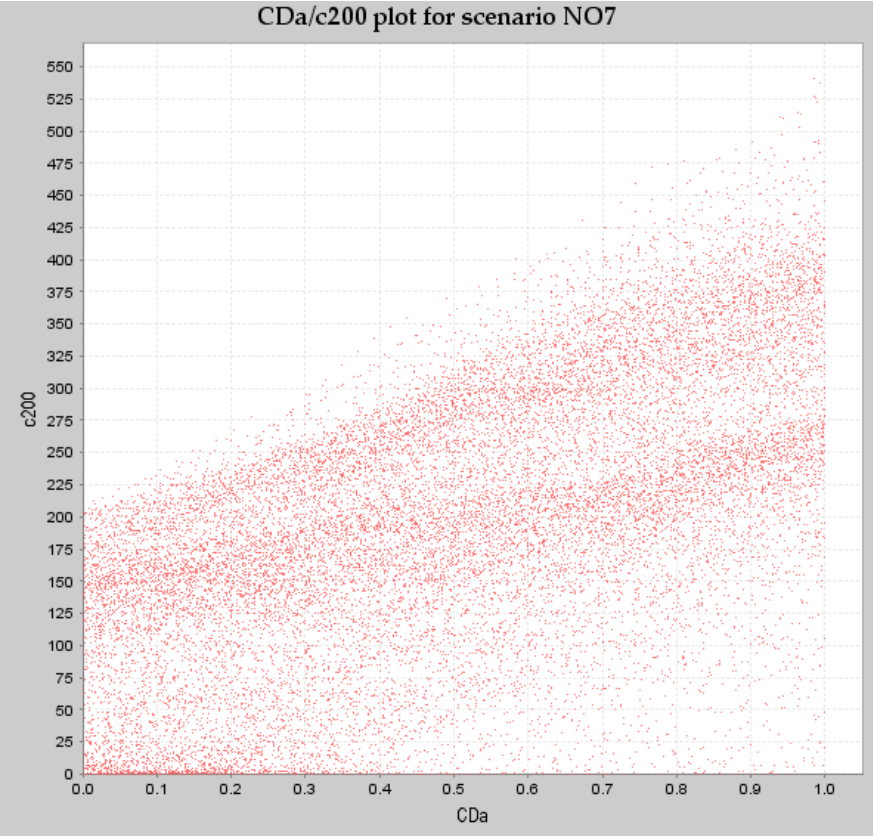


Figure III.28 « Scatter plot » de la C200 en fonction de C_{Da} pour le scénario NO-7

En outre, C_{Da} n'est pas influent sur la sortie *C10k* (S_i < 0,03) pour tous les scénarios.

III.5.3.4 Influence du paramètre e_{pas}

Ce paramètre intervient dans le calcul de terme d'entrainement passif dans le champ proche, E_{pas}^{nf}. Cet entrainement est créé par la turbulence ambiante. Il devient nul lorsque le centre du nuage touche le sol. On constate une influence principalement dans les scénarios impliquant du NO.

Le manuel de vérification d'UDM (Chapitre 3, DNV, 2005) compare les résultats de *Phast* (valeurs des paramètres par défaut) avec la corrélation de Briggs, qui montre que sans la prise en compte de cet entrainement, la hauteur du nuage (l'élévation du nuage) devient plus importante.

$$E_{pas}^{nf} = \left[1 - \frac{W_{gnd}}{R_y}\right] \cdot \pi \cdot \rho_a \cdot e_{pas} \cdot \varepsilon^{1/3} \cdot \left(l_y^{4/3} + l_z^{4/3}\right)$$

où, W_{gnd} = l'empreinte du nuage au sol, m

R_y = rayon du nuage selon la direction Y, m

ε = vitesse de dissipation de l'énergie cinétique, qui varie en fonction de la classe de stabilité, la vitesse de friction, la hauteur du nuage et la rugosité, $m^{-2} \cdot s^{-3}$

l_y et l_z = « Turbulent eddy length scale » (horizontal et vertical), qui varient en fonction de la classe de stabilité, la hauteur du nuage et la rugosité, m

Comme le montre la Figure III.29, ce paramètre est influent pour les scénarios n° 17 et 18 pour les trois produits, sauf NH3-18. Cette influence est due aux conditions météorologiques très instables (D9 et A3) et à la hauteur de rejet élevée (*ZR* = 20 m).

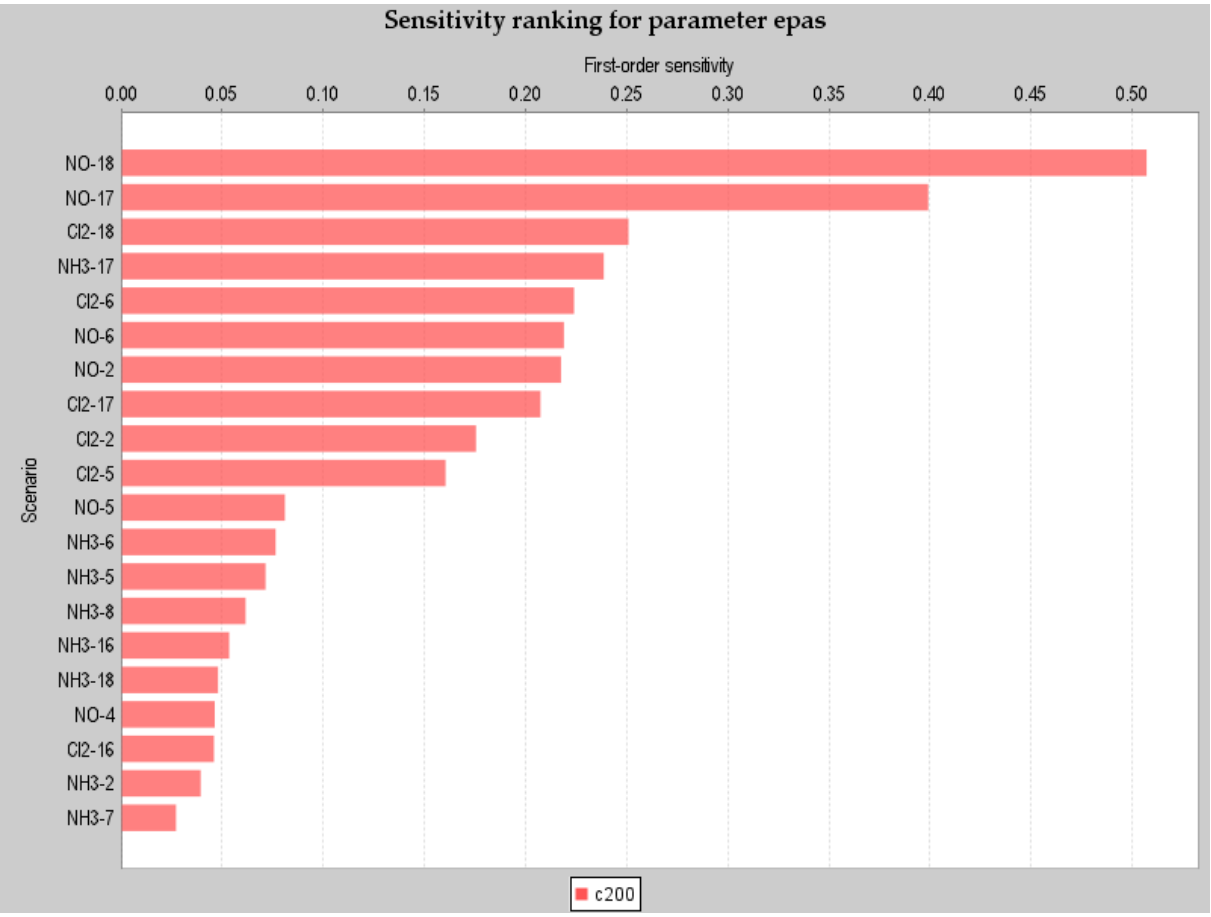


Figure III.29 Classement des scénarios selon l'influence de e_{pas} sur la sortie C200

L'influence de ce paramètre diminue pour la sortie *C1k* (*cf.* Figure III.30) et devient nulle (S_i < 0,045) pour la sortie *C10k*. L'influence de ce paramètre dans le champ moyen pour les rejets en hauteur est expliquée par le fait que le nuage touche le sol plus loin du point du rejet par rapport un rejet qui s'effectue près du sol, et donc la turbulence passive est un facteur important jusqu'au champ moyen.

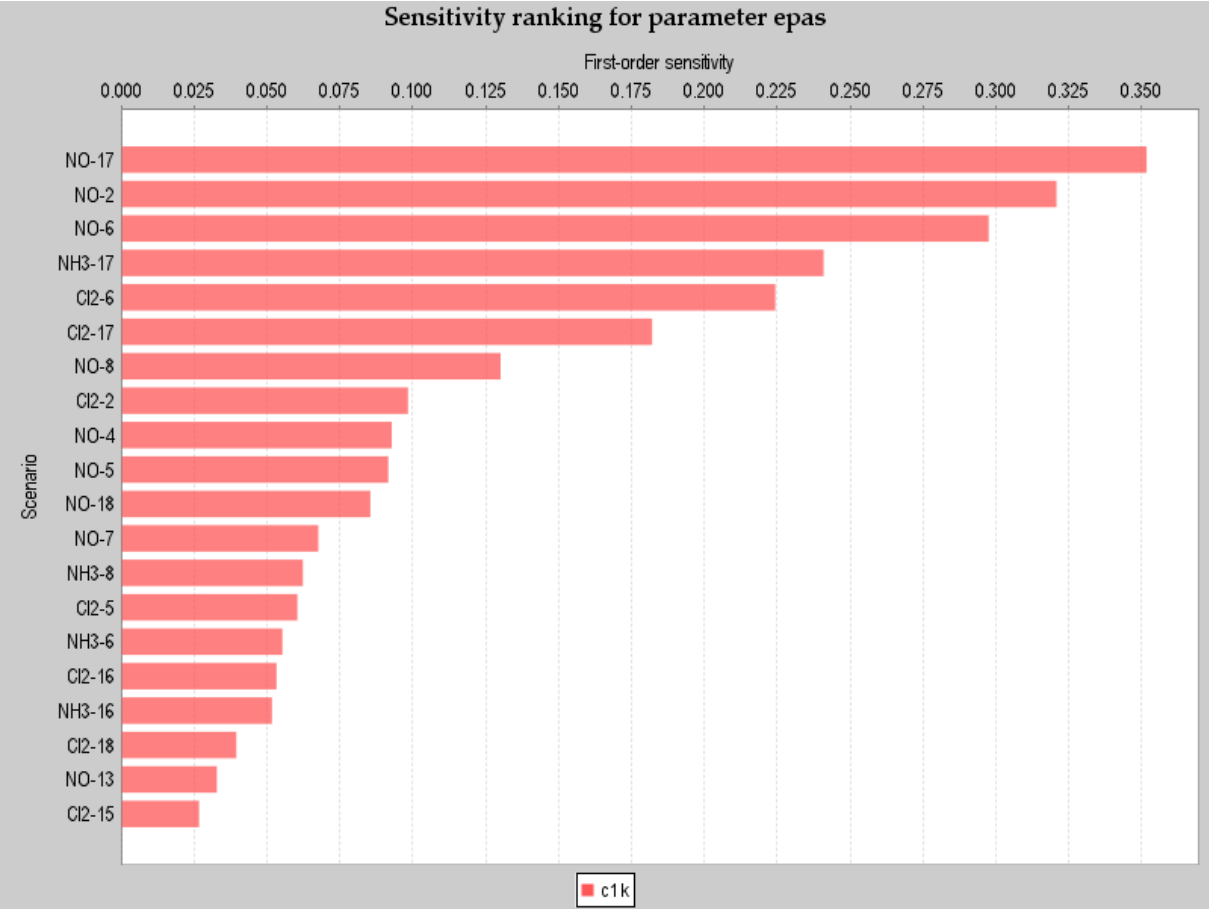


Figure III.30 Classement des scénarios selon l'influence de e_{pas} sur la sortie C1K

La corrélation linéaire entre e_{pas} et les sorties est toujours négative.

III.5.3.5 Influence des paramètres liés à la transition passive

Pour éviter la discontinuité entre les phases de dispersion, une phase de transition est introduite. Cette phase est étendue entre la distance x_{tr}^{pas}, et $x_{tr}^{pas} \cdot r_{tr}^{pas}$. Après la transition vers la phase passive, l'entrainement du nuage avec l'air est calculé par le mécanisme de l'entrainement d'air dans le champ lointain, E_{pas}^{ff}.

La distance que l'on définit comme le commencement de la phase de transition, x_{tr}^{pas} est atteinte lorsque les quatre conditions suivantes sont satisfaites simultanément. Lla quatrième condition relative au nombre de Richardson est appliquée seulement pour un nuage qui touche le sol :

a. la vitesse du nuage est assez proche de celle de l'air (dépend de r_u^{pas})
b. la densité du nuage est assez proche de celle de l'air (dépend de r_{ro}^{pas})
c. l'entrainement passif est assez proche de l'entrainement total (dépend de r_E^{pas})
d. le nombre de Richardson est assez petit (dépend de Ri_*^{pas})

Dans le cas du rejet de NO (gaz neutre), UDM modélise la dispersion du nuage avec un seul segment lorsqu'il n'y a pas de terme source secondaire. Pour les autres produits (NH_3, Cl_2, N_2, Hexane, HF), le rejet est effectué en phase liquide (ou biphasique), ce qui

peut entrainer la formation d'une flaque. *Phast* modélise l'évaporation de flaque comme un terme source à un débit variable et ce phénomène est modélisé en plusieurs segments (chaque segment correspond à un débit et une durée de rejet différents). La distance de transition est donc calculée pour chaque segment et dans ce cas, l'influence de ces quatre paramètres (r_u^{pas}, r_{ro}^{pas}, r_E^{pas}, Ri_*^{pas}) sur le comportement du nuage devient plus complexe.

a. Influence du paramètre r_u^{pas}

Le paramètre rupas intervient dans la condition qui compare la vitesse du nuage, u_{cld} à celle du vent, u_a. Elle est représentée par l'équation suivante :

$$\left| \frac{u_{cld}}{u_a} - 1 \right| < r_u^{pas}$$

Plus la valeur de r_u^{pas} choisie est petite, plus la valeur de u_{cld} doit être plus proche de la valeur de u_a pour satisfaire la condition ci-dessus. Pour les valeurs faibles de r_u^{pas}, la phase de jet sera dominante plus longtemps.

L'influence de ce paramètre sur la sortie *C200* est représentée dans la Figure III.31 pour tous les scénarios de NH_3, Cl_2 et NO.

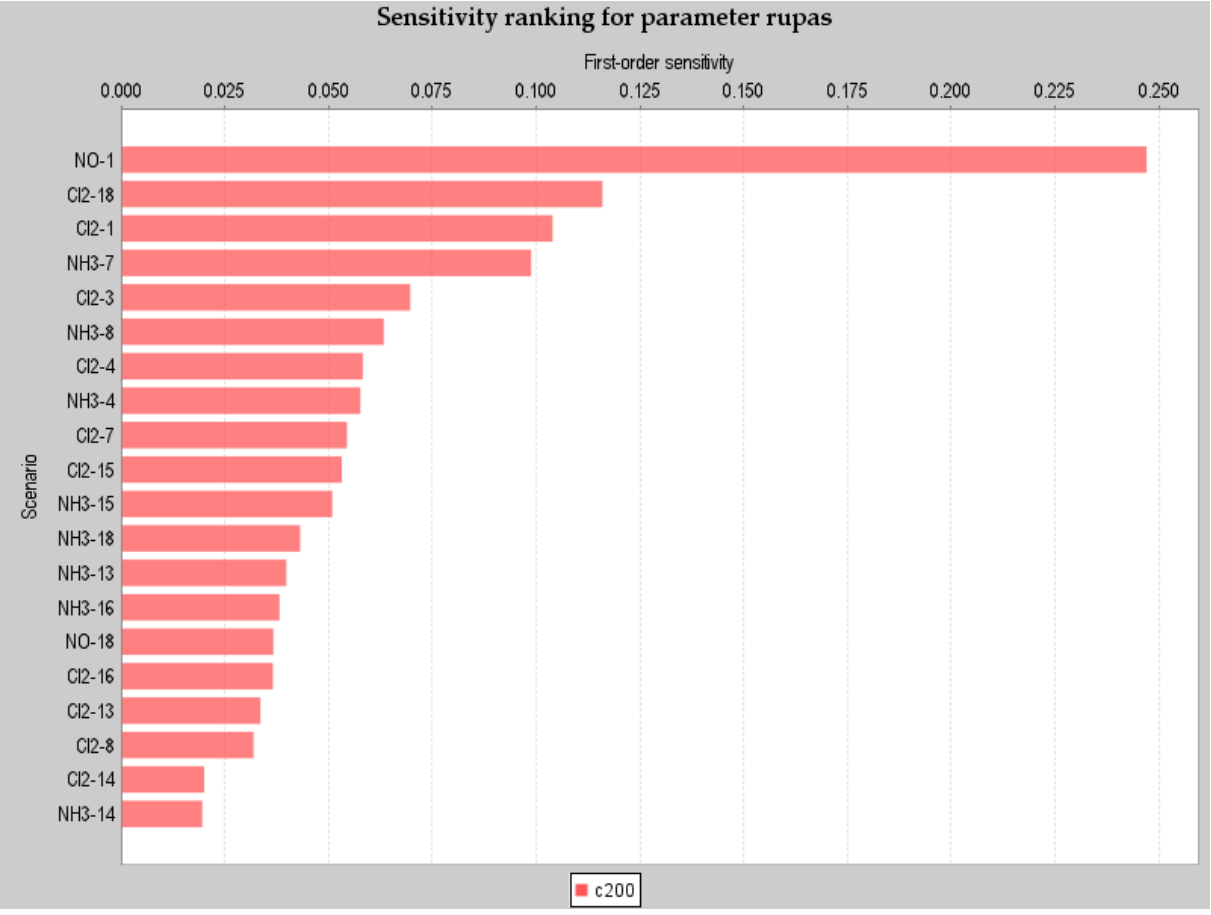


Figure III.31 Classement des scénarios selon l'influence de r_u^{pas} sur la sortie C200

Le rejet du NO (qui est un gaz neutre) se fait en phase gaz et la vitesse de rejet est élevée, donc le paramètre r_u^{pas} est influent sur la distance de transition.

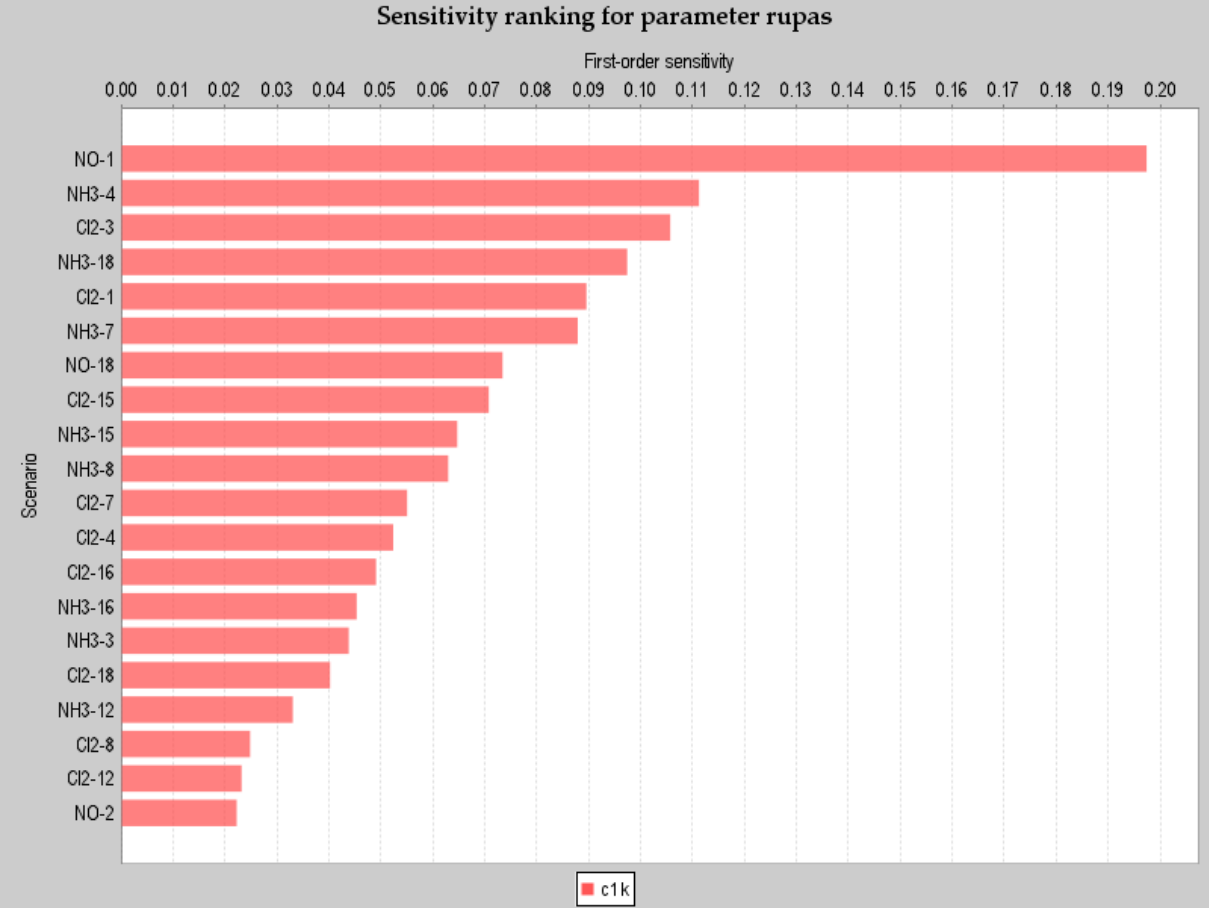


Figure III.32 Classement des scénarios selon l'influence de r_u^{pas} sur la sortie C1K

b. Influence du paramètre r_{ro}^{pas}

Ce paramètre n'est influent dans aucun des scénarios que nous avons étudiés.

c. Influence du paramètre r_E^{pas}

La définition de ce paramètre est décrite par l'inéquation suivante, qui dépend de la position du nuage :

$$\left|1-\frac{E_{pas}^{nf}}{E_{tot}}\right| < r_E^{pas}$$, pour un nuage élevé

$$\left|1-\frac{(E_{pas}^{nf}+E_{hvy})}{E_{tot}}\right| < r_E^{pas}$$, pour un nuage qui touche le sol ou commence à décoller

$$\left|1-\frac{E_{hvy}}{E_{tot}}\right| < r_E^{pas}$$, pour un nuage au sol

On note que ce paramètre est influent sur les sorties *C200* (Figure III.33) et *C1k* (Figure III.34), pour les scénarios de rejets verticaux en hauteur (*ZR* = 20 m).

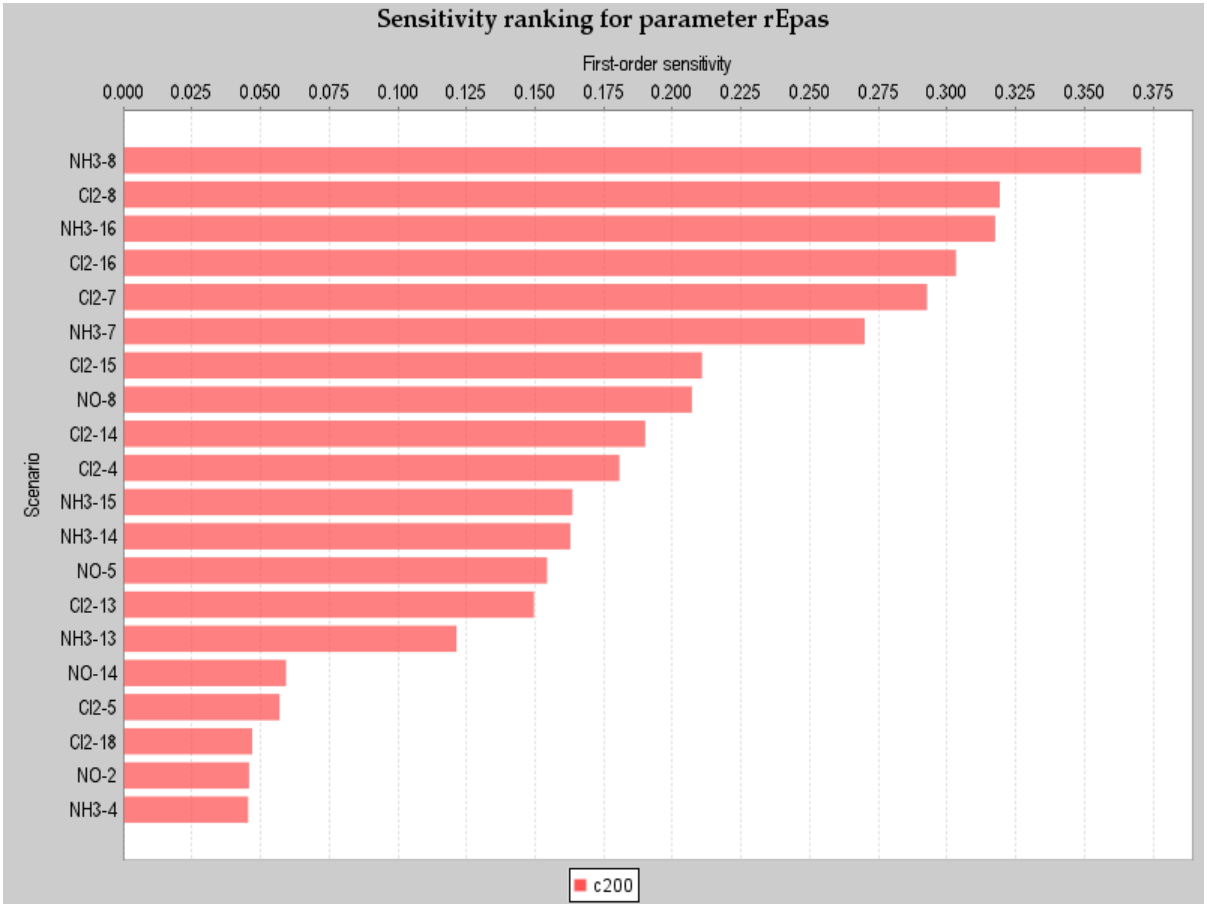


Figure III.33 Classement des scénarios selon l'influence de r_E^{pas} sur la sortie C200

Par exemple, pour un rejet élevé, quand la valeur de r_E^{pas} est élevée (proche de 1), la condition pour effectuer la transition est satisfaite même si la contribution de l'entrainement E_{pas}^{nf} (l'entrainement de type passif) est très faible par rapport aux autres types d'entrainement. La condition pour effectuer la transition passive est satisfaite plus tôt alors que le nuage est encore en phase jet, ce qui modifie considérablement le mécanisme de la dilution du nuage et donc la concentration en polluant. Dans un cas inverse, pour les très faibles valeurs de r_E^{pas}, cette condition sera satisfaite plus loin du point de rejet et donc la transition est repoussée dans la direction *X*, alors que le nuage se comporte déjà comme un nuage passif. La valeur par défaut de ce paramètre, 0,3 n'est toutefois pas justifiée dans *Phast*.

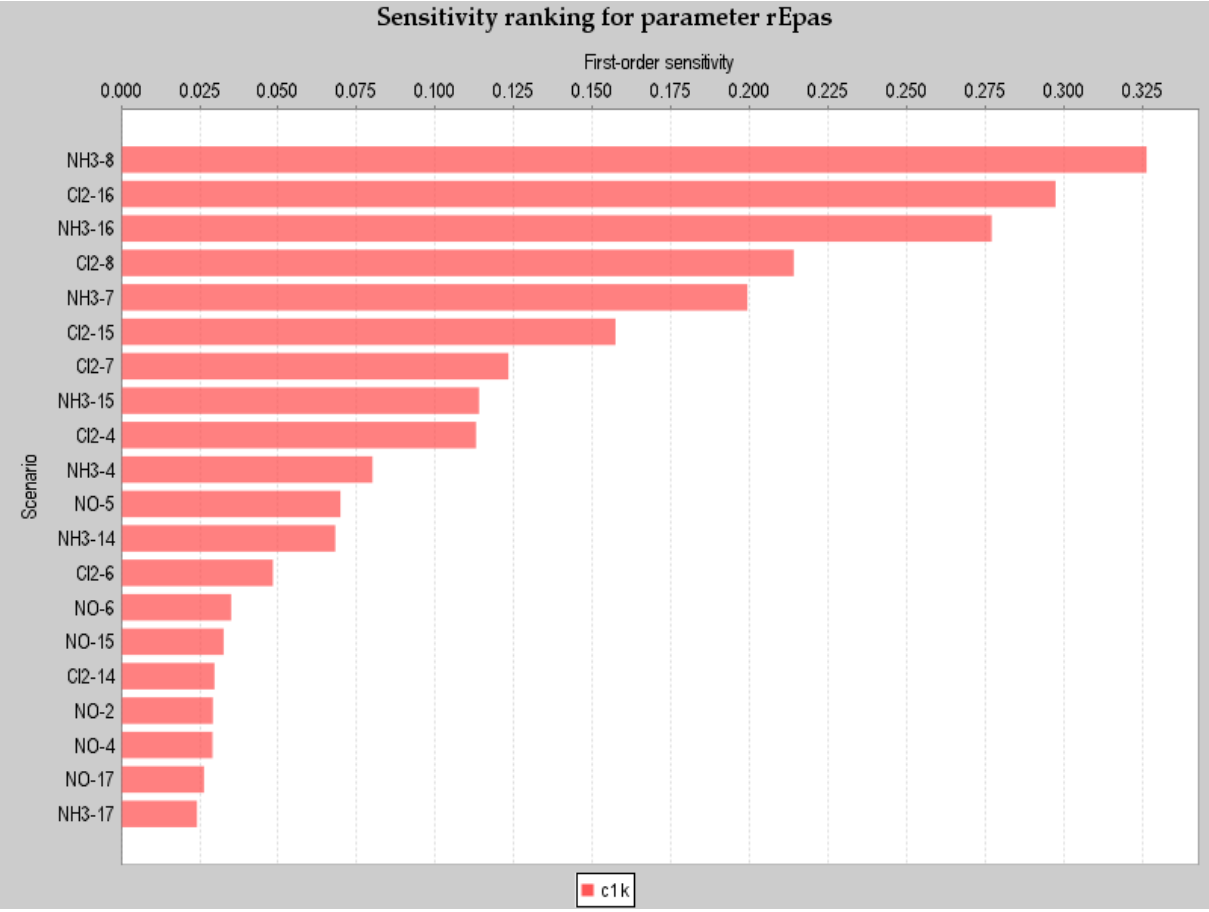


Figure III.34 Classement des scénarios selon l'influence de r_E^{pas} sur la sortie C1K

L'influence de ce paramètre sur la sortie *C10k* est faible (S_i < 0,03), sauf pour les scénarios NH3-16 (S_i = 0,116), Cl2-16 (S_i = 0,094) et NH3-8 (S_i = 0,094). L'influence très faible de ce paramètre pour les scénarios NO s'explique par le fait que la transition passive dépend davantage de r_u^{pas} que de r_E^{pas} pour ce gaz neutre. En effet, la dispersion de ce gaz ne comporte pas de phase dense, les trois conditions de transition passive sont toujours atteintes, et les paramètres correspondants n'ont aucune influence.

d. Influence du paramètre Ri_*^{pas}

Le nombre de Richardson est défini par l'équation suivante :

$$Ri = \frac{g \cdot [\rho_{cld} - \rho_a(z = z_{cld})] \cdot H_{eff}(1 + h_d)}{\rho_a \cdot u_*^2}$$

où, h_d = la fraction de la moitié inférieure du nuage qui est au dessus du sol (-)

H_{eff} = hauteur effective du nuage (m)

u^* = vitesse de friction du nuage ($m \cdot s^{-1}$)

La transition passive a lieu lorsque *Ri* est inférieur à Ri_*^{pas} (*critère d.*). La valeur par défaut de ce paramètre dans *Phast* est égale à 15. Elle a été choisie de façon à ce que la vitesse d'entrainement de l'air sur la face supérieure du nuage, u_{top}, au début de la transition soit au moins inférieure à la moitié de u_{top} dans la phase « gaz-dense ».

D'après le manuel théorique de UDM, le critère *d.* est pertinent uniquement lorsque le centre du nuage est au sol (phase « dense »).

D'après les résultats obtenus, on remarque que le paramètre Ri_*^{pas} n'est jamais influent sur la sortie *C200* (pas de phase dense dans le champ proche), mais il est relativement influent sur les sorties *C1k* (Figure III.35) et *C10k* (Figure III.36) notamment pour les produits avec un comportement de gaz lourd tels que NH_3 et Cl_2.

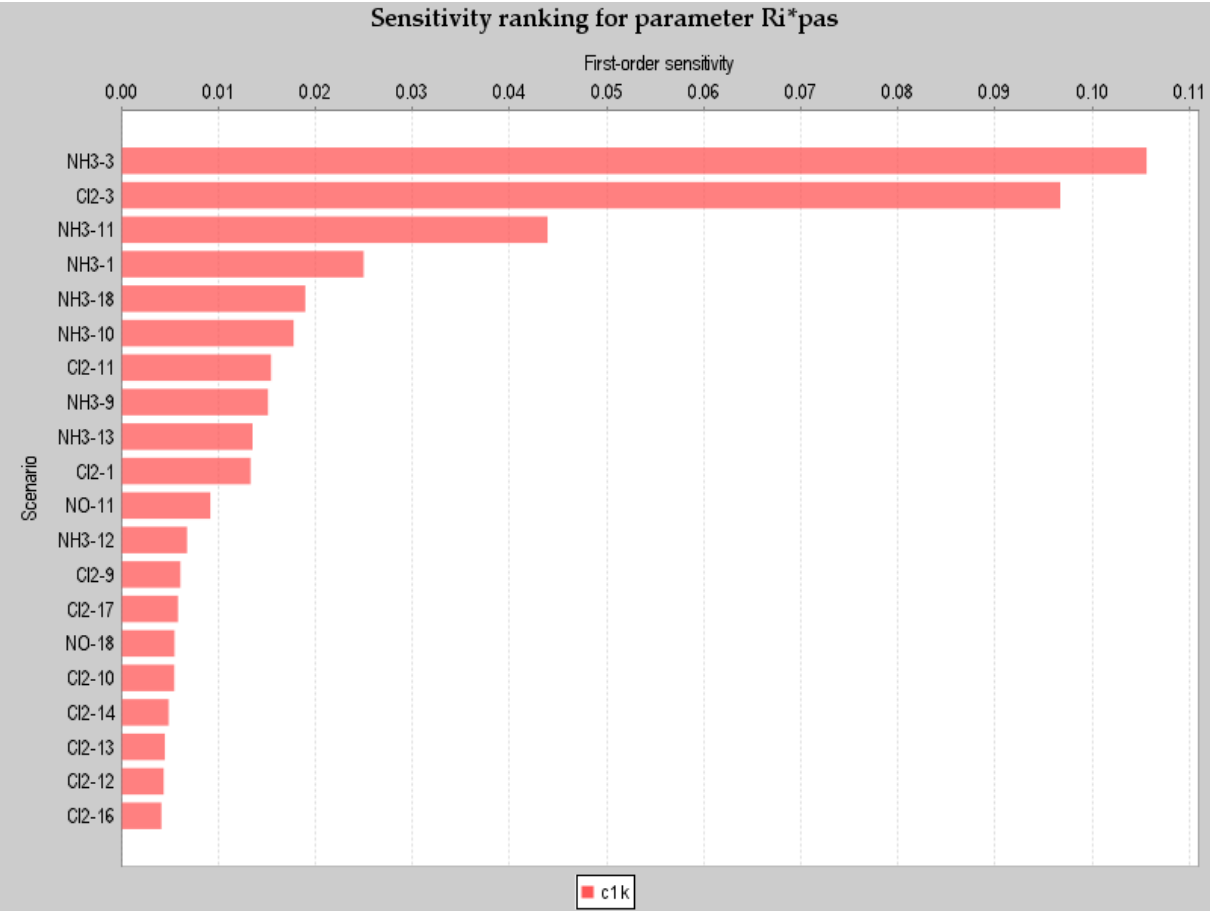


Figure III.35 Classement des scénarios selon l'influence de Ri_*^{pas} sur la sortie C1k

Sur la Figure III.35 et la Figure III.36 on voit que Ri_*^{pas} est influent principalement sur les scénarios n° 3, 11 et 12 de NH_3 et Cl_2 qui correspondent à un rejet horizontal et des conditions météos stables (F3). On ne s'explique toutefois pas pourquoi ce paramètre est influent uniquement pour ces scénarios.

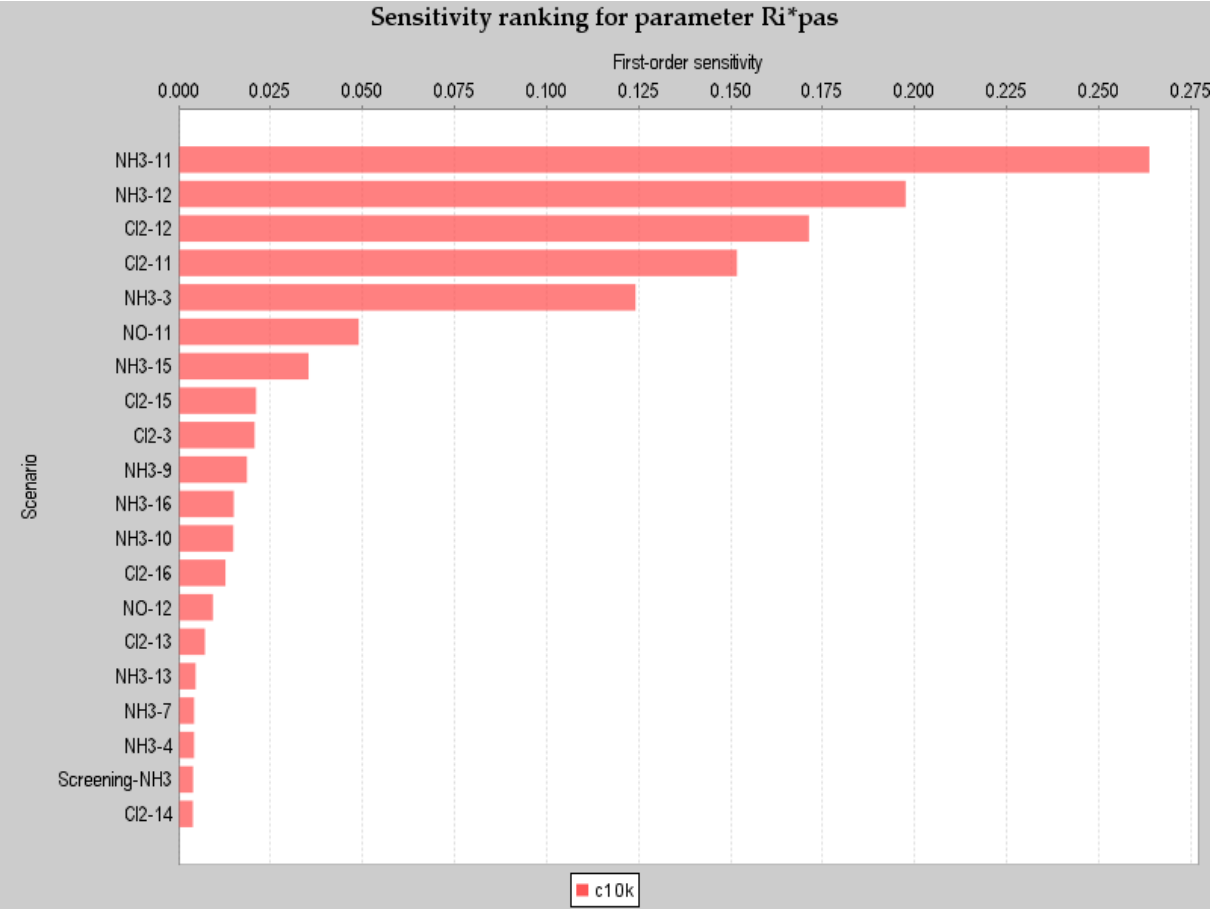


Figure III.36 Classement des scénarios selon l'influence de Ri_*^{pas} sur la sortie C10k

III.5.3.6 Influence du paramètre C_E

L'étalement du nuage pendant la phase "dense" est directement proportionnel au paramètre C_E comme expliqué dans le paragraphe I.2.5.2 e.

Comme le montre la Figure II.37, ce paramètre est plus influent pour les rejets biphasiques, notamment pour les scénarios de chlore et d'ammoniac avec un débit fort (par exemple NH3-9 et 10, Cl2-9 et 10) car il y a formation d'une flaque importante. L'influence de ce paramètre est plus importante sur C1k lorsque la phase dense se trouve dans le champ moyen car l'étalement du nuage dépend de ce paramètre.

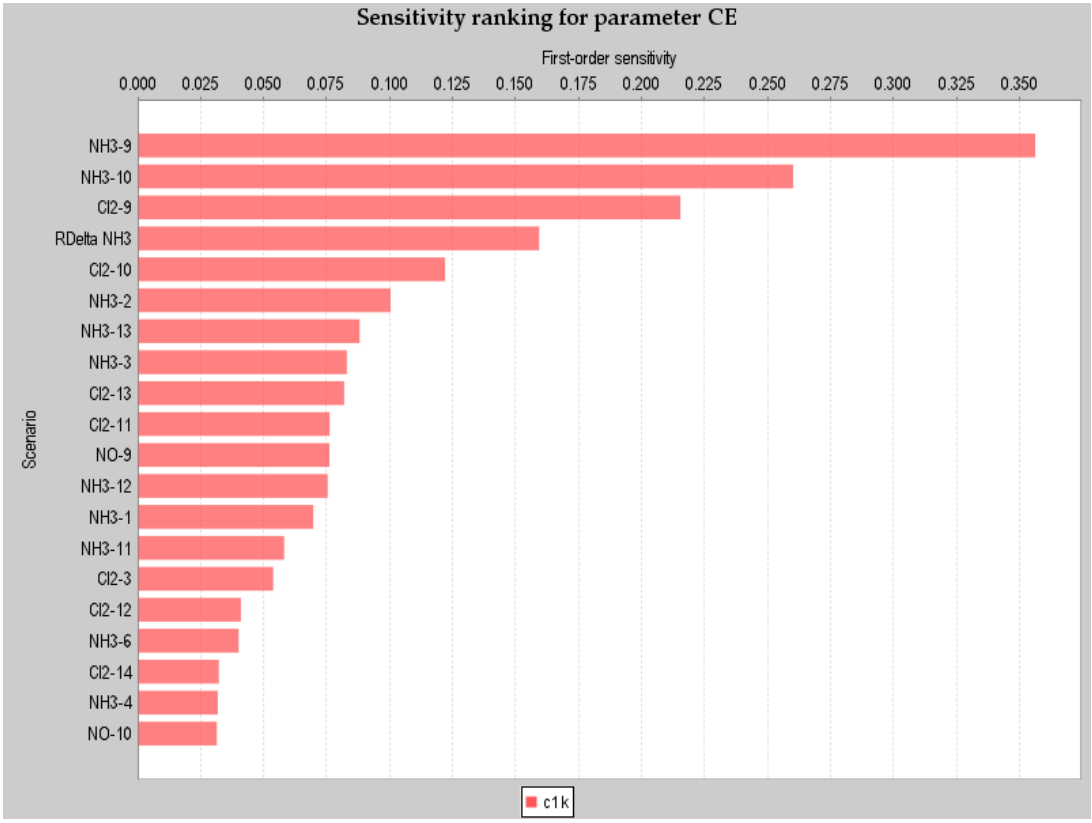


Figure III.37 Classement des scénarios selon l'influence de C_E sur la sortie C1k

III.5.3.7 Influence du paramètre W_p

On constate une influence du paramètre discret W_p principalement en champ lointain. Ce résultat s'explique par le fait qu'à 10 km du point de rejet, la dispersion est en phase passive, dans laquelle l'entrainement d'air dans le nuage est proportionnel à la vitesse du vent, qui varie en fonction de W_p.

Les concentrations mesurées à 10 km du point de rejet avec W_p = 1 (profil constant) sont toujours supérieures à celles calculées avec W_p = 2 (profil logarithmique, utilisé par défaut dans *Phast*) comme cela est montré sur l'histogramme de la Figure III.38.

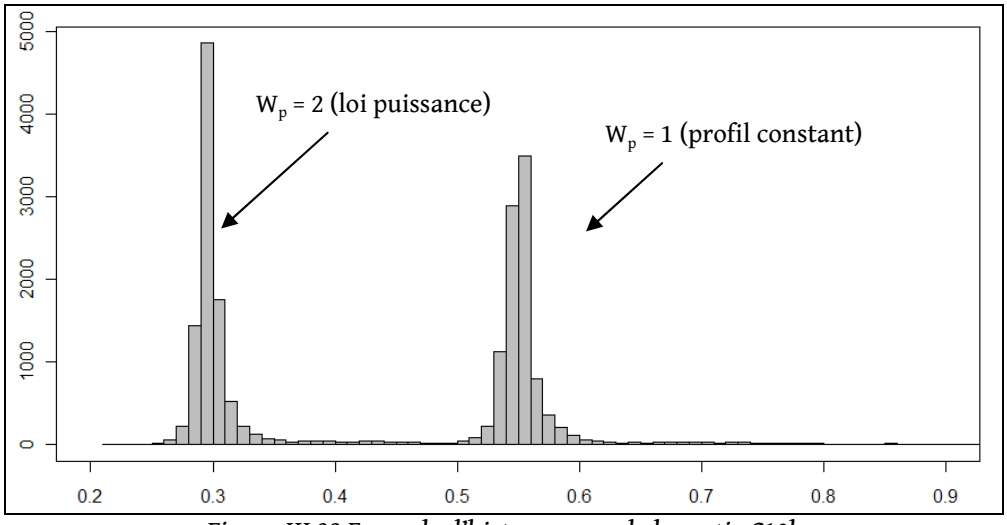


Figure III.38 Exemple d'histogramme de la sortie C10k

Les sorties sont évaluées à la hauteur Z = 1,5 m. La hauteur de référence de la vitesse du vent est Z = 10 m (par exemple U_a = 5 m/s à Z= 10 m). Donc, avec le profil W_p = 1, la vitesse du vent à Z = 1,5 m est toujours la même, 5 m/s; alors qu'avec le profil W_p = 2, la vitesse du vent est réduite à Z = 1,5 m selon la loi logarithmique (environ 3 m/s). Avec W_p = 2, la vitesse du vent est inférieure par rapport à ce qu'elle est quand W_p = 1, ce qui rend le débit d'entrainement d'air moins important et donc les concentrations plus élevées.

III.5.4 Analyse comparative par produit

Dans ce paragraphe, nous présentons un exemple de la comparaison des indices de sensibilité du 1er ordre pour les mêmes conditions de rejet (c'est-à-dire, le même numéro de scénario dans l'arbre) mais pour les différents produits sur une sortie donnée. Cette comparaison permet de montrer l'influence des paramètres quand les différents produits sont rejetés sous les mêmes conditions, par exemple un rejet horizontal, près du sol avec les conditions météorologiques D5. Toutefois, il faut noter que les débits de rejet et la composition du nuage pour chaque produit sont différents (*cf.* Tableau III.28).

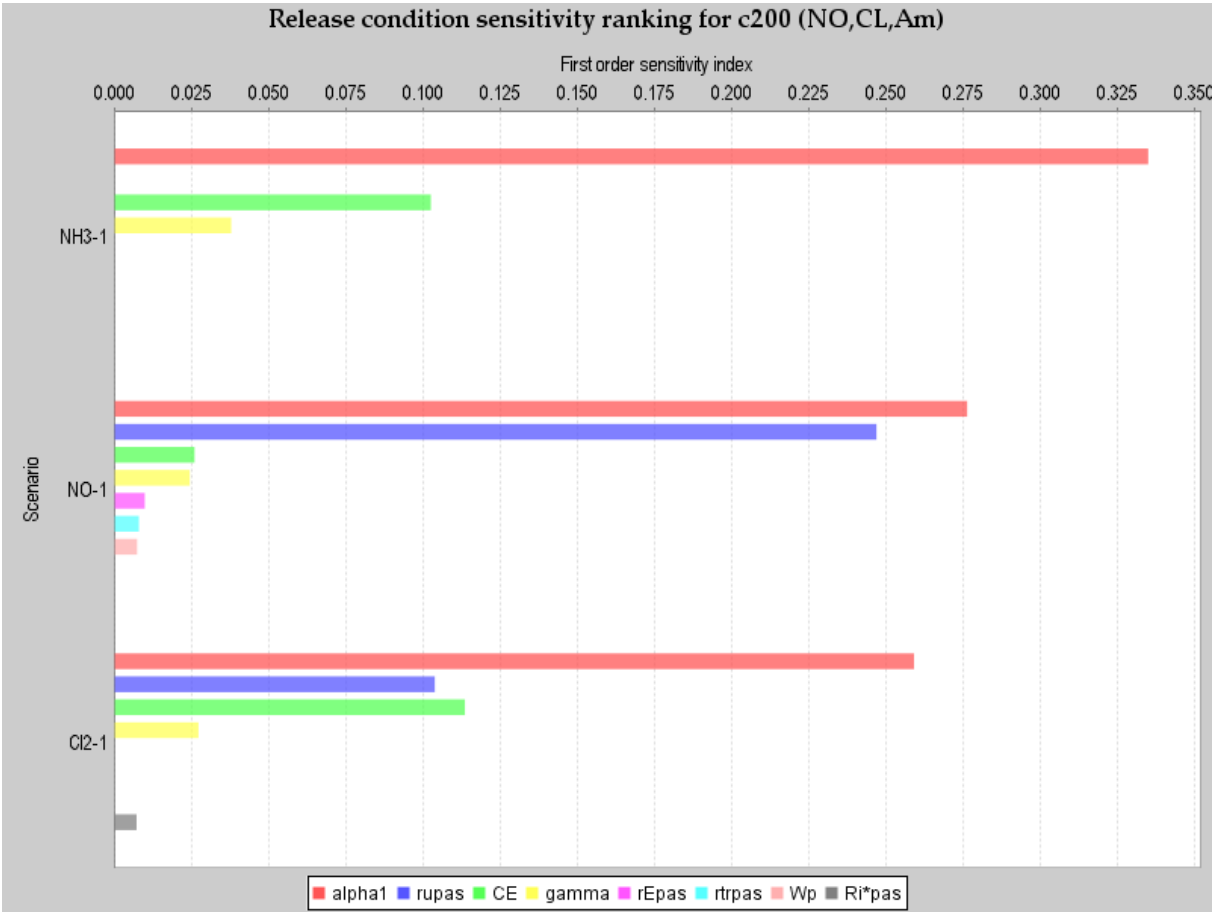


Figure III.39 Analyse comparative des scénarios 1 des produits NH_3, Cl_2 et NO pour la sortie C200

La Figure III.39 montre que dans le champ proche, le paramètre le plus influent (α_1) apparait pour les trois produits (NH_3, NO et Cl_2), mais l'influence du paramètre r_u^{pas} est assez élevée pour NO-1 (S_i environ 0,25), modérée pour Cl2-1 (S_i environ 0,1) et nulle pour NH3-1. L'influence du paramètre C_E (paramètre de l'étalement du nuage dans la direction Y, pendant la phase dense) est le même pour NH3-1 et Cl2-1, parce que dans ces deux rejets, le nuage se comporte comme un nuage dense.

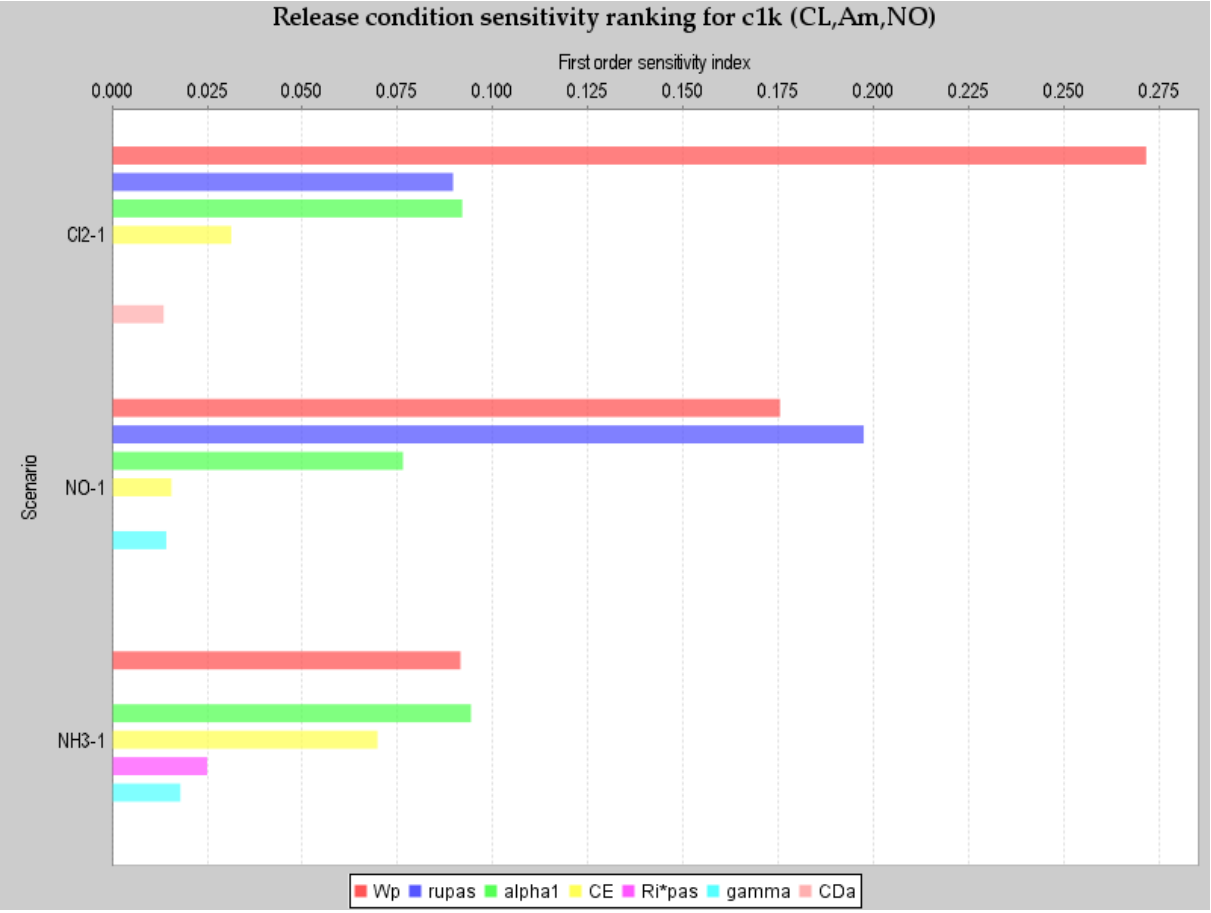


Figure III.40 Analyse comparative des scénarios 1 des produits NH_3, Cl_2 et NO pour la sortie C1k

La Figure III.40 montre la comparaison des scénarios 1 pour ces trois produits et pour la sortie C1k. Dans cette figure, on note que W_p a le plus d'influence sur Cl2-1, ce qui signifie que le nuage de Cl_2 est en phase passive. Pour le scénario NO-1, le nuage étant encore dans la phase de transition dans le champ intermédiaire, on met en évidence l'influence des deux paramètres W_p et r_u^{pas}.

La comparaison pour la sortie *C10k* révèle un seul paramètre influent, W_p, et on constate que pour les trois produits le nuage est en phase passive à 10 km.

III.5.5 Caractéristiques spécifiques de certains produits

Dans ce paragraphe, nous présentons les caractéristiques spécifiques pour les trois produits, HF, N_2 et n-hexane.

III.5.5.1 Scénarios HF

Le Tableau III.1 liste les scénarios de fluorure d'hydrogène (HF) étudiés. Les paramètres étudiés sont listés dans le Tableau III.30. Nous avons également fait varier le paramètre H_a (l'humidité atmosphérique) entre 0,01 et 1.

HF est stocké à l'état liquide sous pression de $2{,}5 \cdot 10^5$ Pa à la température de 25°C (Tableau III.28), ce qui correspond aux conditions de stockage couramment utilisées dans l'industrie. Ces conditions favorisent la génération de rejets dont la fraction liquide est de l'ordre de 0,96 (*cf.* Figure III.41), sans toutefois former de flaque, ce qui constitue une particularité du module HF de *Phast*. De plus, le module HF de *Phast* ne forme jamais de flaque lorsque la taille des gouttes est inférieure à 1 mm.

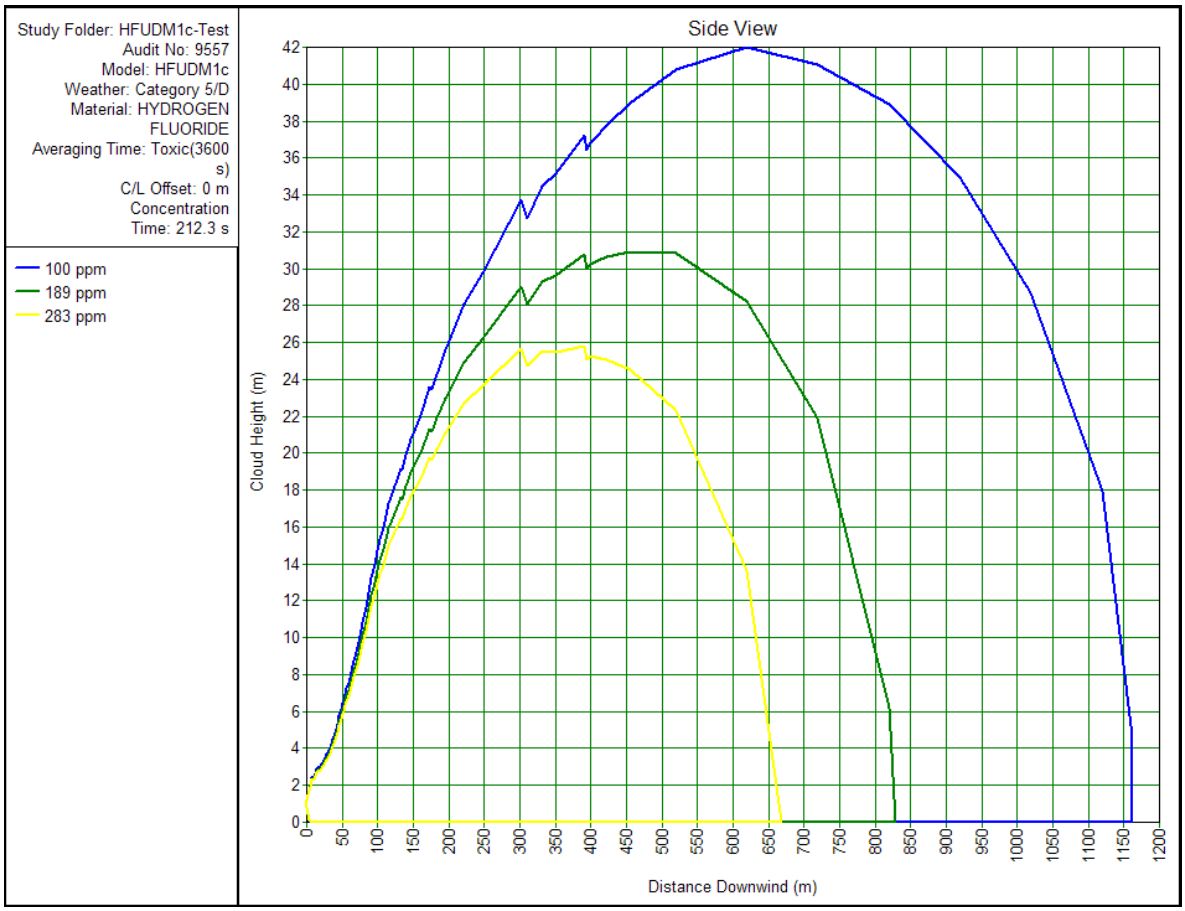


Figure III.41 Panache de HF correspondant au scénario n° 1(fraction liquide du rejet = 0,96, fraction de « rainout » = 0)

La particularité de ce produit est que, d'une part, il réagit avec la vapeur d'eau contenue dans l'air ce qui entraine la formation d'un brouillard et, d'autre part il se polymérise par le biais des liaisons hydrogène en formant des oligomères. Pour prendre en compte ces phénomènes, il existe dans *Phast* un modèle thermodynamique spécifique

à HF qui est basé sur le modèle « HGSYSTEM HF-Thermodyanmics » (HGSYSTEM Technical Reference Manual). Le modèle thermodynamique du mélange de l'HF avec la vapeur d'eau est basé sur l'étude réalisée par Schotte (1987). Le mélange d'HF avec la vapeur d'eau contient :

- dans la phase vapeur : monomère HF, dimère $(HF)_2$, hexamère $(HF)_6$, $(HF)_8$, le complexe $(HF{\cdot}H_2O)$, de l'eau et de l'air sec
- brouillard formé de monomère HF et d'eau

Le modèle HF dans *Phast* calcule la composition de ce mélange et sa température.

L'ensemble des résultats relatifs aux 10 scénarios HF sont dans l'*Annexe 2*. Nous rapportons dans ce paragraphe quelques résultats significatifs.

La Figure III.42 montre le classement des scénarios HF dans l'ordre décroissant des indices de sensibilité du 1er ordre pour le paramètre H_a et pour la sortie *C200*. On note que Ha est extrêmement influent pour les scénarios 5 et 6 (rejets verticaux et D5), moyennement influent pour les scénarios 2, 18 et 17 (rejets horizontaux en hauteur) et peu influent pour les scénarios 4 et 8 (rejets verticaux en hauteur).

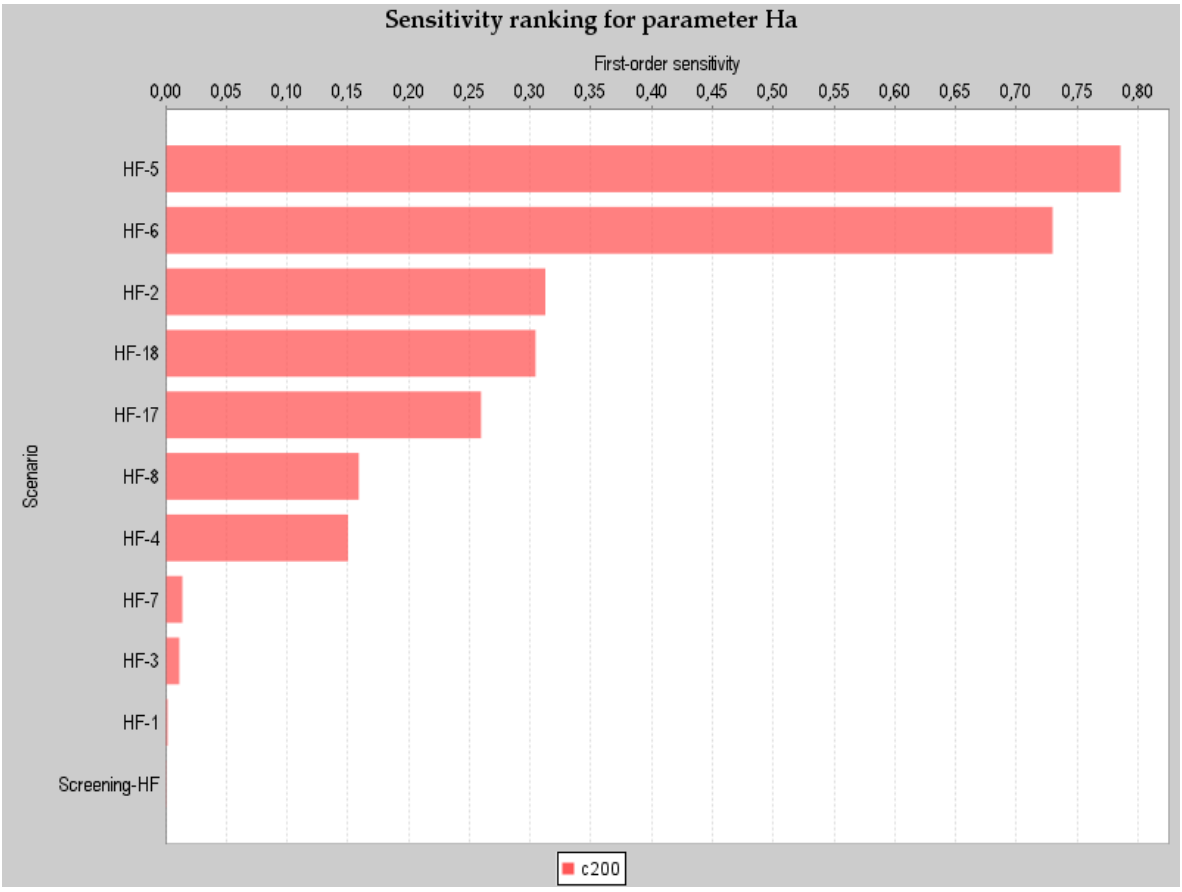


Figure III.42 Classement des scénarios HF selon l'influence de Ha sur la sortie C200

Intéressons nous au scénario 5. Sur la Figure III.43, on observe que l'histogramme de la sortie *C200* a une allure bimodale. Pour analyser ce comportement, nous présentons, sur la Figure III.44, la variation de *C200* en fonction du paramètre H_a. On observe que la sortie *C200* varie peu pour les valeurs de H_a comprises entre 0,01 et environ 0,6, et qu'à

partir de H_a égal à 0,6, la concentration dans le champ proche diminue considérablement lorsque H_a augmente. L'augmentation de l'humidité entraine une augmentation de la formation de brouillard et de la température de mélange. Il en résulte l'accroissement de la densité et de la largeur du nuage ce qui explique à la fois la chute de la concentration dans le champ proche pour les valeurs élevées de l'humidité et le caractère bimodal de la distribution de la sortie.

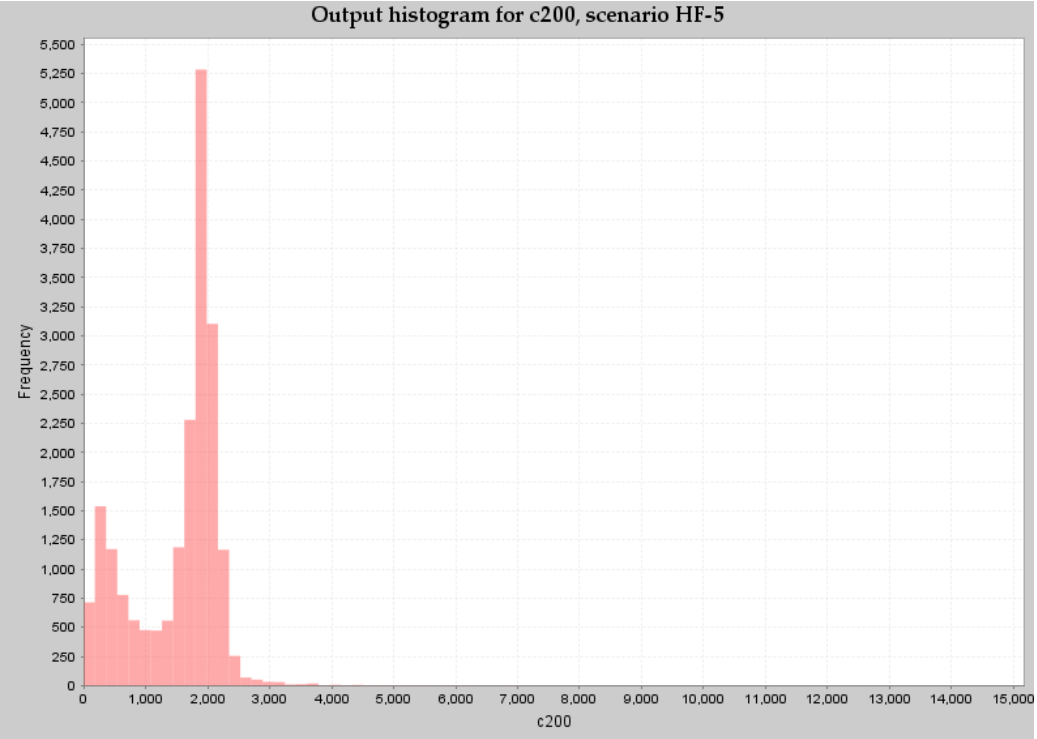


Figure III.43 Histogramme de la sortie C200 pour le scénario 5 de HF

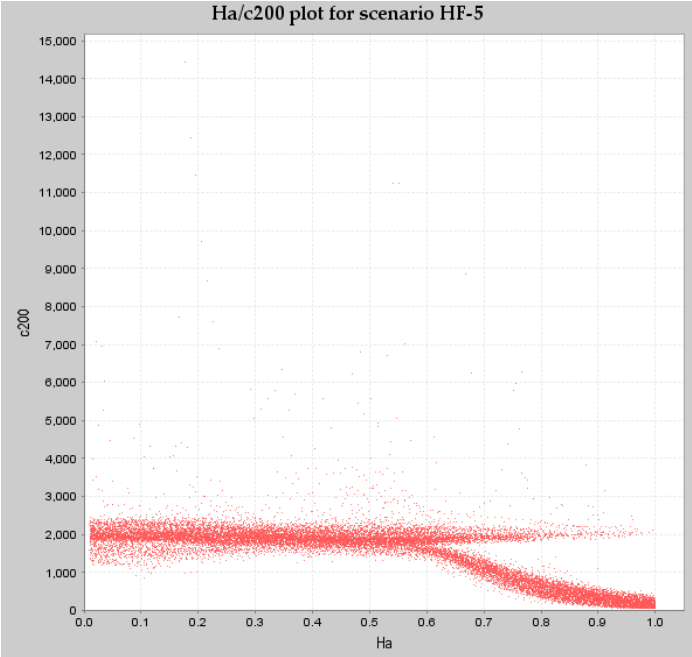
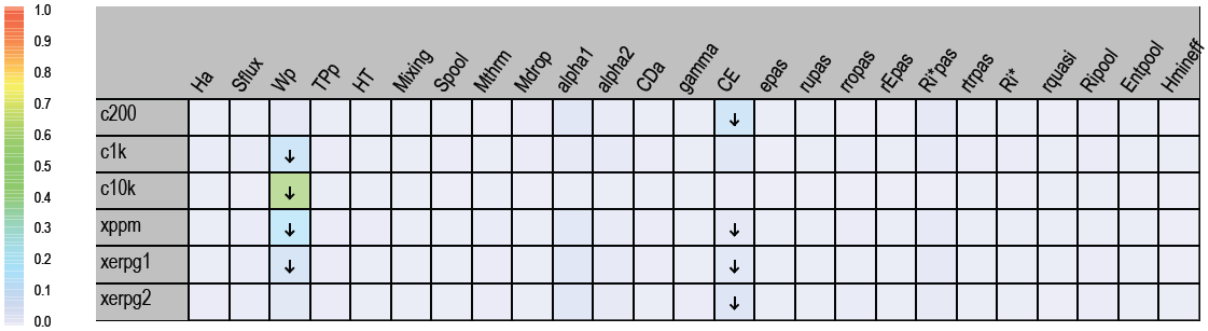


Figure III.44 « Scatter plot » de C200 en fonction de Ha pour le scénario 5 de HF

Il est très surprenant d'observer que le paramètre H_a n'a pas d'influence pour les scénarios 1, 3 et 7, quelle que soit la sortie. Pour ces scénarios, les paramètres influents sur la sortie *C200* sont :

- Scénario 1 : paramètre C_E (*cf.* Tableau III.36)
- Scénario 3 : paramètres C_E et α_1
- Scénario 7 : paramètre r_E^{pas}

Tableau III.36 Indices de sensibilité du 1er ordre pour le scénario 1 de HF



Nous avons observé que pour la sortie *C10k*, le paramètre le plus influent est W_p. L'influence de ce paramètre est expliquée dans le paragraphe III.5.3.7.

III.5.5.2 Scénarios N_2

Rappelons que ce produit est stocké sous forme liquide à la pression atmosphérique et à une température très basse (-195,4 °C) (*cf.* Tableau III.28). D'autre part, les seuils d'effets « toxiques » définis en relation avec les partenaires industriels correspondent à 14,3 % mol, 45,2 % mol et 50 % mol en N_2.

L'ensemble des résultats de l'analyse de sensibilité des scénarios N_2 figure dans *l'Annexe 2*. Les sorties considérées sont différentes de celles des autres produits, comme nous l'avons déjà mentionné dans le paragraphe II.5. On note que pour les scénarios N_2, les distances d'effet correspondant aux seuils d'effets se situent dans le champ proche et donc les sorties « concentrations » sont choisies dans le champ proche : *C200* à 20 m, *C1k* à 50 m, *C10k* à 100 m. A titre d'exemple, nous avons représenté l'allure du panache générée par le scénario n°1 sur la Figure III.45 : la fraction liquide du rejet est égal à 0,996, le point de « rainout » se situe à environ 6 m, le rayon maximal de la flaque est égal à 2,6 m. On voit que la distance correspondant au seuil 14,3 % mol se situe à environ 23 m.

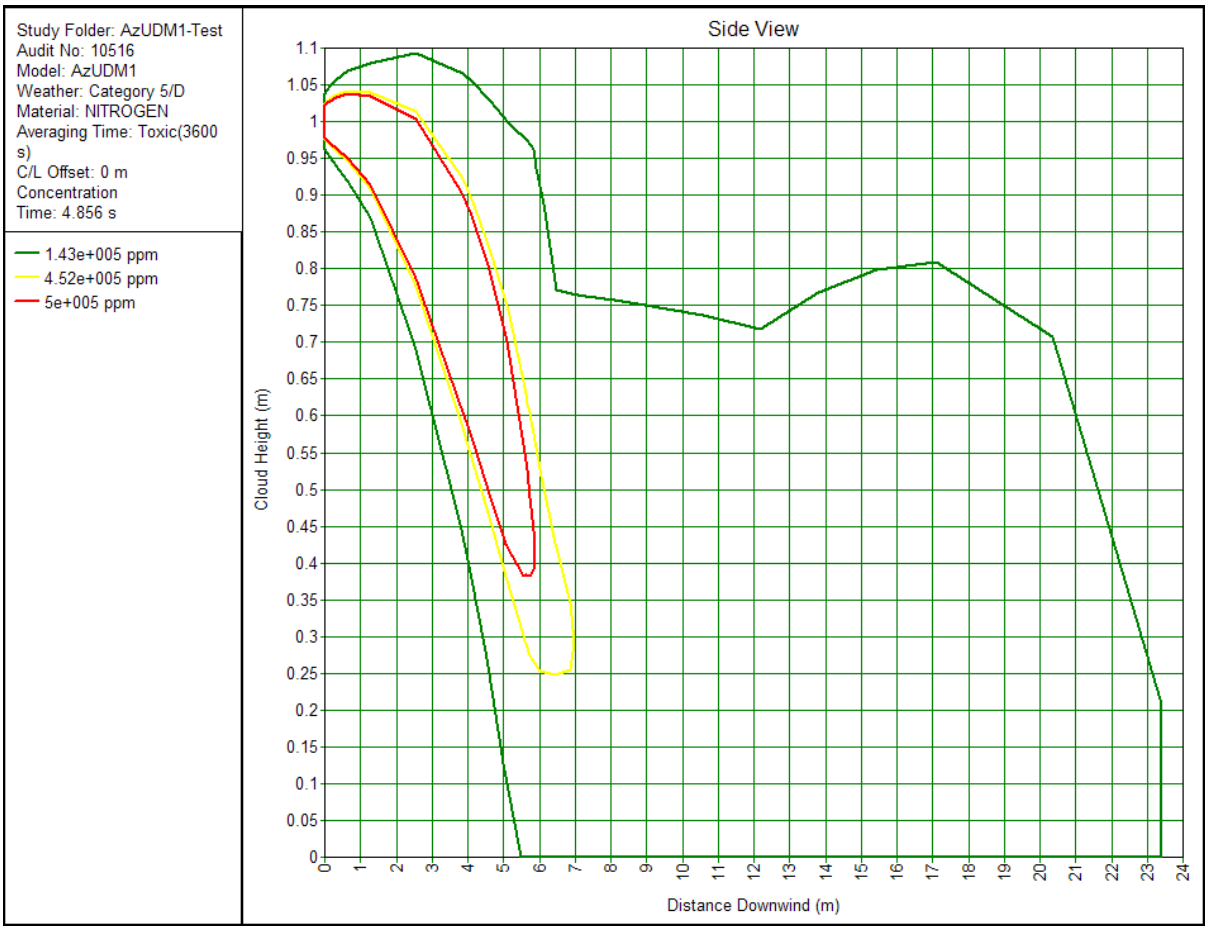


Figure III.45 Panache d'azote correspondant au scénario n° 1 (fraction liquide du rejet = 0,996, fraction de « rainout » = 0,31, rayon max. de la flaque = 2,6 m)

On remarque que dans certains résultats relatifs à N_2 (*cf. Annexe 2*), les valeurs de *CV* de sorties correspondant aux distances sont parfois très élevées. Par exemple les valeurs de *CV* sont de 645 % et 782 % pour les sorties *Xerpg1* et *Xerpg2* pour le scénario 1, ce qui peut s'expliquer par les sorties non-atteintes dans plusieurs cas, comme expliqué dans la Figure II.7. Donc, pour ces sorties, les résultats de S_{Ti} et *CVSi* ne sont pas valables (l'analyse de sensibilité ne peut pas fournir les informations correctes sur l'influence des paramètres en interaction).

Nous observons que l'influence des paramètres sur les sorties *C200*, *C1k*, *C10k* correspond à l'influence des paramètres dans le champ proche, ce qui est analysé dans la section III.5.3.

III.5.5.3 Scénarios n-hexane

Le n-hexane est une substance inflammable, qui est stockée sous forme liquide à la température ambiante 25°C et à la pression atmosphérique (*cf.* Tableau III.28). Pour les scénarios n-hexane, nous avons ajouté un bac de rétention, ce qui permet de limiter le rayon maximal de la flaque. La durée de rejet est réduite à 1800 s (elle est égale à 3600 s pour les autres scénarios) pour limiter la taille de la flaque. Une des limitations de *Phast* est qu'il ne peut pas calculer robustement la concentration du nuage lorsque celui-ci se situe au-dessus de la flaque.

Sur la Figure III.46 qui représente l'allure du panache correspondant au scénario 1, on voit que le coté du nuage touche le sol à environ 6 m et que la formation de la flaque se situe à environ 11 m.

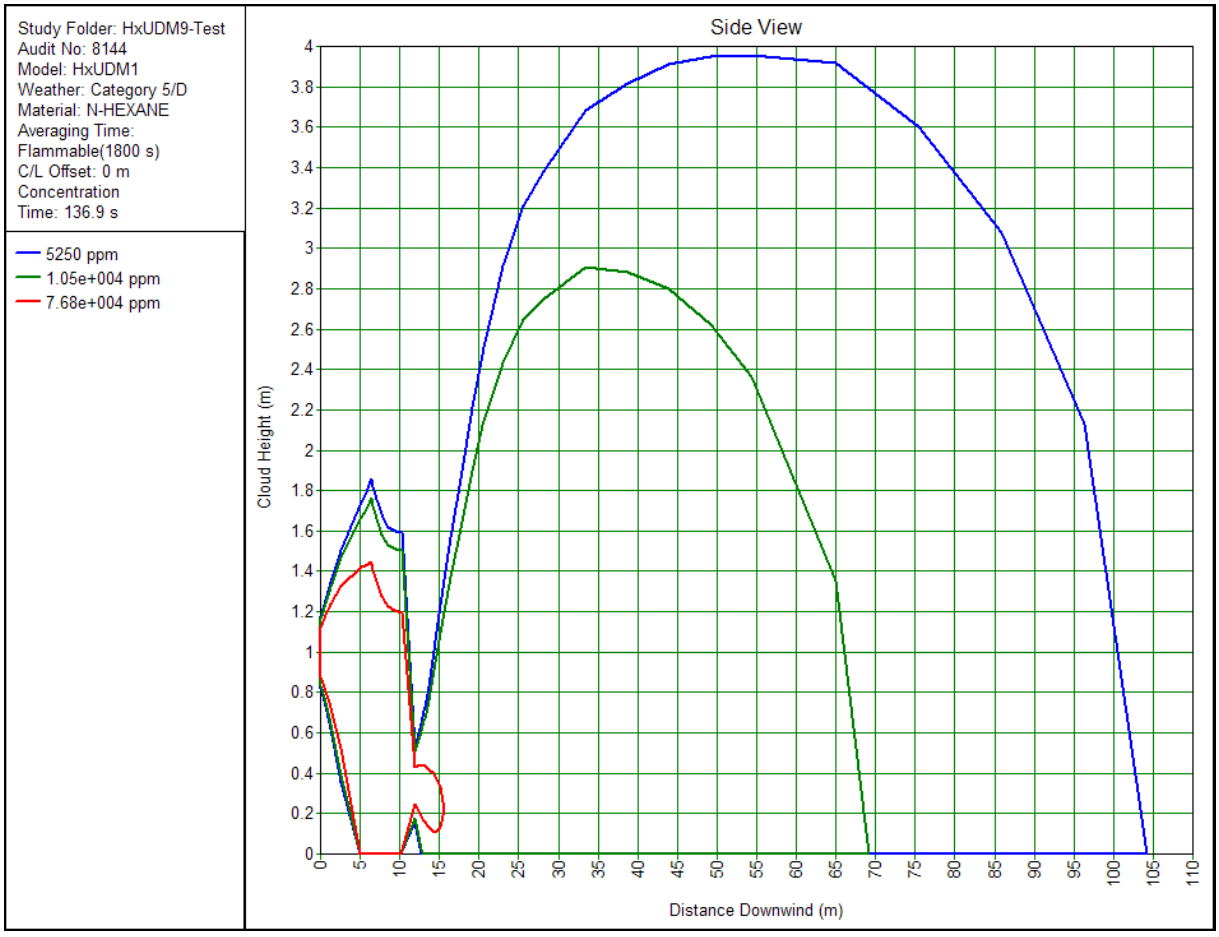


Figure III.46 Panache de n-hexane correspondant au scénario n° 1 (fraction liquide du rejet = 1, fraction de « rainout » = 0,94, rayon max. de la flaque = 43,7 m)

III.5.6 Analyse de l'influence locale

Dans ce paragraphe nous étudions l'influence des paramètres en les faisant varier de ±10% autour de leur valeur par défaut dans *Phast*. Cette étude est effectuée pour un cas de base (scénario n°3) d'un rejet d'ammoniac avec un débit faible, rejet horizontal, conditions météo F3 et hauteur de rejet 1 m. L'ensemble des paramètres étudiés est présenté dans le tableau suivant :

Tableau III.37 Paramètres étudiés pour effectuer l'analyse de l'influence locale

Paramètres (unité) [*valeur par défaut dans Phast*]		**Plage étudiée**	***famille***
Température de stockage (K)	T_{st}	[263,15 – 283,15]	*A*
Diamètre d'orifice (m)	D_o	[0,045 – 0,055]	
Hauteur du liquide dans le réservoir (m)	L_h	[13,5 – 16,5]	
Température atmosphérique (K)	T_a	[263,15 – 283,15]	
Pression atmosphérique (Pa)	P_a	[$9{,}1\cdot10^{4}$ – $1{,}1\cdot10^{5}$]	
Humidité relative atmosphérique	H_a	[0,63 – 0,77]	
Hauteur de rejet (m)	*ZR*	[0,9 – 1,1]	
Angle de rejet (degré)	θ	[0 – 10]	
Rugosité de surface (m)	*Z0*	[0,855 – 1,045]	
Vitesse du vent ($m\cdot s^{-1}$)	U_a	[2,4 – 3,0]	
Capacité thermique atmosphérique ($J\cdot kg^{-1}\cdot K^{-1}$) [*1004*]	C_{pa}	[904 – 1104]	
Flux solaire radiatif ($W\cdot m^{-2}$) [*500*]	S_{flux}	[450 – 550]	
Profil vertical du vent (vitesse : 1-constante mesurée à 10 m, 2-loi puissance) [*2*]	W_p	1, 2	*B*
Profil vertical de T et P (1-constant, 2-linéaire, 3- T log et P linéaire) [*3*]	TP_p	1, 2, 3	
Transfert de chaleur entre le nuage et le sol (1-non, 2-oui) [*2*]	*HT*	1, 2	
Inversion de température (1-oui, 2-non) [*1*]	*Mixing*	1, 2	
Surface d'épandage du liquide (1-terre mouillée, 2-terre sèche, 3-béton, 4-béton étanche, 5-Eau profonde, 6- eau peu profonde, 7-rivière profonde, 8-rivière peu profonde, 9-définie par l'utilisateur) [*3*]	S_{pool}	1, 2, 3, 4	
Modèle thermo. d'évaporation des gouttelettes (1-rainout et équilibre, 2- rainout et non-équilibre, -1-pas de rainout) [*2*]	M_{thrm}	1, 2	
Méthode de résolution des équations nuage/gouttes (2-synchronisé, 6- rigoureux) [*2*]	M_{drop}	2, 6	
Coefficient d'entrainement « jet » [*0,17*]	α_1	[0,15 – 0,19]	*C*
Coefficient d'entrainement « cross-wind » [*0,35*]	α_2	[0,32 – 0,39]	
Coefficient de trainée entre le nuage et l'air [*0*]	C_{Da}	[0 – 0,1]	
Coefficient d'entrainement de coté du nuage dense [*0*]	γ	[0 – 0,2]	

Coefficient d'étalement du nuage dense [*1,15*]	C_E	[1,04 – 1,27]	
Coefficient d'entrainement passif dans le champ proche [*1*]	e_{pas}	[0,9 – 1,1]	
Différence max. entre la vitesse nuage/air ambiant [*0,1*]	r_u^{pas}	[0,09 – 0,11]	
Différence max. entre la densité nuage/air ambiant [*0,015*]	r_{ro}^{pas}	[0,014 – 0,017]	
Fraction max. de l'entrainement non-passif [*0,3*]	r_E^{pas}	[0,27 – 0,33]	
Nombre de Richardson maximum [*15*]	Ri_*^{pas}	[13,5 – 16,5]	
Facteur de multiplication pour la phase passive [*2*]	r_{tr}^{pas}	[1,8 – 2,2]	
Nombre de Richardson pour le décollement du nuage [*-20*]	Ri_*	[-22 – -18]	
Paramètres de transition quasi-instantanée [*0,8*]	r_{quasi}	[0,72 – 0,88]	
Nombre de Richardson pour la transition passive au dessus de la flaque [*0,015*]	Ri_{pool}	[0,01 – 0,02]	
Paramètre d'entrainement de l'évaporation de flaque [*1,5*]	Ent_{pool}	[1,35 – 1,65]	
Hauteur effective minimale du nuage (m) [*0,02*]	H_{mineff}	[0,018 – 0,022]	*D*

Nous avons effectué trois études de sensibilité pour ce scénario en modifiant le nombre de paramètres à faire varier :

- *Local 1* : 35 paramètres étudiés du terme source et du modèle UDM (des familles A, B, C et D)
- *Local 2* : 24 paramètres du modèle UDM seulement (les paramètres de la famille A sont fixés)
- *Local 3* : 17 paramètres du modèle UDM en fixant les paramètres des familles A et B

Les trois tableaux suivants montrent les résultats des indices de sensibilité du 1er ordre pour ces trois scénarios.

Tableau III.38 Indices de sensibilité du 1er ordre pour le scénario Local 1

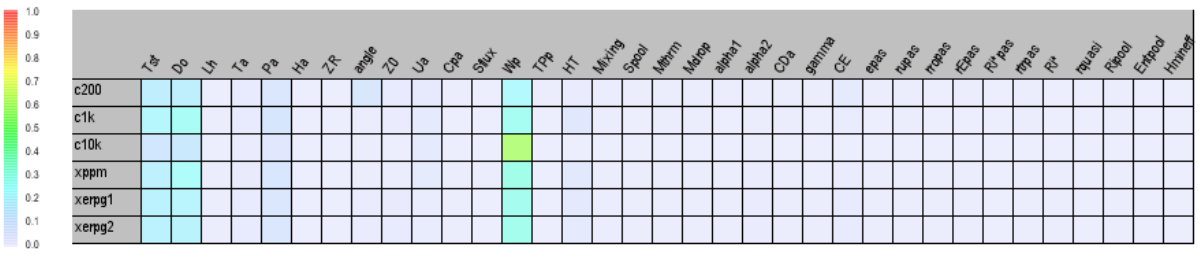


Tableau III.39 Indices de sensibilité du 1er ordre pour le scénario Local 2

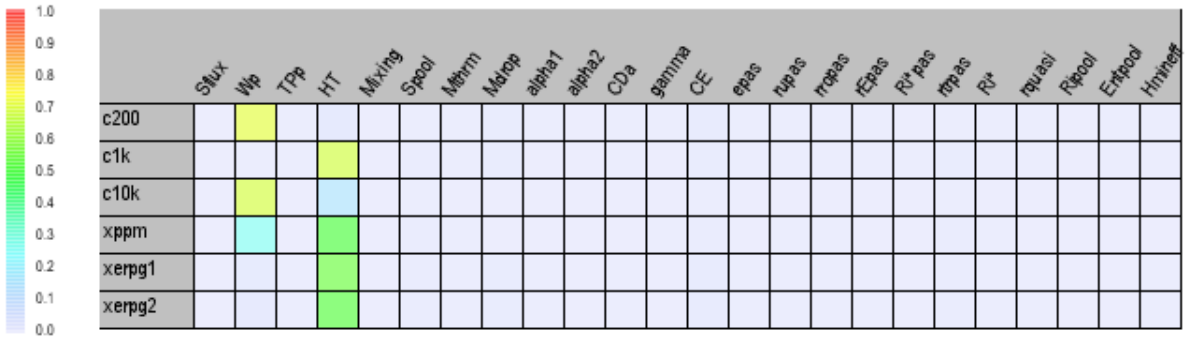
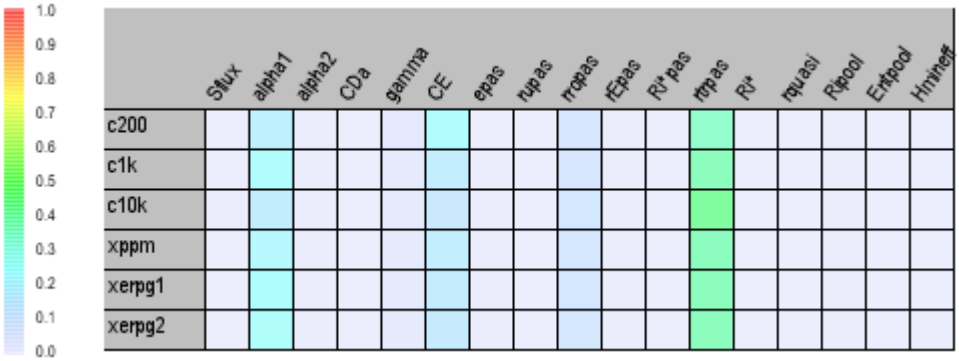


Tableau III.40 Indices de sensibilité du 1er ordre pour le scénario Local 3



On constate que dans le cas *Local 1* (*cf.* Tableau III.38), les paramètres du terme source sont toujours influents, comme nous l'avions trouvé dans les résultats de screening NH_3 (*cf.* § III.4.2). De plus, pour ce scénario un nouveau paramètre influent apparait, W_p qui est un paramètre de la famille B.

En examinant les résultats du cas *Local 2* (*cf.* Tableau III.39), on constate que les paramètres les plus influents sont W_p et *HT*, qui sont de la famille B. En effet, nous avons réduit la plage étudiée de tous les paramètres, mais la plage de valeurs pour les paramètres de la famille B (qui ne varient pas de façon continue mais discrète) sont les mêmes. Ceci rend ces paramètres très influents sur toutes les sorties.

La troisième analyse de sensibilité a été effectuée en fixant les paramètres de la famille B à la valeur par défaut de *Phast*. Les résultats de l'analyse de sensibilité (*cf.* Tableau III.40) montrent l'influence des paramètres α_1, C_E, r_{ro}^{pas} et r_{tr}^{pas}.

Ces résultats sont assez différents des scénarios où la plage de variation des paramètres est très large. En réduisant la plage de variation des paramètres, on réduit considérablement la variation des sorties (*cf.* Tableau III.41). Le tableau suivant montre les différentes grandeurs calculées pour les sorties du *Local 3*.

Tableau III.41 Variabilité des sorties pour le cas Local 3

Sorties	Min	Max	Moyenne	Médiane	CV (%)	Erreurs
C200 (ppm)	11222	16289	13489	13439	6	0
C1k (ppm)	2256	2932	2606	2602	4	0
C10k (ppm)	102	111	107	107	1	0
Xppm (m)	4180	4568	4384	4384	1	0
Xerpg1 (m)	690	889	799	799	4	0
Xerpg2 (m)	651	844	755	756	4	0

L'analyse de l'influence locale des cas de base (scénario n°3) relatifs à Cl_2, et NO figure dans l'*Annexe 2*.

III.6 Etudes complémentaires

Dans ce paragraphe, nous présentons les trois études complémentaires effectuées sur : l'étude des paramètres corrélés, l'analyse de sensibilité locale et l'indentification de l'origine des erreurs *Phast*.

III.6.1 Etude des paramètres corrélés

Les méthodes classiques d'analyse de sensibilité (et en particulier, la méthode FAST étendue que nous avons principalement utilisée dans ce travail) prennent comme hypothèse que les paramètres du modèle sont indépendants. Or, nous savons que certains des paramètres d'entrée de *Phast* sont dépendants, que ce soit pour des raisons physiques (la vitesse du vent et la classe de stabilité météorologique sont interdépendants, par exemple), ou pour des raisons liées aux plages de validité des sous-modèles (par exemple, le module « Long pipeline » de *Phast* n'est adapté que pour des situations de rejet dans lesquelles le rapport entre la longueur et le diamètre du pipeline est supérieur à 300).

En collaboration avec l'Institut de Mathématiques de Toulouse, dans un premier temps nous avons effectué une recherche bibliographique afin de trouver une méthode d'analyse de sensibilité qui permette de s'affranchir de cette hypothèse d'indépendance des paramètres. Une piste intéressante a été explorée avec les travaux de thèse de DaVeiga (DaVeiga 2008), qui a récemment développé une méthode d'analyse de sensibilité basée sur des polynômes locaux qui permet d'estimer des indices de sensibilité [6] en présence de dépendances entre les paramètres. Cette méthode consiste à approcher la surface de réponse par la jointure d'un grand nombre de polynômes d'ordre 1 ou 2, à l'aide de la technique des moindres carrés, puis à estimer les indices de sensibilité à l'aide de ce « méta-modèle ». Toutefois, cette méthode suppose que la surface de réponse étudiée est partout différentiable, ce qui n'est pas le cas en présence de paramètres discrets.

Dans le cadre d'un travail de stage d'été d'une élève de l'ENSIACET (Aurore Billou, que nous remercions) et compte tenu de ces contraintes, nous avons cherché à appliquer la méthode des polynômes locaux de DaVeiga sur un cas simple de dispersion passive, pour lequel nous disposons d'une formulation analytique (TNO) et qui ne compte que des paramètres continus. Cette étude avait pour objectif d'évaluer le niveau de biais dans nos résultats d'analyse de sensibilité introduit par la dépendance existant entre les paramètres. Cette étude a été conduite en trois phases :

- Caractériser les dépendances entre les paramètres d'entrée de *Phast*, en nous focalisant sur le cas des paramètres météorologiques ;
- Développer une méthode d'échantillonnage qui prenne en compte ces dépendances ;
- Sur le cas de dispersion passive, comparer les indices de sensibilité estimés par la méthode EFAST que nous utilisons dans l'outil *SimLab* (échantillonnage sans

[6] Plus exactement, il s'agit de « mesures d'importance » et non d'indices de sensibilité, puisque la décomposition de la variance sur laquelle s'appuient les indices n'est pas fondée en présence de corrélations.

corrélation) avec les indices estimés par la méthode des polynômes locaux en exploitant un échantillonnage avec corrélations.

Dans un premier temps, nous avons vérifié sur un cas simple $Y = X_1 + X_2 + X_3$, où (X_1, X_2, X_3) est un vecteur gaussien de moyenne nulle et de matrice de variance-covariance :

$$\Gamma = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \rho\sigma \\ 0 & \rho\sigma & \sigma^2 \end{bmatrix}$$

En effectuant des simulations avec ρ = -0,8 et σ = 1,2 et un échantillon de taille 1000, on vérifie que la méthode des polynômes locaux utilisant un échantillonnage stratifié de type LHS[7], produit des résultats proches des résultats que l'on peut calculer de façon analytique :

Tableau III.42 Comparaison des indices estimés par la méthode des polynômes locaux avec leurs valeurs analytiques

	valeurs théoriques	valeurs calculée par la méthode de Da Veiga
S1	0,6579	0,6603
S2	0,0011	0,0016
S3	0,1053	0,1076

En faisant varier ρ, on obtient les résultats suivants, dans lesquels les valeurs estimées par la méthode des polynômes locaux et les valeurs analytiques sont presque superposées [8]:

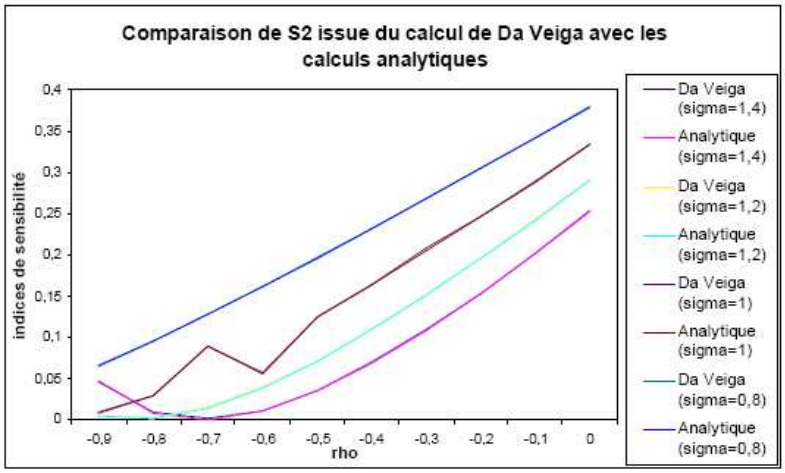


Figure III.47 Comparaison des indices estimés par la méthode des polynômes locaux avec leurs valeurs analytiques

[7] LHS : *Latin Hypercube Sampling*, une technique d'échantillonnage stratifié proposé en 1979 par McKay et qui consiste à considérer l'espace d'entrée comme un hypercube, où l'on divise chaque dimension en plusieurs strates, puis en échantillonnant de façon aléatoire dans chaque strate.

[8] Les résultats sont présentés ici pour la variable X_2, mais on obtient la même concordance pour les indices X_1 et X_2.

On vérifie également que lorsque ρ et σ tendent vers 0, on obtient des estimations très proches de la valeur analytique attendue ($S_1 = S_2 = S_3 = 1/3$).

Nous avons ensuite effectué une comparaison des résultats obtenus par la méthode des polynômes locaux avec ceux de la méthode EFAST sur un cas de dispersion passive, tel que décrit dans la section II.6.1. Les mêmes plages de paramètre que dans la précédente section ont été étudiées. Ces expérimentations, dont nous ne rendons que très partiellement compte ici, indiquent une bonne correspondance entre les indices estimés par les deux méthodes. A titre d'illustration, les figures ci-dessous présentent les indices estimés pour la sortie « distance à 0,1 ppm » et « distance à concentration maximale ». La classe de stabilité a été fixée à D dans ces expérimentations.

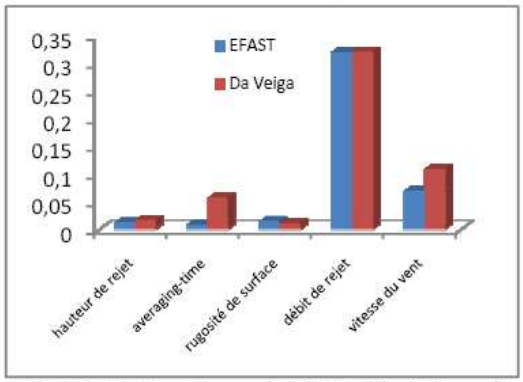


Fig.11 : Indices de sensibilité de C(x=0,1 ppm)

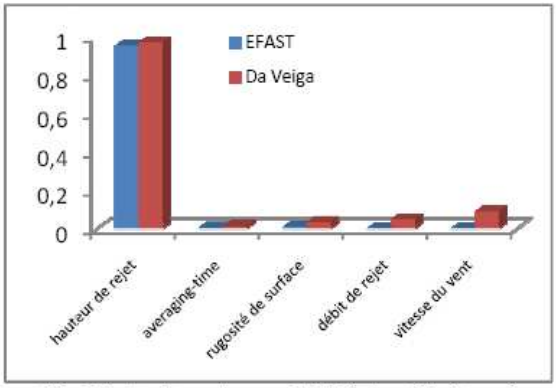


Fig.13 : Indices de sensibilité de x(C=Cmax)

Figure III.48 Comparaison des indices de sensibilité du 1er ordre calculés par EFAST et Da Veiga

La dernière partie de cette étude concerne la comparaison des indices de sensibilité estimés avec et sans prise en compte des dépendances entre paramètres. Les paramètres corrélés qui nous intéressent dans le cas présent sont la vitesse du vent et la classe de stabilité atmosphérique. Générer un échantillon nécessite de connaître la distribution conjointe de ces paramètres. Afin de déterminer cette distribution conjointe (qui n'est pas connue analytiquement), nous avons effectué une analyse de données météorologiques librement disponibles[9] afin de générer un arbre de décision, qui permet de connaître la classe de stabilité la plus probable pour une plage donnée de vitesses de vent. Les mesures étudiées sont la pression atmosphérique, le point de rosée, la radiation solaire, les précipitations, l'humidité relative, l'indice de stabilité, la température, la vitesse du vent, la direction du vent et le critère sigma-theta. A l'aide d'une technique statistique dite CART[10], un arbre de décision (Figure III.49) a été obtenu, indiquant la classe de stabilité en fonction de la radiation solaire et la vitesse du vent.

[9] Faute de données librement disponibles concernant la France, nous avons travaillé sur des données météo enregistrées au *Lawrence Livermore National Laboratory* (Californie), qui peuvent être téléchargées depuis l'adresse http://www-metdat.llnl.gov/. Les données concernant un mois d'été et un mois d'hiver ont été analysées.

[10] CART : Classification and Regression Tree, outil statistique de classification.

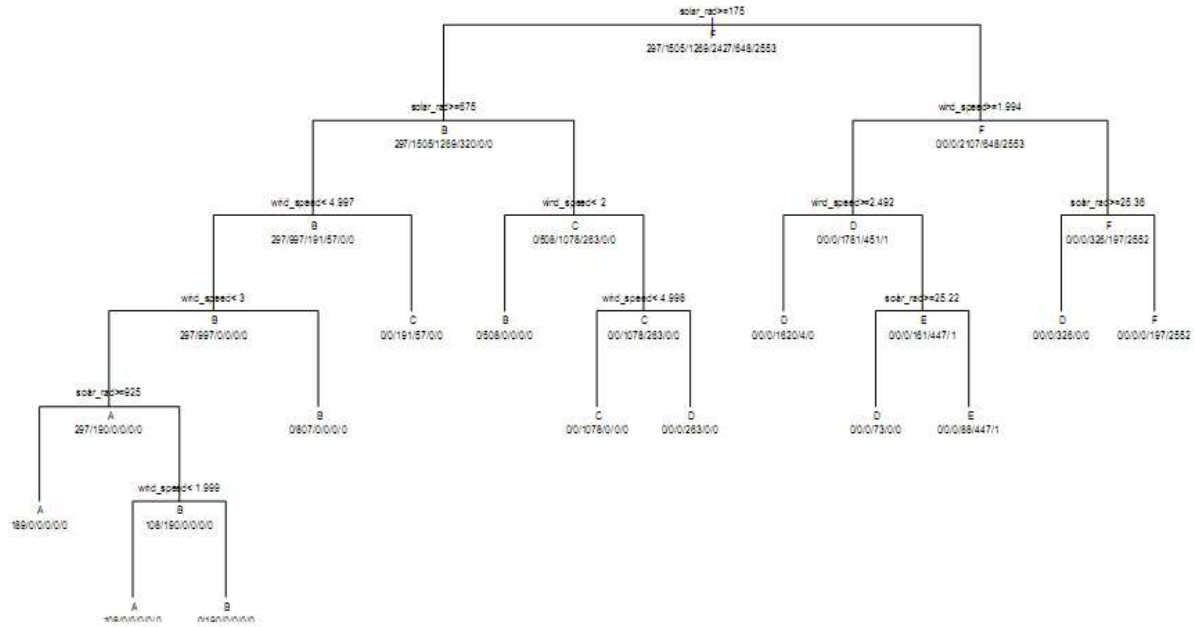


Figure III.49 Arbre de décision pour la détermination de la classe de stabilité

L'échantillonnage avec dépendances consiste donc à :

- générer une valeur pour la radiation solaire (qui dans la moitié des tirages, correspondant aux périodes de nuit, est prise à 0, et dans l'autre moitié des tirages supposée varier uniformément entre 0 et 1200 $W \cdot m^{-2}$) ;
- générer une valeur pour la vitesse du vent (qui dans ces expérimentations est supposée varier uniformément entre 0 et 12 $m \cdot s^{-1}$, sachant qu'une distribution log-normale serait plus adaptée aux relevés) ;
- à l'aide de l'arbre de décision, déterminer la classe de stabilité la plus probable en fonction du niveau de radiation solaire et de la vitesse du vent.

A l'aide de cet échantillonnage, nous obtenons les résultats suivants (*cf.* Figure III.50). Dans les expérimentations « EFAST », la vitesse du vent a été échantillonnée de façon indépendante de la classe de stabilité, dans les mêmes plages que l'expérimentation avec dépendances.

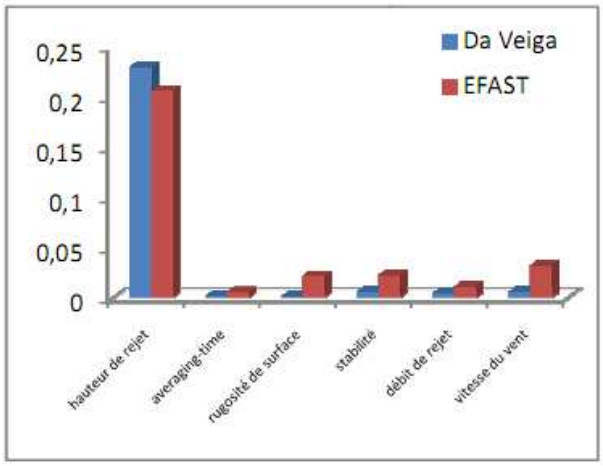


Fig. 22 : Indices de sensibilité de x(C=200)

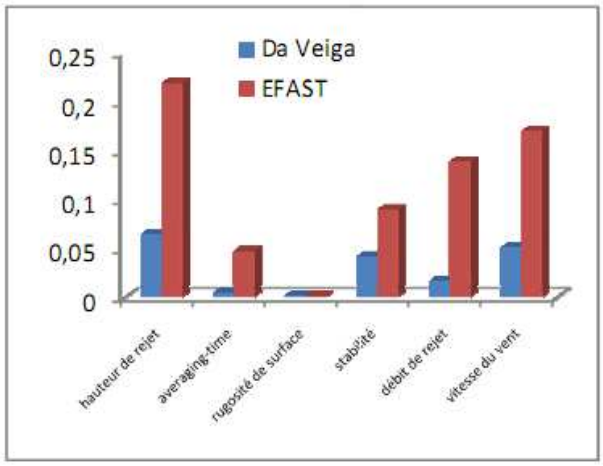


Fig.23 : Indices de sensibilité de x(C=10000)

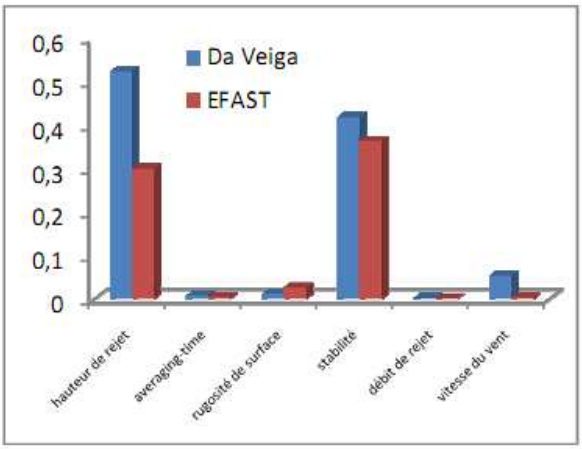


Fig.26 : Indices de sensibilité de x(C=Cmax)

Figure III.50 Comparaison des indices de sensibilité du 1er ordre calculés par EFAST et Da Veiga

La différence observée pour les indices concernant la hauteur de rejet est difficile à expliquer. Les deux méthodes conduisent à une différence considérable dans les indices concernant la vitesse du vent, qui peut être imputable à l'effet des corrélations.

Cette analyse suggère que les résultats que nous avons obtenus sur les modules terme source de *Phast* doivent être considérés avec prudence, puisqu'il semble probable que les indices de sensibilité des paramètres météorologiques seraient différents si l'on avait pu prendre en compte l'effet des dépendances entre ces paramètres.

III.6.2 Analyse des erreurs de *Phast*

Lors des expérimentations concernant certains scénarios de l'étape d'analyse globale, nous avons constaté la présence d'erreurs de *Phast* (atteignant au maximum 1200 erreurs sur 20000 exécutions pour le scénario Cl2-10). Il s'agit de situations dans lesquelles la simulation se solde par un échec, suite par exemple à des erreurs de convergence ou à des tests de cohérence internes aux modèles. Dans l'*Annexe 2*, le nombre d'erreurs rencontrées pour chaque scénario est répertorié dans le tableau

récapitulatif des données de sortie (colonne *« Errors »)* . A titre d'illustration, les erreurs les plus fréquemment rencontrées sont :

- UDM 43 "Solution is too slow. Integration halted after 5001 steps"
- UDM10 "Area or volume ratio 1 not converging"
- UDM14 "Repeated failure in integration at 1.832.10-5 m or secs"
- CONC 8 "Profile exponent 8.9 .10-34 is out of range"
- CONC 10 "Negative supplied concentration"

Ce nombre important d'erreurs s'explique par le fait que nous exécutons *Phast* avec les paramètres internes (qui dans une utilisation normale de l'outil restent fixés à leurs valeurs par défaut) prenant des valeurs très différentes de celles par défaut, pour lesquelles le logiciel a été testé par les développeurs.

Bien que cela ne soit pas l'objectif de l'analyse de sensibilité, nous pensons qu'il serait possible d'exploiter les résultats produits par notre banc de test dans une optique d'assurance qualité du logiciel. Si l'on examine le « scatterplot » des exécutions s'étant soldées par un échec (*cf.* la Figure III.51 pour un exemple), on constate que les erreurs ne sont pas uniformément distribuées en fonction des paramètres d'entrée. Dans l'exemple illustré, les erreurs apparaissent surtout pour des valeurs faibles d'*alpha2* et M_{thrm} (un paramètre discret régissant le choix du modèle thermodynamique) égal à 2.

Des premiers résultats obtenus par un membre de l'équipe de recherche suggèrent qu'il serait possible d'exploiter les résultats du banc de test pour caractériser les zones de l'espace d'entrée qui conduisent à des erreurs du modèle. La Figure III.52 présente les résultats de cette première analyse, dans laquelle des techniques d'apprentissage statistique[11] ont été utilisées pour chercher à identifier les paramètres discriminants pour établir une classification entre exécutions sans et avec erreurs. Cet arbre de classification distingue les exécutions à erreur (dans les deux feuilles les plus à droite) des exécutions s'étant déroulées normalement ; les branches de l'arbre indiquent quels sont les paramètres les plus influents sur cette classification, et les plages de valeur conduisant à la classification dans la branche gauche ou branche droite. L'exemple indique que toutes les erreurs rencontrées dans ce scénario concernent des valeurs de $TP_p = 3$, $M_{thrm} = 2$ et $M_{drop} = 4$, avec les deux autres paramètres discriminants que sont *alpha1* et H_{mineff}.

[11] Partitionnement récursif par inférence conditionnelle, mis en œuvre par la fonction *crée* du module « party » du logiciel statistique R.

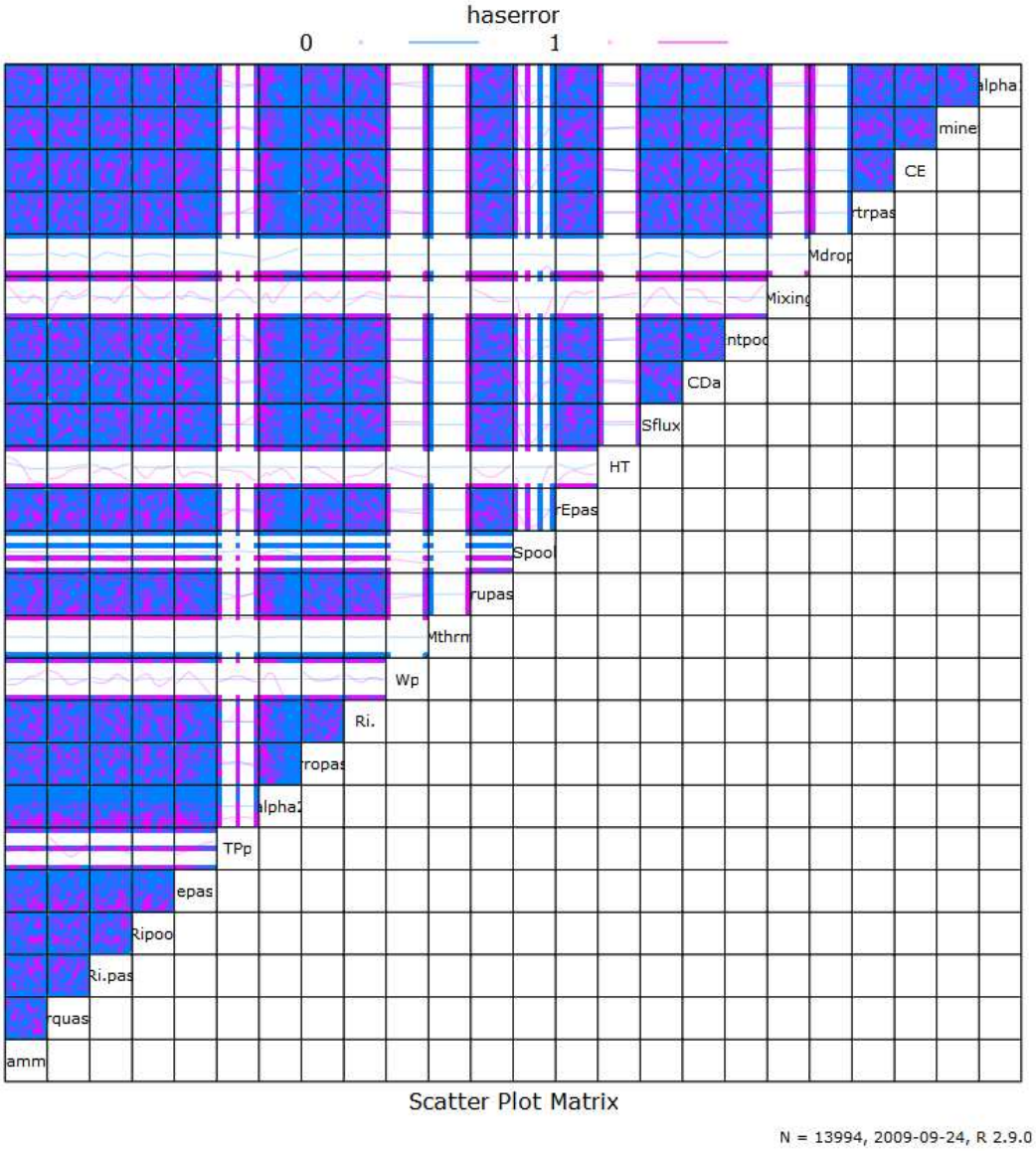


Figure III.51 Cartographie des exécutions de Phast *conduisant à des erreurs*

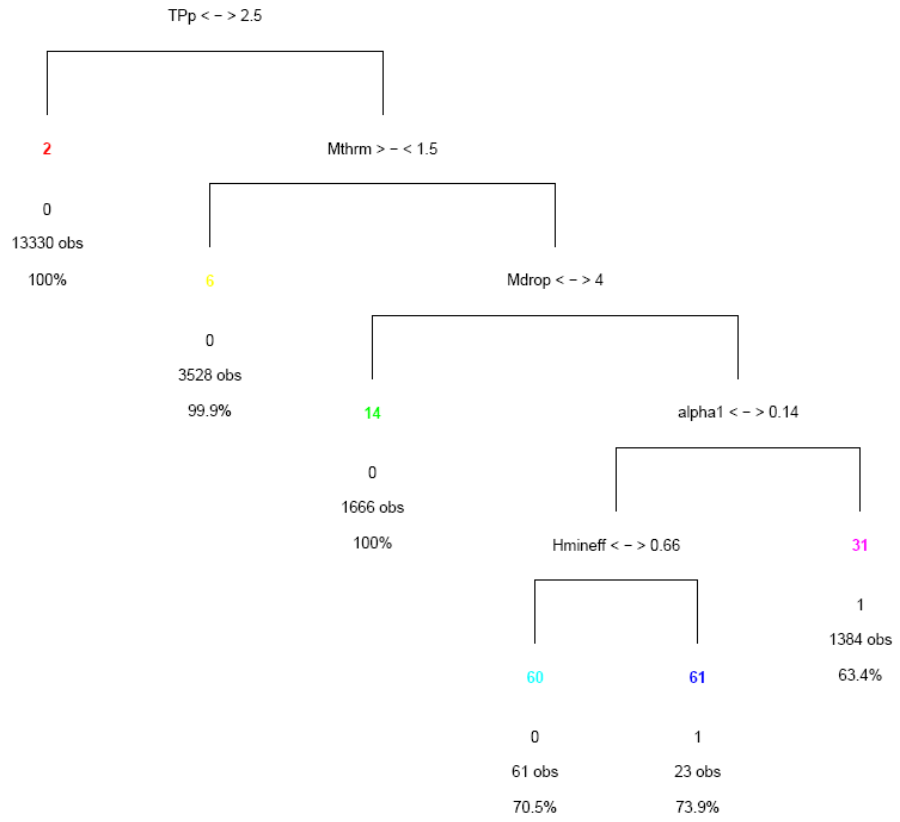


Figure III.52 Détermination des paramètres discriminants pour la présence d'erreurs

III.7 Conclusion

Nous avons réalisé une analyse de sensibilité paramétrique globale du logiciel *Phast* suivant la démarche générale décrite au Chapitre II. Ces résultats ont été obtenus pour 6 produits représentatifs de scénarios étudiés dans le cadre d'analyses de risque, avec différentes conditions de stockage. L'analyse porte sur deux modules de calcul de terme source (« Leak » et « Line rupture ») et sur le modèle de dispersion « UDM » de *Phast*. Elle a été conduite pour les trois phases de « screening » (où l'ensemble des paramètres varie), d'influence globale (où seuls les paramètres internes varient) et (de façon plus partielle) d'influence locale (où l'on étudie l'effet de petites variations autour de la valeur par défaut).

Nous avons obtenu différents types de résultats :

- Une classification des paramètres de cet outil selon leur **degré d'influence** sur la variabilité de différentes sorties (concentrations en champ proche, intermédiaire et lointain, distances correspondant à une valeur toxique de référence). Cette influence est quantifiée par des *indices de sensibilité*.
- Pour chaque paramètre, une classification des scénarios (produits rejetés et conditions de rejet) en fonction du degré d'influence du paramètre sur la variation de différentes sorties.

Nous avons recherché des formes de visualisation des résultats qui facilitent l'interprétation et l'analyse de la grande quantité de données que nous avons produite. Nous avons analysé les résultats pour comprendre l'influence des différents paramètres en fonction des produits et des sorties, et les caractéristiques spécifiques des rejets de certains produits.

L'analyse de nos résultats nous permet de vérifier plusieurs hypothèses que nous avions formulées :

- Les phases de screening nous ont permis de vérifier, pour l'ensemble des produits étudiés, que les paramètres les plus influents sont ceux liés au terme source et aux conditions météorologiques, et non les paramètres « internes », liés à la modélisation.
- La forte variabilité des résultats d'analyse de sensibilité constatée lors de la phase d'analyse de l'influence globale, témoigne de la complexité du phénomène de dispersion atmosphérique. Elle conforte notre choix de décomposer finement les scénarios.

Il est important de noter que nous avons constaté que certaines des situations de rejet simulées conduisent à estimer des distances d'effet dans des zones où *Phast* modélise mal le phénomène physique (estimation de seuils de concentration se situant au dessus d'une flaque). Ainsi, les résultats de *Phast* dans ces situations sont

vraisemblablement peu pertinents. Notre outillage d'analyse de sensibilité considère *Phast* comme une « boite noire », et n'est pas en mesure de distinguer simulations « valides » de simulations « peu réalistes ».

Nous avons également conduit deux études complémentaires :

- l'une relative à la prise en compte des paramètres corrélés dans l'analyse de sensibilité. Cette analyse suggère que les résultats que nous avons obtenus sur les modules terme source de *Phast* doivent être considérés avec prudence, puisqu'il semble probable que les indices de sensibilité des paramètres liés à la météo seraient différents si l'on avait pu prendre en compte l'effet des dépendances entre ces paramètres.
- l'autre relative à l'exploitation de notre banc de test expérimental dans une optique d'assurance de la qualité du logiciel *Phast*. L'éditeur du logiciel *Phast*, DNV, nous a fait part de son intérêt pour intégrer ce banc de test aux outils utilisés en interne.

CONCLUSIONS ET PERSPECTIVES

Nous avons développé une démarche permettant d'analyser la sensibilité paramétrique d'un outil de simulation de la dispersion atmosphérique. Cette démarche présente plusieurs spécificités :

- Alors que la majorité des études existantes concernant les modèles de dispersion sont des études de type « OAT » (dans lesquelles on fait varier les paramètres un à un), notre étude est une analyse de sensibilité globale, faisant varier l'ensemble des paramètres du modèle de façon simultanée. Les analyses globales, plus complexes à mettre en œuvre, permettent de caractériser les effets d'interaction entre paramètres (influences conjointes), qui ne sont pas visibles dans les analyses OAT. La mise en œuvre de ces techniques d'analyse statistique relativement sophistiquées a été rendue possible par le développement d'un banc de test expérimental qui permet d'automatiser l'exécution concourante de l'outil (qui aura subi plus de 3 millions d'exécutions au cours de la thèse).
- Nous avons étudié des scénarios de rejet continus pour cinq produits différents, sélectionnés pour couvrir une gamme de caractéristiques physiques (gaz lourd, gaz passif, gaz léger, effets de polymérisation) et de conditions de stockage (gaz sous pression, gaz liquéfié sous pression, liquide saturé...) ainsi que pour leur importance industrielle dans les analyses des conséquences d'accidents.
- Pour chaque produit, nous avons étudié de façon différenciée plusieurs conditions de rejet différentes (combinaisons de débit, hauteur et angle de rejet, différentes conditions météorologiques). Cette granularité fine dans les scénarios étudiés nous a permis d'interpréter les sensibilités des paramètres sans la confusion qui résulterait du mélange de phénomènes physiques très différents.
- Nous avons étudié des plages de variation des paramètres du terme source qui sont représentatives de scénarios pertinents pour les analyses de risques.
- Nous avons cherché à reproduire une utilisation de l'outil qui respecte les bonnes pratiques de la profession (par exemple, un positionnement du paramètre « averaging time » égal à la durée de rejet).

La démarche d'analyse a été séparée en trois étapes :

- Une étape de « screening », ou criblage, permettant de comparer l'influence de l'ensemble des paramètres (y compris ceux liés aux conditions météorologiques et au terme source). Cette phase permet de comparer l'influence de paramètres qui concernent des grandeurs physiques (famille A) avec celle des paramètres « internes » (familles B, C et D, dont l'influence est généralement moins bien connue des utilisateurs, régissant le choix de sous-modèles internes et leur paramétrage, ou concernant la résolution numérique).
- Une étape analysant l'influence globale des paramètres appartenant aux familles B, C et D. Ces paramètres sont étudiés sur une plage large (souvent les bornes minimales et maximales permises par le logiciel de modélisation). Ceci nous a permis d'explorer des zones de l'espace d'entrée de l'outil qui sont méconnues des

utilisateurs avertis (puisqu'en utilisation normale, les valeurs par défaut de ces paramètres sont implicitement sélectionnées).

- Une étape analysant l'influence locale des paramètres appartenant aux familles B, C et D, c'est à dire l'impact de petites variations de ces paramètres « internes » autour de leur valeur par défaut. Ceci nous permet d'évaluer l'influence de ces paramètres dans des situations plus proches de celles d'un utilisateur averti de l'outil.

Nous avons mis en œuvre cette démarche sur le logiciel *Phast*, un outil d'estimation des conséquences d'accident comportant une modélisation de la dispersion atmosphérique de type intégral. Cet outil est largement utilisé pour les analyses de risques d'installations industrielles.

Ce travail expérimental, qui a nécessité plusieurs dizaines de milliers d'heures de calcul, nous a permis d'obtenir plusieurs types de résultats :

- Une classification des paramètres de cet outil selon leur degré d'influence sur la variabilité de différentes sorties (concentrations en champ proche, intermédiaire et lointain, distances correspondant à une valeur toxique de référence). Cette influence est quantifiée par des indices de sensibilité. Elle a été étudiée de façon séparée pour deux modules de modélisation du terme source, ainsi que pour le modèle de dispersion « UDM » de *Phast*. Elle a été conduite pour les trois étapes que sont le screening, l'influence globale et (plus partiellement) l'influence locale.
- Pour chaque paramètre, une classification des scénarios (produits rejetés et conditions de rejet) en fonction du degré d'influence du paramètre sur la variation de différentes sorties.
- Une analyse comparative par produit, indiquant (pour des conditions de rejet données) quels paramètres sont les plus influents sur les sorties.

La comparaison des résultats issus des phases d'analyse de l'influence globale et de l'influence locale nous a permis d'étudier l'impact des plages de paramètre sélectionnées sur les indices de sensibilité et sur la variabilité des sorties.

L'analyse de nos résultats nous a permis de vérifier plusieurs hypothèses que nous avions formulées :

- Les phases de screening nous ont permis de vérifier, pour l'ensemble des produits étudiés, que les paramètres les plus influents sont ceux liés au terme source et aux conditions météorologiques, et non les paramètres « internes », liés à la modélisation.
- La forte dépendance des indices de sensibilité aux conditions de rejet et aux produits, que nous avons constatée lors de la phase d'analyse de l'influence globale, témoigne de la complexité du phénomène de dispersion atmosphérique. Elle conforte notre choix de décomposer finement les scénarios.

En termes de valorisation du travail, le banc de test que nous avons développé (automatisant l'exécution de l'outil, le calcul des indices de sensibilité et la préparation de rapports sur les résultats) sera vraisemblablement utilisé dans le futur par la société qui commercialise *Phast*, en complément de leur banc de test existant. Ceci leur permettra de renforcer leurs tests de robustesse de nouvelles versions du logiciel (par exemple en vérifiant que le nombre d'erreurs de simulation sur des cas représentatifs n'augmente pas de version en version), et de suivre l'évolution des indices de sensibilité au fur et mesure des versions. De plus, une exploitation des exécutions de *Phast* pour lesquelles des erreurs sont rencontrées (problème de convergence numérique, par exemple) devrait permettre d'identifier des zones de l'espace d'entrée pour lesquelles l'outil de modélisation produit des erreurs.

En outre, bien que nous n'ayons pour l'instant appliqué la démarche méthodologique qu'à l'outil *Phast*, cette démarche est générale et pourrait être appliquée à d'autres outils de simulation[12].

Notre travail présente un certain nombre de limitations :

- Il ne constitue pas une validation : nous n'avons pas confronté les résultats de simulation aux essais expérimentaux de dispersion de gaz (essais à grande échelle, essais en soufflerie, etc.). En particulier, nous n'avons pas cherché à identifier les valeurs des paramètres ajustables de modélisation qui conduisent au meilleur « calage » par rapport aux essais[13]. Nous ne prétendons pas non plus fournir un guide aux utilisateurs de *Phast* leur conseillant les valeurs appropriées pour les paramètres de modélisation. Il est important de garder à l'esprit que certaines des simulations que nous avons conduites (avec des valeurs de paramètres très différentes de leurs valeurs par défaut, préconisées par l'éditeur) sortent des zones pour lesquelles l'outil a été validé. L'analyse de sensibilité considère le modèle étudié comme une « boite noire », sans différencier simulations « valides » et simulations « invalides ».
- Nous n'avons pas étudié les corrélations entre les paramètres d'entrée. Les outils statistiques disponibles ne permettent pas de prendre en compte à la fois des paramètres discrets (conditionnant le choix de sous-modèles internes, par exemple) et des distributions de paramètres ayant des corrélations entre eux. Comme expliqué à la section III.6.1, ces corrélations auraient un effet non négligeable sur les indices de sensibilité estimées.
- La méthode d'analyse de sensibilité que nous avons employée ne permet pas de « censurer » certains points de l'espace d'entrée, pour lesquels l'outil produit des erreurs, ou correspondant à des « cutoff » sur une sortie. Dans l'état actuel de notre outillage statistique, les sorties correspondant à ces points sont fixées à une valeur non-représentative (0, par exemple), ce qui perturbe les résultats statistiques pour un nombre limité de scénarios.

[12] A condition qu'il soit possible d'exécuter l'outil et de récupérer les résultats de simulation de façon automatisée (possibilité d'exécution en « mode batch »). Cette contrainte provient du très grand nombre d'exécutions nécessaires à l'analyse statistique.

[13] Ce travail de validation est du ressort de l'éditeur de l'outil.

Cette recherche ouvre un certain nombre de perspectives qui pourraient être développées :

- L'analyse de l'influence des plages de variation des paramètres sur les indices de sensibilité estimées, qui n'a pas pu être traitée de façon complète compte tenu du temps disponible, pourrait être poursuivie.
- Il serait utile de développer des méthodes plus sophistiquées d'analyse de sensibilité qui permettraient la prise en compte des corrélations entre les paramètres d'entrée (notamment liée à la météo, à des contraintes sur les paramètres d'entrée). Les méthodes existantes dans la littérature (basées sur les polynômes locaux, par exemple) ne permettent pas cette prise en compte, sachant que certains paramètres que nous devons considérer sont discrets.
- Il serait intéressant de mettre en œuvre une analyse de sensibilité de type Sobol', qui permettrait d'estimer les indices de sensibilité d'ordre supérieur à 1, afin de mieux comprendre les effets croisés des paramètres. Ces méthodes sont plus couteuses en termes de nombre d'expérimentations nécessaires pour obtenir un certain niveau de confiance sur les indices de sensibilité estimées.
- L'analyse pourrait être étendue à d'autres produits et à des mélanges de produits, qui présentent des complexités spécifiques dans l'outil que nous avons analysé ;
- L'analyse pourrait être étendue aux rejets instantanés, qui sont modélisés de façon spécifique dans l'outil que nous avons étudié ;
- L'étude pourrait être prolongée à d'autres modules du logiciel, qui permettent la représentation d'autres types de terme source (long pipeline, par exemple, à condition de pouvoir traiter le problème des paramètres corrélés évoqué ci-dessus) et la simulation d'autres types de phénomènes dangereux (incendie, explosion).
- Le même type d'étude pourrait être conduit sur d'autres outils de simulation des conséquences d'accident, afin de comparer la sensibilité aux paramètres relevant du terme source (qui devrait être semblable) et la variabilité liée à des paramètres « internes ».

BIBLIOGRAPHIE

ATEX (ATmospheric EXpansion Model) Theory Document, (2008), *DNV Software*, London, UK.

Bettonvil, B., Kleijnen, J. P.C., (1997), Searching for important factors in simulation models with many factors: Sequential bifurcation. *European Journal of Operational Research*, 96(1), pages 180-194.

Bubbico, R., Mazzarotta B., (2008), Accidental release of toxic chemicals: Influence of the main input parameters on consequence calculation. *Journal of Hazardous Materials*, 151, pages 394 – 406.

Campolongo, F., Braddock, R., (1999), The use of graph theory in the sensitivity analysis of the model output: a second order screening method, *Reliability Engineering & System Safety*, 64(1), pages 1 – 12.

Cook, J., Woodward, J. L., (1993), A new unified model for jet, dense, passive and buoyant dispersion including droplet evaporation and pool modelling, *International Conference and Exhibition on Safety, Health and loss prevention in the Oil*, Chemical and Process Industries, Singapore, February 15-19.

Cook, J., Woodward, J. L., (1995), Further development of the Unified Dispersion Model, *Symposium on Loss prevention in the Process Industry*, Brussels, Belgium.

Cukier, R. I., Fortuin, C. M., Shuler, K. E., Petschek, A. G., Schaibly, J. H., (1973), Study of the sensitivity of coupled reaction systems to uncertainties in rate coefficients – theory, *Journal Chemical Physics*, 59 pages 3873 – 3878.

Da Veiga, S., (2007), Analyse d'incertitudes et de sensibilité. Application aux modèles de cinétique chimique, *Thèse de doctorat*, Université Paul Sabatier, Toulouse.

Deana, A. M., Lewis, S. M., (2002), Comparison of group screening strategies for factorial experiments, *Computational Statistics & Data Analysis*, 39(3), pages 287 – 297.

Droplet Size Theory Document, (2006), *DNV Software*, London, UK.

Duijm, N. J., Ott, S. Et Nielson, M., (1996), An evaluation of validation procedures and test parameters for dense gas dispersion models, *Journal of Loss Prevention in Process Industries*, 9, pages 323 – 338.

EIGA (European Industrial Gases Association), 2006, Definitions of Oxygen Enrichment/Deficiency Safety Criteria, Used in IHC Member Associations, *Position Paper*, PP-14, August 2006.

Ferenczi, Z., (2005), Sensitivity analysis of the mesoscale puff model – RIMPUFF, *Proceedings of 10th International Conference on Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes*, pages 599 – 603.

Gelevan, W. D., Siegell, J. H. (1999), Prevent air emission events, *Chemical Engineering Progress*, December 1999, pages 74 – 78.

HGSYSTEM Technical Reference Manual, *Chapitre 2*, Thermodynamical Descriptions In HGSYSTEM, pages 2-24.

Homma, T., Saltelli, A., (1995), Use of sobol's quasirandom sequence generator for integration of modified uncertainty importance measure, *Journal of Nuclear Science and Technology*, 32(11), pages 1164 – 1173.

Homma, T., Saltelli, A., (1996), Importance measures in global sensitivity analysis of nonlinear models. *Reliability Engineering & System Safety*, 52 (1), pages 1 – 17.

Kok, Y. S., Eleveld, H., Twenhöfel, C. J. W., (2004), Sensitivity and uncertainty analyses of the atmospheric dispersion model NPK-PUFF, *9th International Conference on Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes*, pages 79 – 83.

Laurent, A., (2003), La sécurité des procédés chimiques, Editions TEC et DOC, Lavoisier.

Les cahiers de sécurité de l'UIC : Cahier n°6 : Note d'information sur les modèles de dispersion atmosphérique, Octobre 1982.

Morris, M. D., (2006), Input screening: Finding the important model inputs on a budget, *Reliability Engineering & System Safety*, 91(10-11), pages 1252-1256.

Nair, S. K., Chambers, D. B., Park S. H., Hoffman, F. O., (1997), Review of Models Used for Determining Consequences of UF6 Release: Model Evaluation Report, Vol. 2, Prepared for the Office of Nuclear Material Safety and Safeguards, U.S. Nuclear Regulatory Commission, Washington, District of Columbia 20555-0001, NUREG/CR-6481.

Ooms, G. (1972), A new method for the calculation of the plume path of the gases emitted by a stack, *Atmospheric Environment*, 6, pages 899 – 909

Pasquill, F. (1974), *Atmospheric diffusion*, 2nd Edition, Ellis Horwood, Londres.

Perkins, R., Soulhac, L., Mejean, P., Rios, I., (2005), Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel, *Rapport de l'étude*, LMFA, Ecole Centrale de Lyon.

Pitblado, R. M.,Turney, R. (1996). *Risk Assessment in the Process Industries*, Second Edition. Institution of Chemical Engineers, Warwickshire, UK.

Saltelli, A., (2006), The critique of modelling and sensitivity analysis in the scientific discourse. An overview of good practices, Institute for the Protection and Security of the Citizen, *rapport EUR 22487 EN*.

Saltelli, A., Bolado, R., (1998), An alternative way to compute Fourier amplitude sensitivity test (FAST), *Computational Statistics & Data Analysis,* 26(4), pages 445 – 460.

Saltelli, A., Tarantola, S., et Chan, K., (1999), A Quantitative Model-Independent Method for Global Sensitivity Analysis of Model Output, *Technometrics*, 41 (1), pages 39 – 56.

Saltelli, A., Chan, K., et Scott, E. M., (2004), *Sensitivity Analysis*, John Wiley & Sons Publication.

Saltelli, A. Ratto, M., Tarantola, S., Campolongo F., (2005), Sensitivity analysis for chemical models, *Chemical Reviews*, 105(7), pages 2811 – 2826.

Schotte, W., (1987), Fog formation of hydrogen fluoride in air, *Industrial & Engineering Chemistry Research*, *26, pages* 300 – 306

Sobol', I. M., (1993), Sensitivity estimates for nonlinear mathematical models, *Mathematical Modeling & Computational Experiment*, 1(4), 407 – 414.

Turányi, T., Rabitz, H., (2004), Local Methods, in : *Sensitivity Analysis*, Saltelli, A., Chan, K., Scott, E. M., (Eds.), John Wiley & Sons Publication, pages 81 – 99.

UDM Verification Manual, (2006), *DNV Software*, London, UK.

Witlox, H. W. M., (2005), Averaging-time effects for toxic releases, *DNV report*.

Witlox, H. W. M., (2006), UDM Theory Document, *DNV Software*, Londres, UK.

Woodward, J. L. Cook, J., (1993), Modelling of dispersion with seamless transitions in entrainment mechanism, edge profile and touchdown with the Unifed Dispersion Model, *AIChE meeting*, Seattle, WA, August 14-19.

Woodward, J. L., (1995), Aerosol drop size correlation and corrected rainout data using models of drop evaporation, *International Conference and workshop on modelling and mitigating the accidental releases of hazardous materials*, AIChE, CCPS, New Orleans, LA, September 26-29, pages 117 – 148

Woodward, J. L, Cook, J., and Papadourakis, A., (1995), Modelling and validation of a dispersing aerosol jet, *Journal of hazardous materials*, 44, pages 185 – 207

Woodward, J. L, Papadourakis, A., (1995), Reassessment and reevaluation of rainout and drop size correlation for an aerosol jet, *Journal of hazardous materials*, 44, pages 209 – 230

Woodward, J. L. Cook, J., (1995), Tuning a complex suite of dispersion models, *International Conference and workshop on modelling and mitigating the accidental releases of hazardous materials*, CCPS Conference, New Orleans, LA, September 26-29, pages 787 – 824.

Xu, C., Gertner, G. Z., (2007a), Uncertainty and sensitivity analysis for models with correlated parameters. *Reliability Engineering & System Safety*, 93 (10), pages 1563 – 1573.

Xu, C., Gertner, G. Z., (2007b), A general first-order global sensitivity analysis method, *Reliability Engineering & System Safety*, 93 (7), pages 1060 – 1071.

ANNEXE 1
Tableaux des paramètres de Phast

Définition de scénario :

Vessel or Pipe Source

Material		**symbole**	**unité**
	Discharge Material		
	Material name		-
	Inventory		kg
	Process Conditions		
	Temperature	Tst	K
	Pressure	Pst	Pa (relative)
	Saturated liquid	Lsat	-
	Atmospheric pressure	Atmp	Pa
Scenario			
	Scenario Type		
	Catastrophic Rupture	Cata	
	Leak	Leak	
	Fixed Duration	FD	
	Line Rupture	LR	
	Disc Rupture	DR	
	Relief Valve	RV	
	Long Pipeline	LP	
	Vent from Vapour Space	VV	
	Tank Roof Failure	TRF	
	Outdoor/In-Building Release		
	Outdoor Release		
	Phast to be released (Vapour, Liquid, Two-Phase)	Rphase	-
	Tank Roof Effect		
	Roof Collapsed / Roof Removed		
	Model Effect (Instantaneous effect, Continuous effect)		
	Basic scenario data		
	Hole diameter	Do	m
	Pump head	Ph	m
	Gas Volume Flow	Qv	m3.hr
	Duration (for fixed duration releases)	Dfix	s
	Supply Discharge Coefficient	Disc	-
	Vessel brust pressure used in fireball calculation (g)	Pbrust	bar
Pipe			
	Pipe Length	Lp	m
	Intenale diameter (pipe)	Dp	m
	Pipe Roughness	Rp	m
	Short Pipeline Model - Number of valves		
	Excess Flow valves	Nexcess	-
	Non-return valves	Nnon	-
	Shut-Off valves	Nshut	-
	Long Pipeline Model		
	Distance to break	Dbrk	m
	Pumped Inflow	Lpinflow	kg/s
	Relative Aperture (Area)	Rarea	fraction
	Use atmospheric temperature (1-Yes, 0-No)	LpTa	-
	Valves		
	Valves close (1-Yes, 0-No)	Mvalve	-
	Distance of Valve 1	Dv1	m
	Closing Time of Valve 1	Tv1	s
	Distance of Valve 2	Dv2	m
	Closing Time of Valve 2	Tv2	s
	Distance of Valve 3	Dv3	m
	Closing Time of Valve 3	Tv3	s

Vessel			
	Liquid head	Lh	m
	Time Varying Release used (1-Yes, 0-No)	Mtvr	-
	Rates versus time		
	Duration of interest	Dur	s
	Average rates		
	Rate at given time (t1)		s
	Rate between two times (t1-t2)		s
	Multiple rates		
	Dimensions		
	Tank Type (Vertical, Horizontal, Spherical, Rectangular)	Mtank	-
	Height of discharge from the bottom of the vessel	Hleak	m
	Height	Htank	m
	Length	Ltank	m
	Width	Wtank	m
	Diameter	Dtank	m
	Construction (only for Tank roof failure scenario)		
	Roof Material (select from the list)		-
	Insulation Material (select from the list)		-
	Roof Thinckness		m
	Insulation Thichness		m
Location			
	Release Elevation	ZR	m
	Distances for radiation modeling and dispersion scope		
	Distance 1	Dst1	m
	Distance 2	Dst2	m
	Distance 3	Dst3	m
	Concentration for terminating dispersion		
	Concentration of Interest	Cmin	ppm
	Uses Averaging Time (User-defined, Flammable, Toxic, ERPG, IDLH, STEL)	Mtav	
	Averaging time to be used in reports		
	User-defined averaging time	Tavuser	s
	Toxics (ERPG 1-hr, IDLH 30-min, STEL 15-min)		
Geometry			
	Shape - Point		
	East	GeoE	m
	North	GeoN	m
Bund Data			
	Bund exists (1-Yes, 0-No)	Mbund	-
	Bund modeling		
	Height	Hbund	m
	Bund Failure (1-Bund can fail, 0-Bun cannot fail)	Mbundfail	-
	Surface type (select from the pre-defined type or User-defined)	Sbund	-
	Area	Abund	m2
	Properties of User-defined Bund surface		
	Minimum Thickness	Zbund	m
	Thermal Diffusivity	Diffbund	m2.s
	Roughness Factor	Z0bund	-
	Thermal Conductivity	Cbund	kJ/(m.s.K)
Indoor/Outdoor			
	Outdoor Releases		
	Direction (Horizontal, Angled from Horizontal, Vertical, Down-Impinging on the Ground, Horizontal Impingement, Angled from Horizontal Impingement)	Dir	-
	Release Angle	angle	degré
Flammable			
	Explosion Method (TNT, TNO Multi-Energy, Baker-Strehlow)		-
	Jet Fire Method (API, Shell)		-
	Early Explosion Mass Modification Factor		-
	Use Later Ignition Location		m

Toxic Parameters			
	Indoor toxic Calculations - Unselected		
	Toxic Averaging Time Calculations : (Use a fixed averaging time, Averaging time equals exposure time)		
	Exposure time data		
	Cut off fraction of toxic load		fraction
	Cut off concentration		fraction
TNT			
	réf. "Global Paramerets" --> "Explosion Parameters" --> TNT		
Multi-Energy			
	Unconfined Strength		
	Confined Blast Sources		
	Confined Strength for each Source		
	Confined Volume (m3) or Confined Fraction for each Source		
Baker-Strehlow			
	Match number Calculation		
	Calculate Match Number		
	Material Reactivity (High, Medium, Low)		-
	Flame Expansion		-
	Obstacle Density		-
	Supply Match Number		-
	Ground Reflection factor		-
	Confined Volume		m3
Discharge Parameters			
	"Global Paramerets" --> "Discharge Parameters" --> Discharge Parameters		
Jet Fire			
	"Global Paramerets" --> "Jet fire"		
Pool Fire			
	"Global Paramerets" --> "Pool fire"		
Fireball			
	"Global Paramerets" --> "Fireball and BLEVE Blast Parameters"		

Weather Folder

Weather Data		symbole	unité	classe	plage de valeurs conseillées		commentaires
	Wind Speed	Ua	m/s	A	1	65	
	Pasquill Stability	classe	-	A	A, A/B, B, B/C, C, C/D, D, E, F, G		
Atmospheric Parameters							
	"Global Paramerets" --> "Weather Parameters"						
Substrate Data							
	"Global Paramerets" --> "Weather Parameters"						

Global Parameters

1. Dispersion Parameters

1.1. Near Field (Champ proche)	Symbole	Unité	Classification	valeur par défaut	plage de valeurs conseillées (min,max) / (choix possible)		Commentaires
Expansion zone length/source diameter ratio	Lexp	m	C	0.01	0.01	100	**zone d'expansion** : zone dans laquelle la pression de rejet diminue jusqu'à la pression atmosphérique Dans cette zone, il n'y a pas de dilution du nuage avec l'air.
Near-field passive entrainment parameter	epas	-	C	1	0		Affecte **le taux d'entraînement d'air** dans le champ proche (0= pas d'entraînement 1 = plein effet du modèle)
Momentum jet							
Jet Models	Mjet	-	B	Morton et al.	Emerson, Morton et al.		**Modèle Morton et al. :** modèle recommandé par PHAST **Modèle Emerson :** conservé pour compatibilité avec version précédente de PHAST
Jet Entrainment coefficient alpha 1	alpha1	-	C	0.17	0.01	2	Ce coefficient est utilisé dans le calcul de l'entrainement jet (calibré à partir des données expérimentales)
Jet Entrainment coefficient alpha 2	alpha2	-	C	0.35	0.01	2	Ce coefficient est utilisé dans le calcul de l'entrainement "crosswind" (calibré à partir des données expérimentales)
Drag coefficient between plum and air	CDa	-	C	0	0	1	**Le coefficient de trainée** entre le panache et l'air détermine la force de trainée exercée par l'air sur le panache (calibré à partir des données expérimentales)
Dense cloud							
Side entrainment parameter gamma (continuous)	gamma	-	C	0	0	2	Ce paramètre est utilisé pour calculer l'entrainement "gaz dense"
Side entrainment parameter gamma (instantaneous)	gammai	-	C	0.3	0	2	
Spreading parameter (continuous)	CE	-	C	1.15	0	2	Ce paramètre est utilisé pour calculer l'étalement du nuage suivant Y dans la phase de dispersion dite "gaz dense"
Spreading parameter (instantaneous)	CEi	-	C	1.15	0	2	
Modeling for instantaneous expansion	Minst	-	B	Standard method	Standard method, Purple book correlation		

1.2. Far Field (Champ lointain)	Symbole	Unité	Classification	valeur par défaut	plage de valeurs conseillées (min,max) / (choix possible)		Commentaires
Criteria for transition to passive dispersion							
Maximul cloud/ambient velocity difference	rupas	-	C	0.1	0		Si la différence relative de **la vitesse du nuage** / vitesse du vent est inférieure au paramètre, alors la turbulence due à la quantité de mouvement initiale du jet est négligée
Maximul cloud/ambient density difference	rppas	-	C	0.015	0.01	2	Si la différence relative de **la densité du nuage** /densité de l'air est inférieure au paramètre, alors la turbulence créée par le nuage dense rampant est négligée
Maximum non-passive entrainment fraction	rEpas	-	C	0.3	0	1	Si la différence relative du **taux d'entraînement d'air** / taux d'entraînement passif d'air est inférieure au paramètre, alors toutes les autres formes de turbulence sont négligées
Maximum Richardson number	Ri*pas	-	C	15	0	∞	Quand la valeur du nombre de Richardson est inférieure à ce paramètre, l'entrainement "gaz dense" est négligeable.
Modeling the transition							
Distance multiple for full passive entrainment	rtrpas	-	C	2	– ∞	∞	Ce paramètre conditionne la longueur de la zone de transition
Modeling passive dispersion							
Core averaging time	Tavcore	s	C	18.75	10	3600	Le **Core Averaging Time** est utilisé pour faire les calculs de concentration au centre du nuage. Il prend en compte les effets dus aux changements de direction du vent pendant la dispersion.
Ratio instantaneous/ continuous sigma y	Rsigmay	-	C	1	0.1	10	
Ratio instantaneous/ continuous sigma z	Rsigmaz	-	C	1	0.1	10	

1.3. Liquid	Symbole	Unité	Classification	valeur par défaut	plage de valeurs conseillées (min,max) / (choix possible)		Commentaires
Droplet modeling							
Droplet evaporation thermodynamic model	Mthrm	-	B	Rainout, Non-equilibrium	Rainout, Non-equilibrium; No Rainout, Equilibrium; Rainout,Equillibrium		No rainout : les gouttelettes restent dans le nuage. Equilibre : la température des gouttelettes est la même que la température du nuage
Droplet equation solution method	Mdrop	-	B	Synchronized	Synchronized; Rigorous		"Rigorous" : méthode plus précise que la méthode "Synchronised" car les équations relatives au nuage et aux gouttelettes sont traitées simultanément. Cependant, dans les cas de rejet instantané ou rejet continu non-horizontal des problèmes de non-convergence apparaîssent.
Ratio droplet/expansion velocity for instantaneous release	Vdexp	-	C	0.8	0	1	utilisé pour calculer la vitesse initiale des gouttelettes
Expansion energy cut off Droplet angle for instantaneous release	Expcut	kJ/kg	C	0,69 kJ/kg	0	1.00E+05	L'angle initiale et la vitesse de gouttelettes sont utilisés pour determinier "rainout"
Rainout modeling							
Cloud rainout at source (for instantaneous release)	Rrainout	-	B	Do not reset rainout position	Do not reset rainout position; Do reset rainout position		Le placement de "rainout" est calculé par le modèl. Reset rainout position : force le modèle à localiser le rainout à l'intérieur de la cuvette de rétention (Bund) permet de comparer plus facilement les résultats de dispersion
Coefficient of initial rainout (NOT IN USE)		-					
Pool evaporation							
Richardson Number for passive transition above pool	Ripool	-	C	0.015			Si nombre de Richardson < paramètre, alors le nuage issu de l'évaporation de la flaque est considéré comme passif (sinon comme nuage dense)
Pool vaporization entrainement parameter	Entpool	-	C	1.5	0	2	Joue sur le taux d'entraînement d'air dans le nuage issu de l'évaporation de la flaque

1.4. Ground (Sol)	Symbole	Unité	Classification	valeur par défaut	plage de valeurs conseillées (min,max) / (choix possible)		Commentaires
Ground drag model	Mground	-	B	New (recommended)	New, PHAST 5.2		ancien modèle: phast 5.2 (conservé uniquement pour compatibilié)
Richardson Number criterion for cloud lift off	Ri*	-	C	-20	no limits	0	Si nombre de Richardson < paramètre, alors décollement du nuage possible. Choisir une valeur négative importante pour avoir des résultats conservatifs (= pas de décollement)
Modeling of heat and water vapour transfer							
Flag for heat/water vapor transfer	HT	-	B	Heat and Water	None, Heat only, Heat and Water		Ce paramètre conditionne le choix de prendre en compte ou non le transfert de chaleur et / ou de vapeur d'eau entre le nuage et le sol / l'eau
Surface over which dispersion occurs	Sdisp	-	B	Land	Land, Water		Choisir la surface sur laquelle le nuage se disperse
Modeling of Impingement							
Impingement option	Impg	-	B	Use velocity modification factor	Use velocity modification factor, Use final velocity limit		
Velocity modification factor	Vmodif	-	C	0.25	0	1	
Final velocity limit	Vflimit	m/s	C	500	0.01	2000	

1.5. Limits	Symbole	Unité	Classification	valeur par défaut	plage de valeurs conseillées (min,max) / (choix possible)		Commentaires
Treatment of Top of mixing layer	Mixing			Constrained	Constrained, Unconstrained		Constrained : le centre du nuage ne peut pas dépasser la couche d'inversion
Maximum Limits							
Maximum temperature allowed	Tmax	℃	D	626.9	26.85	4727	
Maximum Distance for dispersion	Xmax	m	D	50000	1	1.00E+06	
Maximum Height for dispersion	Hmax	m	D	1000	10	1.00E+04	
Minimum Limits							
Minimum temperature allowed	Tmin	℃	D	-262.1	-273.1	26.85	
Minimum Release velocity for continuous release	Vminc	m/s	D	0,1 m/s	1.00E-08	100	
Minimum cloud depth	Hmineff	m	D	0.02	0.01	1	Ce paramètre définie la valeur minimale de la profondeur du nuage
Minimum Release height for continuous releases	Zrmin	m	D	0	0		

1.6. Building wake	Symbole	Unité	Classification	valeur par défaut	plage de valeurs conseillées (min,max) / (choix possible)		Commentaires
Model in use			B	Best Estimate	TNO, Worst case, Best Estimate		
Calculation options / Specifications							
Lee Length				calculate	0	pas de limite	
Lee half-width				calculate	0	pas de limite	
Lee height				calculate	0	pas de limite	
K-factor				calculate	0	pas de limite	
Switch distance				calculate	0	pas de limite	
Outout Granularity							
Maximum initiale step size			D	10	0	pas de limite	
Minimum number of step / zone			D	5	pas de limite	pas de limite	
Factor for step increase			D	1.2	0	pas de limite	
Maximum number of output steps			D	1000	pas de limite	pas de limite	

1.7. Other	Symbole	Unité	Classification	valeur par défaut	plage de valeurs conseillées (min,max) / (choix possible)		Commentaires
Modeling of Short duration release							
Flag for finite duration correction	QI	-	B	QI without duration adjustment	Finite duration correction, QI with duration adjustment, QI without duration adjustment		
Quasi-instantaneous transition parameter	rquasi	-	C	0.8	0.1	10	La transition quasi-instantané est effectuée lorsque le rapport entre la largueur et la longueur du nuage est supérieur à ce paramètre
Integration in calculation							
Accuracy for integration of cloud dispersion	Dispacc	-	D	0.001	1.00E-06	1	
Accuracy for integration of droplet evaporation	Dropacc	-	D	0.001	1.00E-06	1	
Step sizes for cloud integration							
Minimum - instantaneous	Stepmini	s	D	0.01	0.001	10	
Maximum - instantaneous	Stepmaxi	s	D	1000	1	1.00E+04	
Minimum - continuous	Stepminc	m	D	0.01	0.0001	0.1	
Maximum - continuous	Stepmaxc	m	D	100	1	100	

Global Parameters
2. Discharge Parameters

2.1 Discharge parameters	Symbole	Unité	Classification	valeur par défaut	plage de valeurs conseillées (min,max) / (choix possible)		Commentaires
Velocity head losses							
Excess flow valve head losses	Loss1		A	0	0	100	Facteur de friction de la vanne (pour le calcul de perte de charge) (=Equivalent pipe Lenth in **"Pipe tab section"**)
Non return valve head losses	Loss2		A	0	0	100	
Shut off valve head losses	Loss3		A	0	0	100	
Frequencies							
Frequency of bends	Bends	/m	A	0	0	10	
Frequency of couplings	Couplings	/m	A	0	0	10	
Frequency of junctions	Junctions	/m	A	0	0	10	

2.2 Defaults			Classification	valeur par défaut	plage de valeurs conseillées (min,max) / (choix possible)		Commentaires
Line length	Lpdef	m	A	10	0.01	1.00E+07	valeur par défaut de la longueur de canalisation
Pipe roughness	Z0def	m	A	4.57E-05	0	0.01	
Number of volume changes	Volchdef	/h	A	3	0	3.60E+04	
Release elevation	Zrdef	m	A	1	1		
Atmospheric expansion method	ATEX	-	B	closest to initial conditions	Isentropic, Conservation of Energy, Closest to Initial Conditions		2 modèles : isentropique et conservation de l'énergie. "Closest to initial conservation" utilise les 2 modèles puis garde les résultats du modèle qui donne le moins de variation des propriétés de rejet durant l'expansion
Tank roof failure model effects	ROOF	-	B	Instantaneous effects	Instantaneous effects, Continuous effects		

2.3 Long pipeline			Classification	valeur par défaut	plage de valeurs conseillées (min,max) / (choix possible)		Commentaires
Pipe fluid thermal coupling	MLp	-	B	No modeling of heat transfer	No modeling of heat transfer, Model heat transfer from/to the wall		
Number of time step	Lpstep	-	D	100	2	1000	
Maximum number of data points	Lpmaxpt	-	D	1000	100	1.00E+04	

2.4 Discharge Constants			Classification	valeur par défaut	plage de valeurs conseillées (min,max) / (choix possible)		Commentaires
Critical pressure greater than flow phase	Pcr	bar	D	0.3447	0	1.013	
Cappingof pipe flowrates	Qcap	-	B	Use Leak scenario, disallow flashing	No capping; Use Leak scenario, allow flashing; Use Leak scenario, disallow flashing		
Capping velocity							
Velocity capping method	Mvcap	-	B	Sonic velocity for vapour	Sonic velocity for vapour, Fixed maximum velocity		
Maximum release velocity	Vmax		D	500	0.01	2000	
Reliefe valves							
Minimum diameter ratio	Rdia	-		1	1	10	
Safety factor	Fsafety	-		1.2	1	1.5	
Equaton constants							
Venting equation constants	Kvent			24.82	1	1000	
Continuous critical weber number	Weber			12.5	1	50	Utilisé pour le calcul de taille de gouttes (taille critique par mécanisme de rupture aérodynamique)
Instantaneous critical weber number	Weberi			12.5	1	50	

2.5 Refernce			Classification	valeur par défaut	plage de valeurs conseillées (min,max) / (choix possible)		Commentaires
Modeling of forced-phase liq-liq discharge	Mliq	-	B	Use compressible flow equation	Use compressible flow equation, Use Bernoulli		
Tolerance for convergence	Tolerance		D	0.0001			
Droplet handling							
Continuous drop slip factor	Slipdrop		C	1			
Instantaneous drop slip factor	Slipdropi		C	1			
Phase data							
Default liquid fraction				1	0	1	
Minimum drop daimeter allowed	Ddmin	m	D	1.00E-08	0	1.00E-02	
Maximum drop daimeter allowed	Ddmax	m	D	0.01	0	1	

Global Parameters

3. Jet Fire

3.1 Jet Fire Radiation	Symbole	Unité	Classification	valeur par défaut	plage de valeurs conseillées (min,max) / (choix possible)		Commentaires
Radiation Intensity		kW/m2	A				
Level 1				4	0	1000	
Level 2				12.5	0	1000	
Level 3				37.5	0	1000	
Level 4					0	1000	
Level 5					0	1000	
Radiation Dose		(W/m2)^n.s	A	Unselcted	Unselected, Selected		
Level 1				1.27E+06	0		
Level 2				5.80E+06	0		
Level 3				2.51E+07	0		
Level 4					0		
Level 5					0		
Radiation Probit		-	A	Unselcted	Unselected, Selected		
Level 1				2.73			
Level 2				3.72			
Level 3				7.5			
Level 4							
Level 5							
Radiation Lethality		fraction	A	Unselcted	Unselected, Selected		
Level 1				0.01	0	1	
Level 2				0.1	0	1	
Level 3				1	0	1	
Level 4					0	1	
Level 5					0	1	
Rate modification factor			C	3	1		
Maximum exposure duration			C	20 s	0.001	100	

3.2 Jet Fire Parameters	Symbole	Unité	Classification	valeur par défaut	plage de valeurs conseillées (min,max) / (choix possible)		Commentaires
SHELL Model Options							
Crosswind andgle		degré	C	0 deg	180	180	
Correlation			B	DNV Recommended	DNV Recommended, Cook et al., Chamberlain		
Horizontal options			B	Use Johnson Method	Use Johnson Method, Use Standard Method		
Emissivity Calculation							
Emissivity Method			B	E and F calculated	E and F calculated, E supplied (F=1), E calculated, F supplied		
Flame Emissive Power (E)		kW/m2					
Emissivity fraction (F)		fraction					

3.3 Jet Fire Reference Data	Symbole	Unité	Classification	valeur par défaut	plage de valeurs conseillées (min,max) / (choix possible)		Commentaires
Maximum surface emissive power		kW/m2	C	400	0	5000	
Jet Fire Averaging		s	C	20			

Global Parameters
4. Pool Fire

4.1 Pool Fire Radiation	Symbole	Unité	Classification	valeur par défaut	plage de valeurs conseillées (min,max) / (choix possible)		Commentaires
Radiation Intensity		kW/m2	A				
Level 1				4	0	1000	
Level 2				12.5	0	1000	
Level 3				37.5	0	1000	
Level 4					0	1000	
Level 5					0	1000	
Radiation Dose		(W/m2)^n.s	A	Unselcted	Unselected, Selected		
Level 1				1.27E+06	0		
Level 2				5.80E+06	0		
Level 3				2.51E+07	0		
Level 4					0		
Level 5					0		
Radiation Probit		-	A	Unselcted	Unselected, Selected		
Level 1				2.73			
Level 2				3.72			
Level 3				7.5			
Level 4							
Level 5							
Radiation Lethality		fraction	A	Unselcted	Unselected, Selected		
Level 1				0.01	0	1	
Level 2				0.1	0	1	
Level 3				1	0	1	
Level 4					0	1	
Level 5					0	1	
Maximum exposure duration		s	A	20	0.001	100	
Calculate Dose				Not selcted	Unselected, Selected		
Calculate Probit				Not selcted	Unselected, Selected		
Calculate Lethality				Not selcted	Unselected, Selected		
Radiative fraction for general fires		fraction	A	0.4	0.001	0.999	

Global Parameters

5. Fireball and BLEVE Blast Parameters

5.1. Radiation Levels		Classification	valeur par défaut	plage de valeurs conseillées		Commentaires
Radiation Levels to report						
Radiation Intensity		A				
	Level 1		4 kW/m2	0	1000	
	Level 2		12.5 kW/m2	0	1000	
	Level 3		37.5 kW/m2	0	1000	
	Level 4			0	1000	
	Level 5			0	1000	
Radiation Dose		A	Unselcted			
	Level 1		1.27E6 (W/m2)^n.s	0		
	Level 2		5.8E6 (W/m2)^n.s	0		
	Level 3		2.51E7 (W/m2)^n.s	0		
	Level 4			0		
	Level 5			0		
Radiation Probit		A	Unselcted			
	Level 1		2.73	Pas de limite		
	Level 2		3.72			
	Level 3		7.5			
	Level 4					
	Level 5					
Radiation Lethality		A	Unselcted			
	Level 1	fraction	0.01	0	1	
	Level 2		0.1	0	1	
	Level 3		1	0	1	
	Level 4			0	1	
	Level 5			0	1	
Method of calculation		B	DNV Recommended			
TNO Model flame temperature		C	1727 ℃	726.9	9727	
Mass modification factor		C	3	1		
Maximum exposure duration		C	20 s	0.001	100	

5.2. Blast		Classification	valeur par défaut	plage de valeurs conseillées		Commentaires
Air / Ground Brust		B	Ground burst			
Ideal Gas Modeling		B	Model as Real gas			

5.3. Constants		Classification	valeur par défaut	plage de valeurs conseillées		Commentaires
Maximum SEP		C	400 kW/m2	0	5000	

Global Parameters
6. Flammable Parameters

6.1. Flammables		Classification	valeur par défaut	plage de valeurs conseillées		Commentaires
				min	max	
Calculation Method			Mass between LFL and UFL	Mass between LFL and UFL, Mass above LFL		masse inflammable = masse comprise entre la limite inférieure et la limite supérieure d'inflammabilité (après dispersion)
Report effects at			Centerline height	Centerline height, Effect height		
Height for calculation of effects			0 m	0	100	1m = hauteur stadard ATOFINA
Result Grid step in X-direction			10 m	0	1000	
LFL Fraction to finish			0.5	0.01	1	This is the concentration (as a fraction the lower flammable limit) that determines the maximum distance at which a flammable cloud can be ignited. Par défaut, Phast prend 0.5 (mélange imparfait dans le nuage). Ne se justifie pas physiquement This parameter is not used in calculating the flammable mass in the cloud, but only in setting the extent of the flash fire and the ignitable area.
Averaging Time			18.75 s	10	3600	
Cut-off time for Short continuous releases			20 s	0	1000000	If a continuous release has a very short duration, the immediate ignition of the release may give effects which are closer to a BLEVE than to a jet fire, because a jet fire would not have time to establish itself. If the duration of a continuous release is less than or equal to this Cut Off time, then the program performs BLEVE and explosion calculations in addition to the jet fire calculations, and you can compare the results.

6.2. Radiation		Classification	valeur par défaut	plage de valeurs conseillées		Commentaires
				min	max	
Observer Properties						
Observer Type			Planar	Planar, Point		Définit la cible exposée au flux thermique : plan ou point (point déconseillé)
Observer Direction			Variable	Variable, Fixed		De manière générique, on considère un cible verticale (personne debout) mais à ajuster en fonction du scénario Par défaut, phast prend une cible d'angle variable (recherche du facteur de forme maximal)
Angles (for Observer Direction = Fixed)						
Inclination			0	-180	1.80E+02	0°= cible verticale
Orientation			0	-180	1.80E+02	0°= cile parallèle à la source
Radiation Probit values (Units in Probit Equation (I term) are W/m2)						
N (radiation probit value)			1.333			
A (radiation probit value)			-36.38			
B (radiation probit value)			2.56			
Convergence Tolerance (relative) fraction			0.01	0.0001	0.1	'critère de tolérance pour la convergence du cas observer direction = variable

Global Parameters

7. Explosion Parameters

7.1. TNT		Classification	valeur par défaut	plage de valeurs conseillées		Commentaires
				min	max	
Explosion efficiency			10%	0	100	
Air / Ground Brust			Ground burst			

7.2. Early explosion		Classification	valeur par défaut	plage de valeurs conseillées		Commentaires
				min	max	
Early Explosion Mass Modification Factor			3	1		

7.3. OverPressures		Classification	valeur par défaut	plage de valeurs conseillées		Commentaires
				min	max	
Explosion Overpressure for reporting	(gauge)					
	Level 1		0.02068 bar	0	9.119	
	Level 2		0.1379 bar	0	9.119	
	Level 3		0.2068 bar	0	9.119	
	Level 4			0	9.119	
	Level 5			0	9.119	
Exoplosion location criterion			Could Front (LFL Fraction)	Could Front (LFL Fraction),Could Centroid Could Front (LFL)		
Minimum Explosive Mass			0 kg	0		

Global Parameters

8. General Parameters

General Reference Data	Symbole	Unité	Classification	valeur par défaut	plage de valeurs conseillées		Commentaires
Height for concentration output	Zoutput	m	A	0	0	100	hauteur à laquelle la concentration est calculée
Maximum Release Duration	Durmax	s	A	3600	0	1.0E+08	Ce paramètre fixe la limite maximale de la durée du rejet et de l'évaporation de flaque

Global Parameters
9. Pool Vaporization

9.1 Pool Vaporization	Symbole	Unité	Classification	valeur par défaut	plage de valeurs conseillées (min,max) / (choix possible)		Commentaires
Concentration power to use in pool rate load calculation	Powerpool	-	D	1	1	10	Pour prendre en compte la variation du débit d'évaporation au cours du temps, le logiciel divise l'évaporation en n segments de débit constant (10 maxi). La durée de chaque segment est calculée telle que la quantité évaporée est la même pour chaque segment Si le paramètre est différent de 1, alors la durée des segments est calculée pour avoir égalité des doses toxiques émises par chaque segment
Maximum number of pool evaporation rates	Npoolmax	-	D	10	0	10	Ce paramètre donne une limite au nombre de segments représentatifs que le programme utilisera pour modéliser le comportement au cours du temps de l'évaporation de flaque
Cut-offs for pool evaporation rates							
For toxic effects	Poolcut1	kg/s	D	0.001	0	100	Si débit évaporation < paramètre, alors le calcul est stoppé et le liquide résiduel reste dans la flaque.
For flammable effects	Poolcut2	kg/s	D	0.1	0	100	

9.2 Bund data	Symbole	Unité	Classification	valeur par défaut	plage de valeurs conseillées (min,max) / (choix possible)		Commentaires
Bund Description							
Height	Hbund	m	A	0	0		Valeur à ajuster dans le cas d'un calcul "Bund can fail" pour le calcul du volume de la cuvette: voir si dessous
Surface type (for pool evaporation calculations)	Spool	-	B	Concrete	Wet soil, Dry soil, Concrete, Insulating concrete, Deep open water, Shallow open water, Deep river/channel, Shallow river/channel, User-Defined (Land)		définir la nature de la surface sur laquelle se produit l'étalement et l'évaporation de la flaque
Modeling of Bund failure	Mbundfail	-	B	Bund cannot fail	Bund can fail, Bund cannot fail		Bund can fail (défaillance de la cuvette) : si la quantité de liquide rejetée est supérieure à la quantité que peut contenir la cuvette, alors le diamètre de la flaque est recalculé et peut être supérieur au diamètre de la cuvette. "Bund cannot fail" : Pour une quantité rejetée supérieure au volume de la cuvette, le diamètre maxi de la flaque est quand même pris égal au diamètre de la cuvette
Properties of User-defined Bund surface							
Minimum Thickness	Zbund	m	A				
Thermal Diffusivity	Diffbund	m2.s	A				
Roughness Factor	Z0bund	-	A				
Thermal Conductivity	Cbund	kJ/(m.s.K)	A				

Global Parameters
10. Toxic Parameters

10.1 Toxic Parameters	Symbole	Unité	Classification	valeur par défaut	plage de valeurs conseillées		Commentaires
Indoor calculation							
Indoor calculation		-	B	Unselected	Selected, Unselected		
Ventilation specification		-	B	Case specified	Case specified, Wind Speed Dependent		
Building exchange rate		/h	A	4	0		Taux de renouvellement horaire de l'air d'un bâtiment
Tail time	Ttail	s		1800	0		
Modeling of Toxic averaing time							
Method of setting time		-	B	Use fixed averaging time	Use fixed averaging time, Averaging time equals exposure time		
Cut-off fraction of toxic load		fraction		0.05	0	1	
Cut-off concentration		fraction		0	0	1	

10.2 Toxics	Symbole	Unité	Classification	valeur par défaut	plage de valeurs conseillées (min,max) / (choix possible)		Commentaires
Height for calculation of effects	Ztoxic	m	A	0	0	100	hauteur à laquelle les effets toxiques sont calculés
Minimum probability of death	Pdeath	-	A	1.00E-03	0	1	
Toxic base averaging time	Tavtox	s	A	600	10	3600	
Calculation Method							
Multi-component calculation method		-	B	Mixture probit	Mixture probit, Most Toxic Material Probit, Product of each Toxic Material		
Probit calculation method		-	B	Use Probit	Prefer Probit, Prefer Dangerous Dose, Use Probit, Use Dangerous Dose		
Result grid step in X-direction		m	D	25	1	1000	100 points max dans la direction des X pour le calcul de la dose toxique. Ce paramètre (25) correspond donc à une taille minimale de maille qui peut être augmentée par le programme si les effets vont plus loin que 100*taille d'une maille
Result grid step in Y-direction		m	D	2.5	0.1	100	20 points max dans la direction des Y pour le calcul de la dose toxique

Global Parameters

11. Weather Parameters

11.1. Atmospheric parameters	Symbole	Unité	Classification	valeur par défaut	plage de valeurs conseillées (min,max) / (choix possible)		Commentaires
General Atmospheric parameters							
Atmospheric temperature	Ta	℃	A	9.85	-73.15	76.85	
Relative humidity	Ha		A	0.7	0	1	
Solar radiation flux	Sflux	kW/m2	A	0.5	0	1.2	
Mixing layer height vs. Pasquil stability			A				
A		m		1300			
A/B		m		1080			
B		m		920			
B/C		m		880			
C		m		840			
C/D		m		820			
D		m		800			
E		m		400			
F		m		100			
G		m		100			
Building data							
Building exchange rate		/hr		4			
Tail time		s		1800			

11.2. Substrate data	Symbole	Unité	Classification	valeur par défaut	plage de valeurs conseillées (min,max) / (choix possible)		Commentaires
Surface roughness							
Surface type	Sdisp	-	B	User-defined	User-defined, or Select from the pre-defined surface type		
Surface roughness parameter	SRP	-	A	0.1	0.03474	0.3322	
Surface roughness Length	Z0	m	A	0.1832	0.001	3	
Surface temperatures							
For Dispersion calculations	Tsdisp	℃	A	9.85	-73.15	226.9	
For Pool calculations	Tspool	℃	A	9.85	-536.3	9454	

11.3. Atmospheric constants	Symbole	Unité	Classification	valeur par défaut	plage de valeurs conseillées (min,max) / (choix possible)		Commentaires
Atmospheric pressure	Pa	Pa	A	1.01E+05	5.00E+04	1.20E+05	
Atmospheric Molecular weight	Ma		A	28.97	10	100	
Atmospheric specific heat at constant pressure	Cpa	kJ/kg.K	A	1.001	0.8	1.2	
Windspeed profile	Wp	-	B	Power Law	Power Law, Uniform (constant)		
Temperature/Pressure profile	TPp	-	B	Temp.Log; Press. Line	Both Uniform (constant), Both Linear Profiles, Temp.Log; Press. Line		
Reference height for wind speed	Zrefu	m	A	10	0.1	100	hauteur de référence à laquelle on mesure la vitesse du vent
Reference height for temperature and pressure	Zreftp	m	A	0	0	100	hauteur de référence à laquelle on mesure la température et la pression
Cut-off height for power-law profile	Hcutoff	m	D	1	0.1	1	

ANNEXE 2

Résultats de l’analyse de sensibilité

1. Termes source
2. Screening
3. UDM
4. Analyse par paramètre

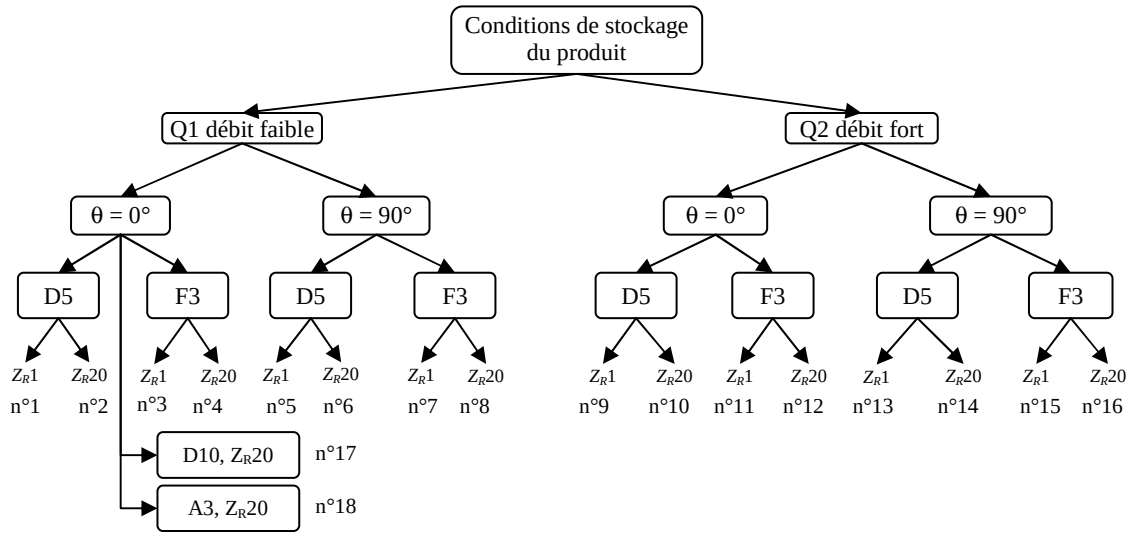
Remarque : dans tous les tableaux des résultats, les paramètres étudiés figurent sur l’axe horizontal, alors que les sorties sont présentées verticalement.

TABLEAU RÉCAPITULATIF DE L'ENSEMBLE DES SCÉNARIOS ÉTUDIÉS

n°	Paramètres fixés	Familles de paramètres étudiés	NO	NH_3	Cl_2	HF	N_2	C_6H_{14}
Termes source « Leak » et « Line rupture »								
TS		A, B, C	√	√	√	√		
Termes source « Leak » et UDM								
Screening	stabilité = D	A, B, C, D	√	√	√	√		
UDM								
1	Q1 θ0 D5 ZR1	B, C, D	√	√	√	√	√	
2	Q1 θ0 D5 ZR20		√	√	√	√	√	
3	Q1 θ0 F3 ZR1		√	√	√	√	√	
4	Q1 θ0 F3 ZR20		√	√	√	√	√	
5	Q1 θ90 D5 ZR1		√	√	√	√	√	
6	Q1 θ90 D5 ZR20		√	√	√	√		
7	Q1 θ90 F3 ZR1		√	√	√	√	√	
8	Q1 θ90 F3 ZR20		√	√	√	√		
9	Q2 θ0 D5 ZR1		√	√	√		√	√
10	Q2 θ0 D5 ZR20		√	√	√		√	√
11	Q2 θ0 F3 ZR1		√	√	√		√	√
12	Q2 θ0 F3 ZR20		√	√	√		√	√
13	Q2 θ90 D5 ZR1		√	√	√		√	√
14	Q2 θ90 D5 ZR20		√	√	√			
15	Q2 θ90 F3 ZR1		√	√	√		√	√
16	Q2 θ90 F3 ZR20		√	√	√			
17	Q1 θ0 D10 ZR20		√	√	√	√	√	√
18	Q1 θ0 A3 ZR20		√	√	√	√	√	√
Variation ± 10% des paramètres (Cas 1 : Terme source « Leak » + UDM, Cas 2 et 3 : UDM)								
Local 1	stabilité = D	A, B, C, D		√				
Local 2	Q1 θ0 F3 ZR1	B, C, D		√				
Local 3	Q1 θ0 F3 ZR1	C, D		√				

Q : débit de rejet ($kg \cdot s^{-1}$), θ : angle de rejet (°), ZR : hauteur de rejet (m)

ARBRE DES SCÉNARIOS



SORTIES ÉTUDIÉES

Les sorties du modèle UDM sont exprimées en termes de concentrations et de distances. Les sorties relatives aux scénarios NO, NH_3, Cl_2 et HF sont calculées à la hauteur moyenne d'une personne (Z = 1,5 m), alors que pour les scénarios N_2 et n-hexane, les sorties sont calculées à Z = 0 m car pour un rejet près du sol (ZR = 1 m), les concentrations correspondant aux seuils cibles ne sont jamais atteintes pour une hauteur de 1,5 m.

Pour les produits NO, NH_3, Cl_2 et HF :
C200 : Concentration à 200 m dans la direction du vent (X), ppm
C1k : Concentration à 1 km dans la direction du vent (X), ppm
C10k : Concentration à 10 km dans la direction du vent (X), ppm

Pour N_2 :
C200 : Concentration à 20 m dans la direction du vent (X), ppm
C1k : Concentration à 50 m dans la direction du vent (X), ppm
C10k : Concentration à 100 m dans la direction du vent (X), ppm

Pour n-hexane :
C200 : Concentration à 100 m dans la direction du vent (X), ppm
C1k : Concentration à 200 m dans la direction du vent (X), ppm
C10k : Concentration à 500 m dans la direction du vent (X), ppm

Symbole de sortie	NO	NH_3	Cl_2	N_2	HF
	Concentration en ppm				
Xppm	100	354 (SEI)	19 (SEI)	$1{,}43 \cdot 10^5$	100 (SEI)
Xerpg1	80 (SEI)	3400 (SEL1%)	110 (SEL1%)	$4{,}52 \cdot 10^5$	189 (SEL1%)
Xerpg2	600 (SEL 1%)	3633 (SEL5%)	127 (SEL5%)	$5 \cdot 10^5$	283 (SEL5%)

Pour l'hexane, nous avons également pris en compte des sorties spécifiques à l'inflammabilité du produit :

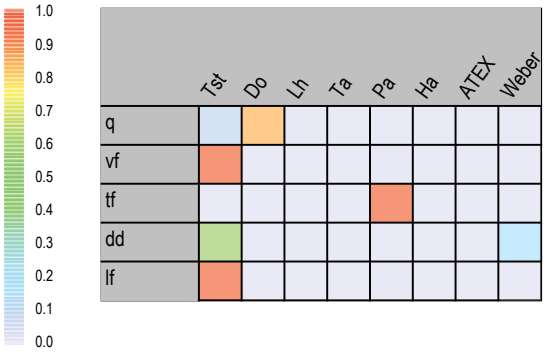
- $X_{lflfrac}$: distance correspond à 50 % de L.I.E. ($5{,}25 \cdot 10^3$ ppm), m
- X_{lfl} : distance correspond à L.I.E. ($10{,}5 \cdot 10^3$ ppm), m
- X_{ufl} : distance correspond à la L.S.E. ($76{,}8 \cdot 10^3$ ppm), m

Pour chaque scénario étudié, le **tableau relatif à la variabilité des sorties** comprend les valeurs minimales et maximales des sorties, la moyenne, la médiane et le coefficient de variation de la distribution. La colonne « Errors » du tableau indique le nombre d'exécutions de Phast qui se sont soldées par un échec qui correspond à une erreur interne de Phast (problème de convergence numérique, par exemple). La colonne « =0 » représente le nombre d'exécution de Phast pour lesquelles la valeur de sortie est égale à 0 (*cf.* § II.5.2). La colonne « =50k » représente le nombre d'exécution de Phast pour lesquelles la sortie correspondant la distance X est limitée à 50000 m (*cf.* § II.5.2). Ces deux dernières colonnes aident à interpréter les valeurs de *CV*.

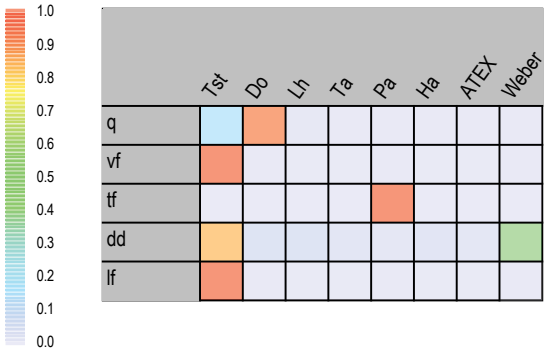
1 Source term sensitivities

Leak source term results for Ammonia

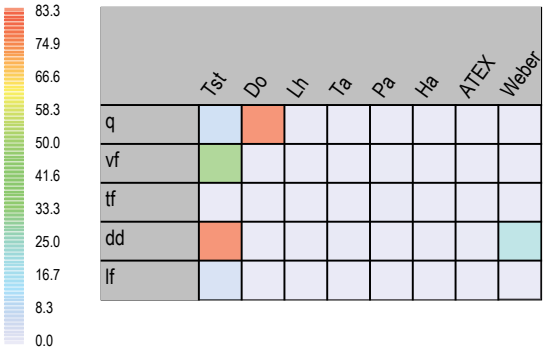
First order indices



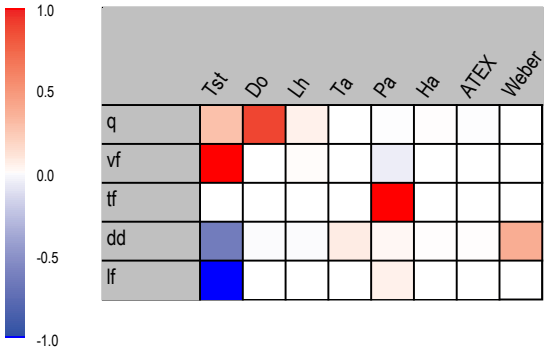
Total indices



Influence (CVSi)



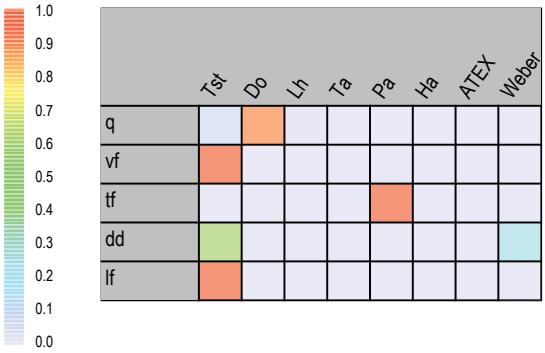
Correlation



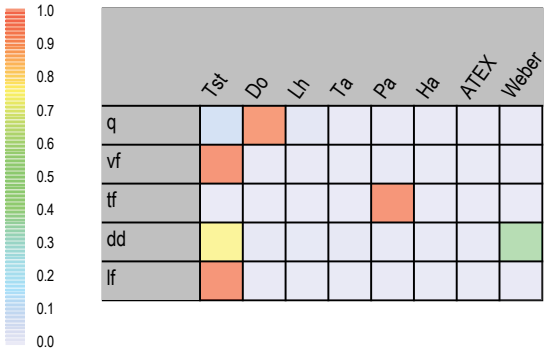
Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
q	0.0	570.31	126.49	89.21	96.72	0	0	0
vf	46.65	315.36	181.24	181.11	40.59	0	0	0
tf	239.49	243.18	241.38	241.40	0.44	0	0	0
dd	0.26	340.34	37.02	16.97	140.23	0	0	0
lf	0.78	0.97	0.87	0.87	6.07	0	0	0

Leak source term results for Chlorine

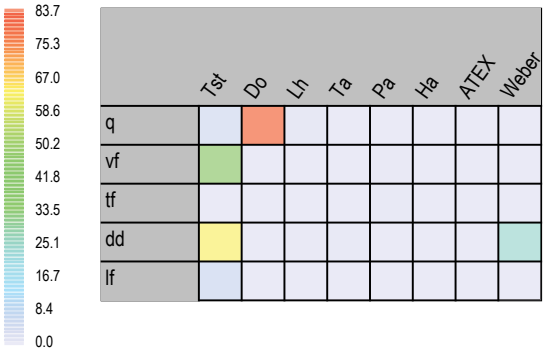
First order indices



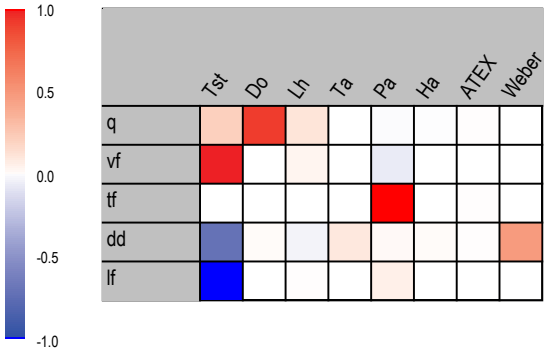
Total indices



Influence (CVSi)



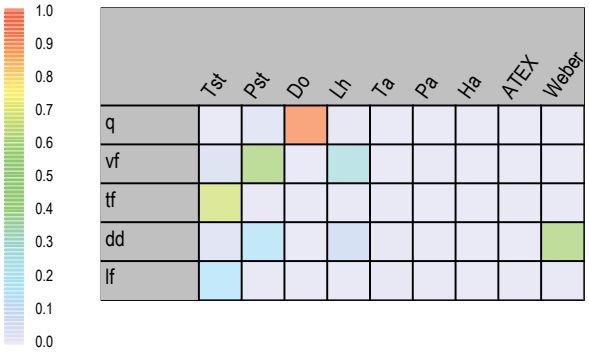
Correlation



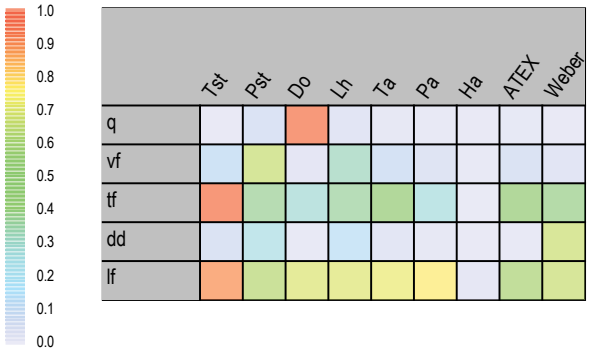
Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
q	0.01	765.17	177.71	128.03	93.88	0	0	0
vf	22.68	143.42	84.70	84.57	37.23	0	0	0
tf	238.86	243.06	241.01	241.04	0.50	0	0	0
dd	0.87	436.44	102.65	61.57	101.28	0	0	0
lf	0.79	0.97	0.88	0.88	5.65	0	0	0

Leak source term results for Hydrofluoric acid

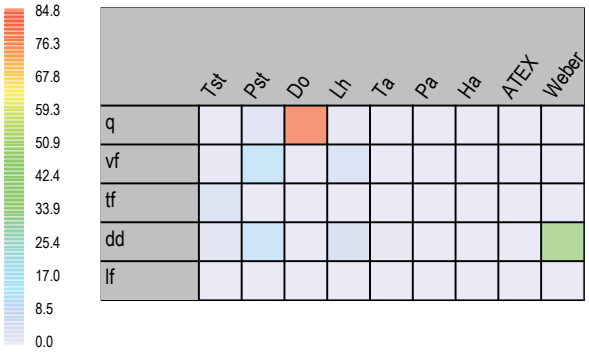
First order indices



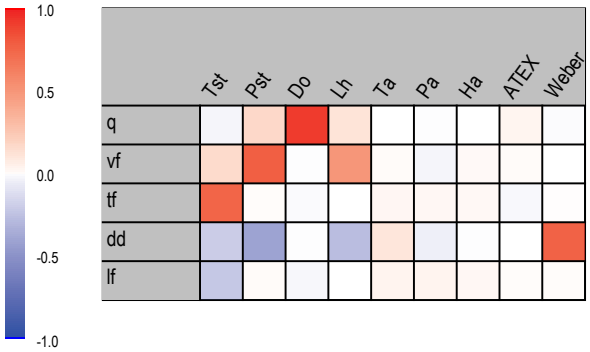
Total indices



Influence (CVSi)



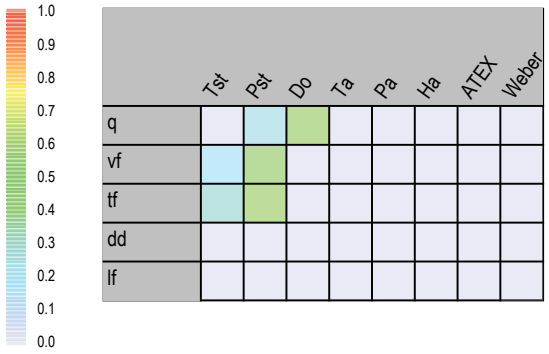
Correlation



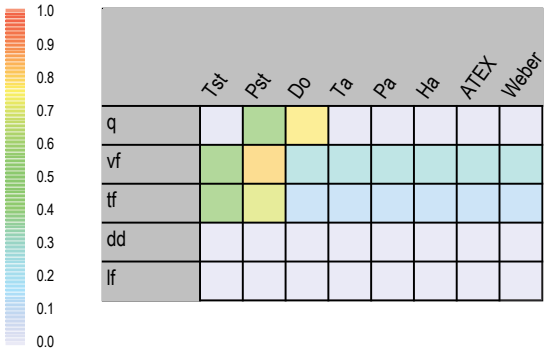
Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
q	0.00	457.69	114.44	83.24	92.87	0	14	0
vf	0.00	47.55	28.97	29.49	20.31	0	14	0
tf	0.00	297.60	276.97	277.96	6.15	0	14	0
dd	0.00	532.42	219.98	203.29	61.54	0	14	0
lf	0.00	1.00	0.99	1.00	3.95	0	14	0

Leak source term results for Nitrogen oxide

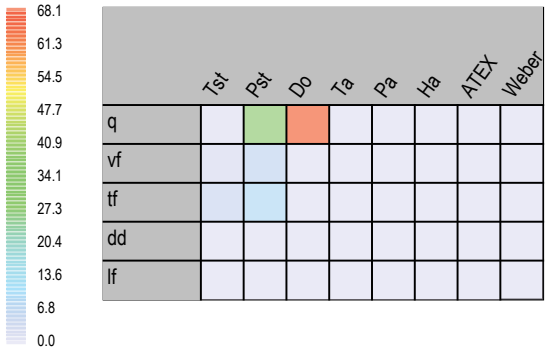
First order indices



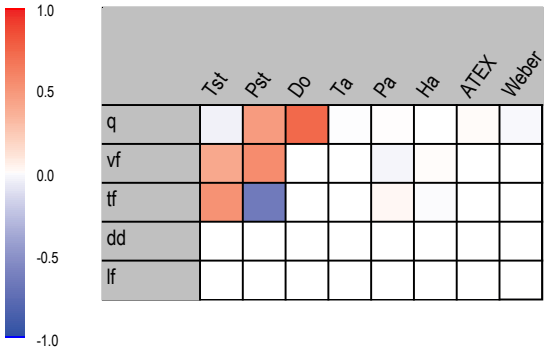
Total indices



Influence (CVSi)



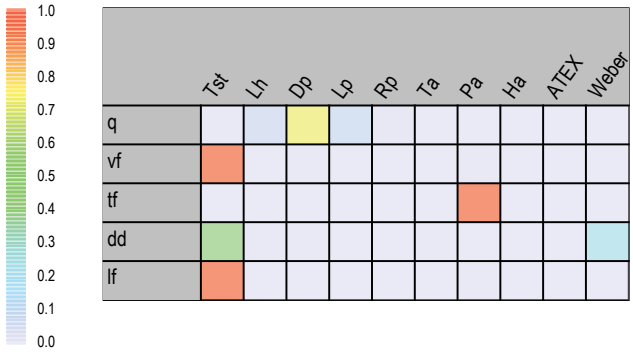
Correlation



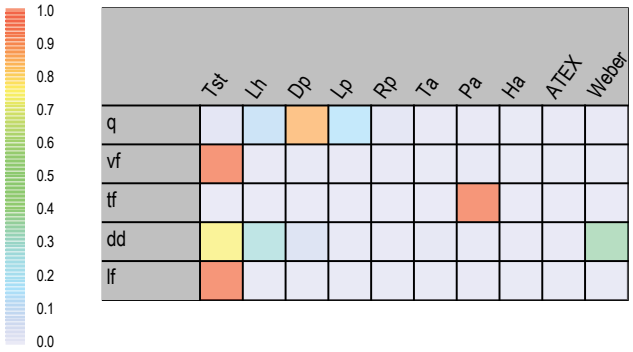
Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
q	0.00	3156.62	516.47	272.71	117.11	0	0	0
vf	119.43	543.40	482.29	490.70	10.45	0	0	0
tf	123.21	312.21	162.46	159.02	15.14	0	0	0
dd	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0	0	0
lf	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0	0	0

Line rupture source term results for Chlorine

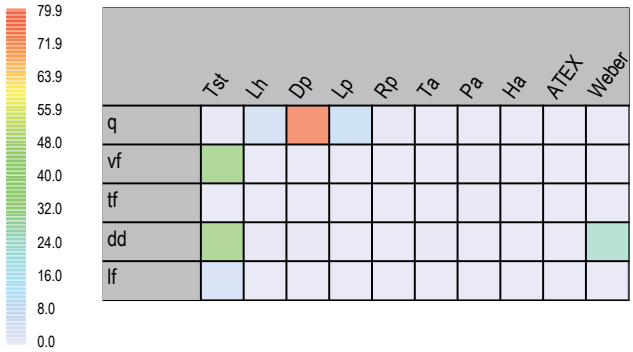
First order indices



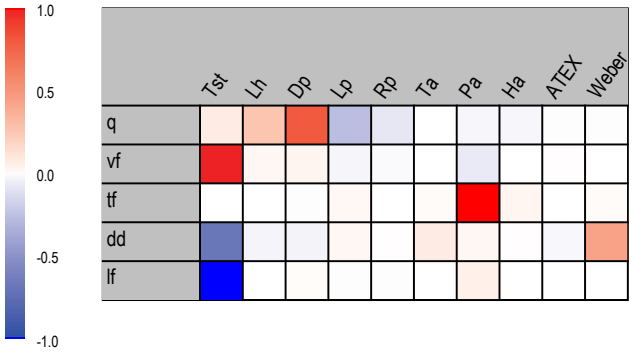
Total indices



Influence (CVSi)



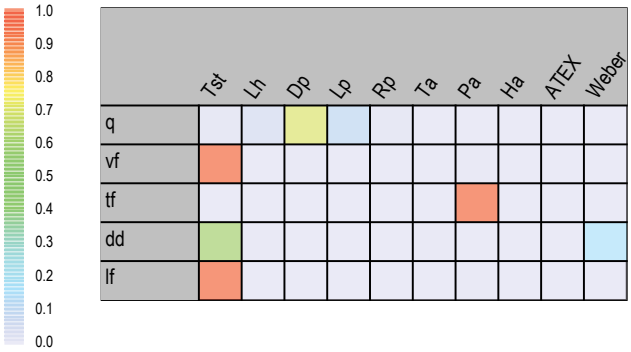
Correlation



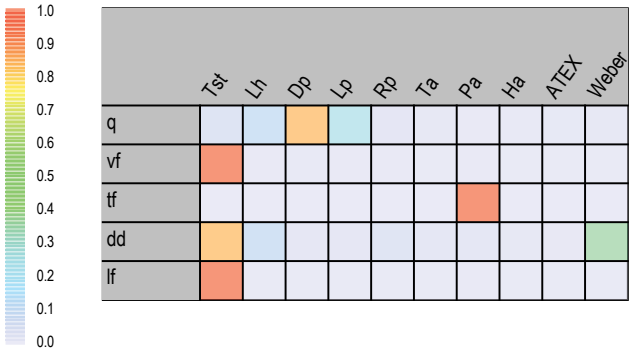
Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
q	0.26	685.11	110.03	67.80	109.37	0	0	0
vf	16.92	144.63	82.58	82.90	38.60	0	0	0
tf	238.86	243.06	241.01	241.03	0.50	0	0	0
dd	0.94	2747.78	109.82	63.65	106.73	0	0	0
lf	0.78	0.97	0.88	0.87	5.68	0	0	0

Line rupture source term results for Ammonia

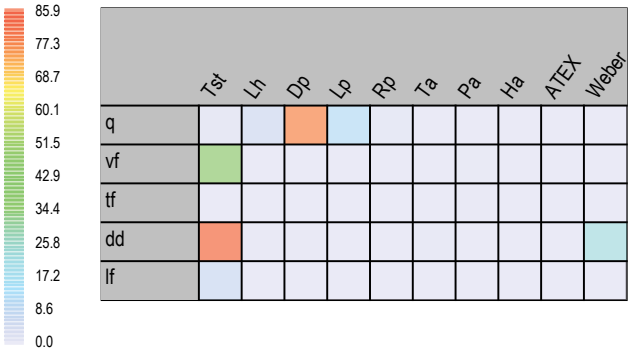
First order indices



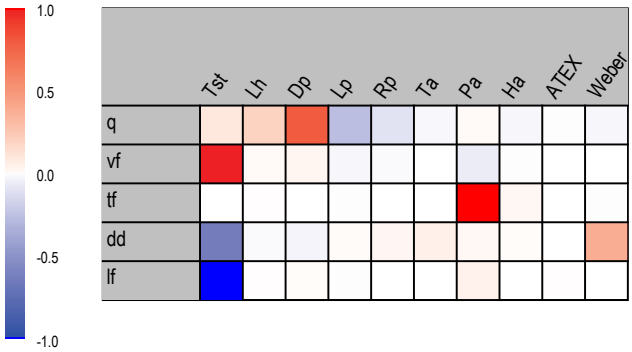
Total indices



Influence (CVSi)



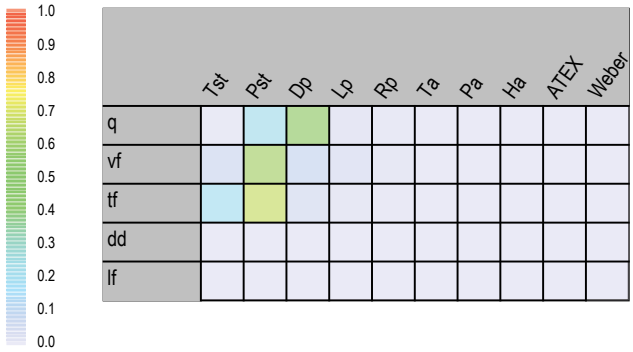
Correlation



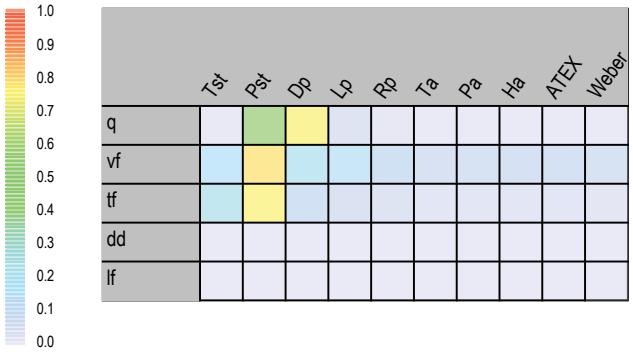
Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
q	0.08	473.98	54.19	32.96	109.82	0	0	0
vf	28.71	316.13	178.41	178.35	40.97	0	0	0
tf	239.49	243.18	241.38	241.40	0.44	0	0	0
dd	0.27	725.70	38.90	17.60	142.55	0	0	0
lf	0.77	0.97	0.87	0.87	6.10	0	0	0

Line rupture source term results for Nitrogen oxide

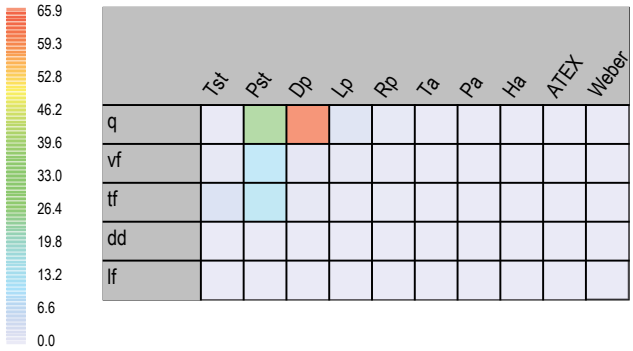
First order indices



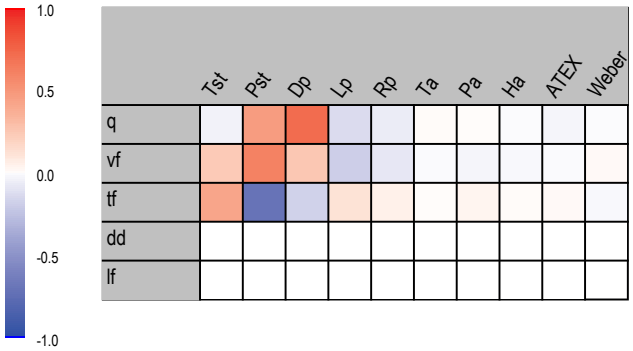
Total indices



Influence (CVSi)



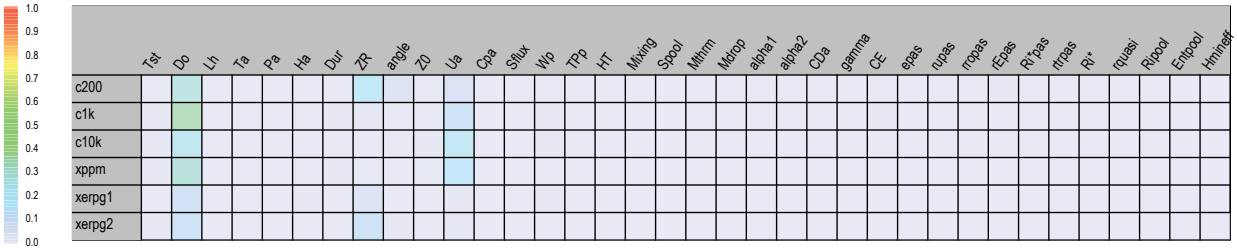
Correlation



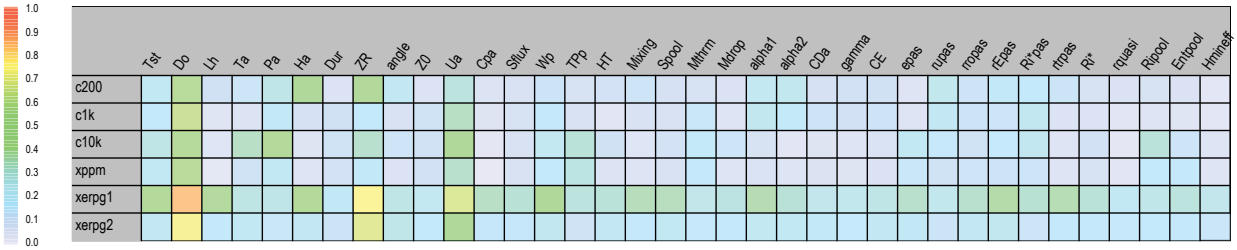
Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
q	0.0	213.87	30.84	16.00	117.88	0	0	0
vf	16.83	560.51	455.33	476.76	18.47	0	0	0
tf	127.55	321.02	178.79	171.43	18.50	0	0	0
dd	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0	0	0
lf	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0	0	0

Screening results for Ammonia

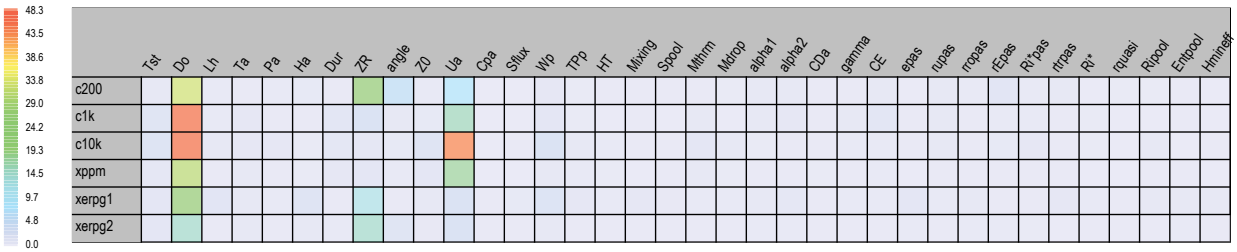
First order indices



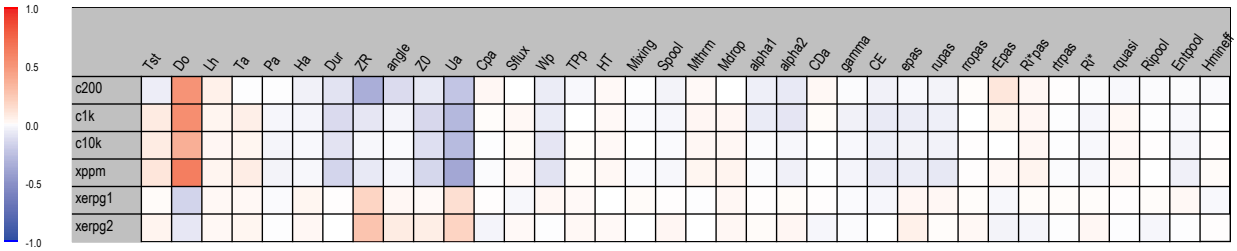
Total indices



Influence (CVSi)



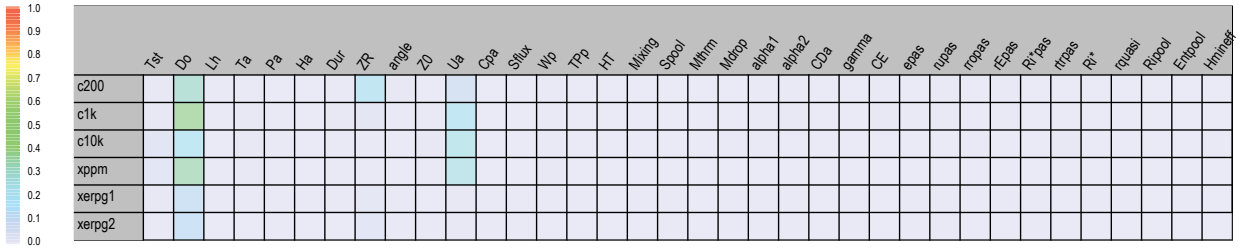
Correlation



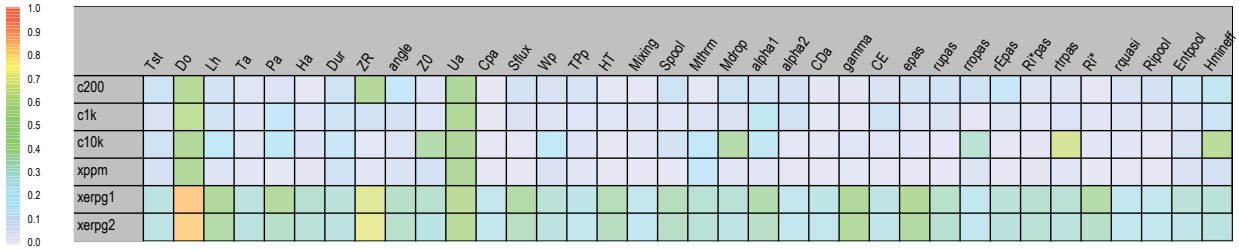
Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
c200	0.00	103910.00	3125.00	1937.10	127.04	498	246	0
c1k	0.00	46188.00	757.94	464.98	138.53	498	3	0
c10k	0.00	6153.70	37.62	16.95	221.70	498	0	0
xppm	0.00	50000.00	1658.51	1218.75	109.56	498	4691	2
xerpg1	0.00	50000.00	7064.71	659.93	234.23	498	4697	3807
xerpg2	0.00	50000.00	19387.85	439.45	124.82	498	4697	11340

Screening results for Chlorine

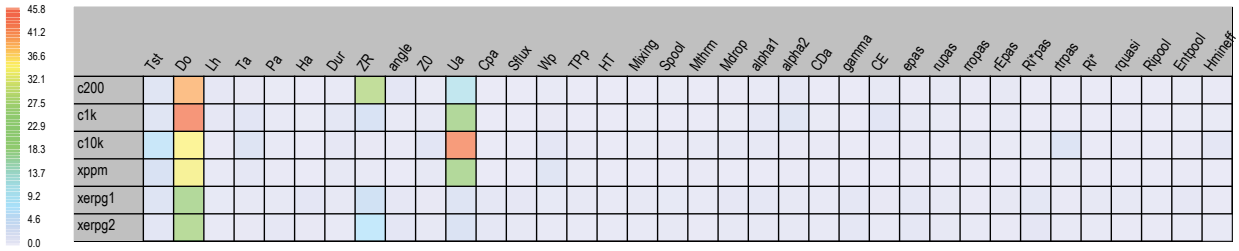
First order indices



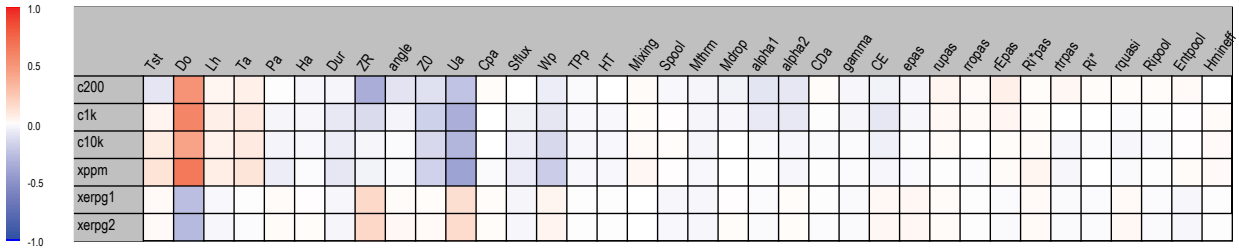
Total indices



Influence (CVSi)



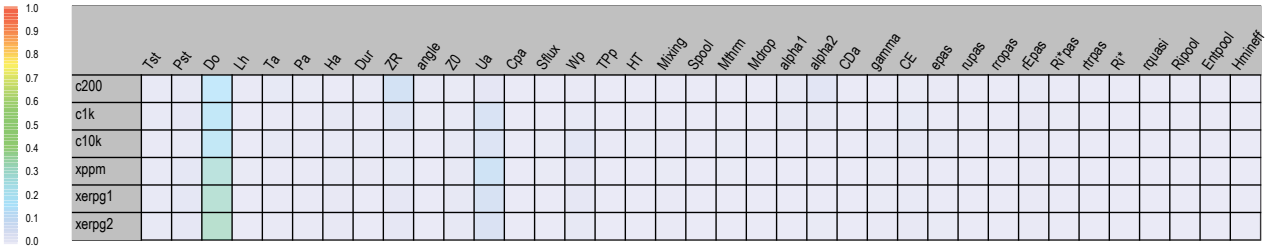
Correlation



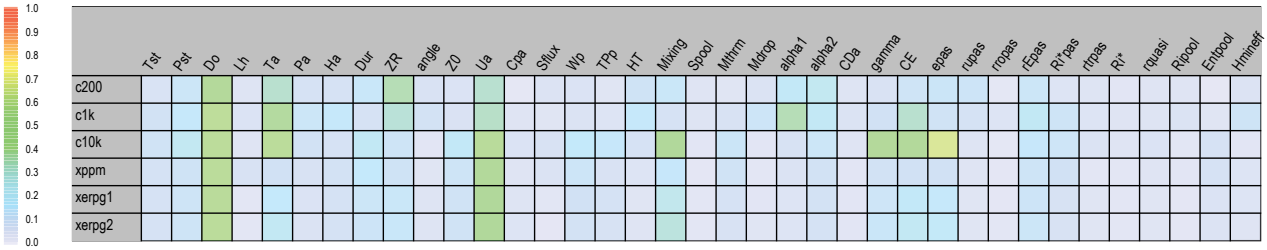
Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
c200	0.00	70804.00	1408.54	803.20	132.26	75	286	0
c1k	0.00	8034.20	284.32	178.79	123.51	74	7	0
c10k	0.00	1183.20	12.41	6.21	181.35	74	1	0
xppm	0.00	50000.00	6458.02	4641.95	102.21	74	1901	44
xerpg1	0.00	50000.00	6359.07	1568.85	224.65	74	1901	2866
xerpg2	0.00	50000.00	6761.06	1453.55	222.29	74	1901	3201

Screening results for Hydrofluoric acid

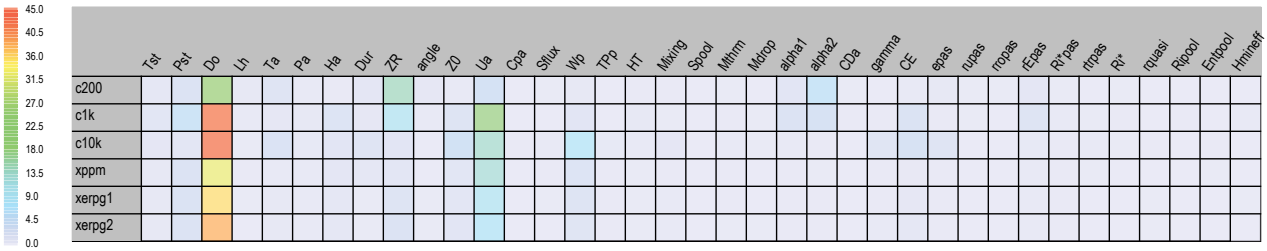
First order indices



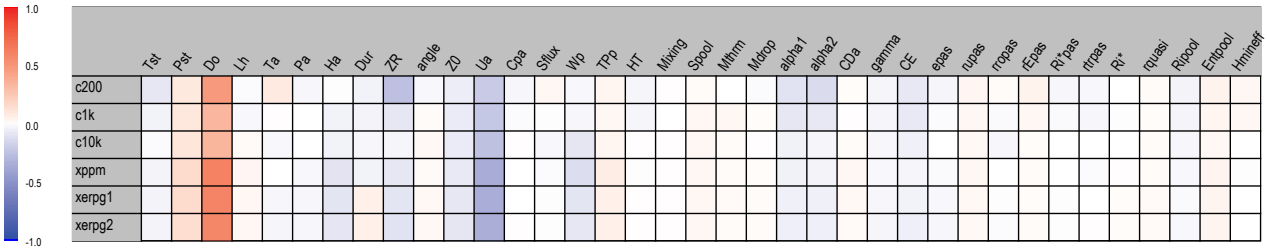
Total indices



Influence (CVSi)



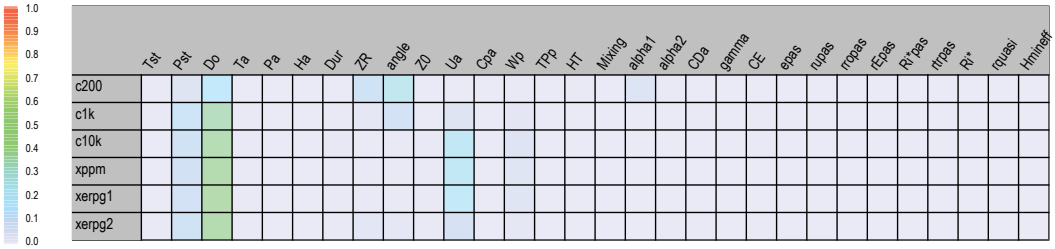
Correlation



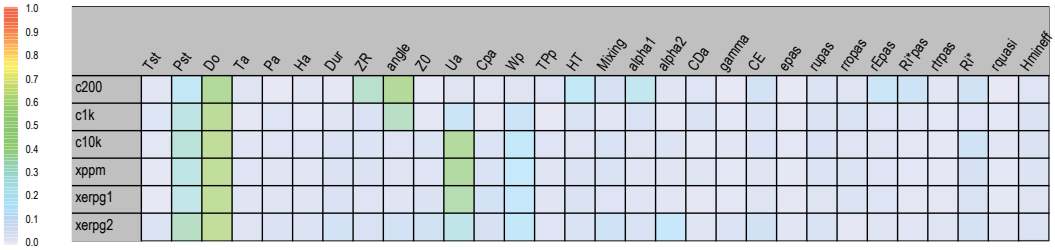
Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
c200	0.00	240971.30	4957.47	2287.10	160.96	9	468	0
c1k	0.00	138040.20	724.76	303.00	247.74	9	544	0
c10k	0.00	3781.43	27.10	10.53	250.46	11	623	0
xppm	0.00	50000.00	3236.89	2126.30	115.45	9	3484	3
xerpg1	0.00	50000.00	1813.92	1232.81	117.95	9	4815	1
xerpg2	0.00	50000.00	1372.30	946.19	121.62	9	5573	1

Screening results for Nitrogen oxide

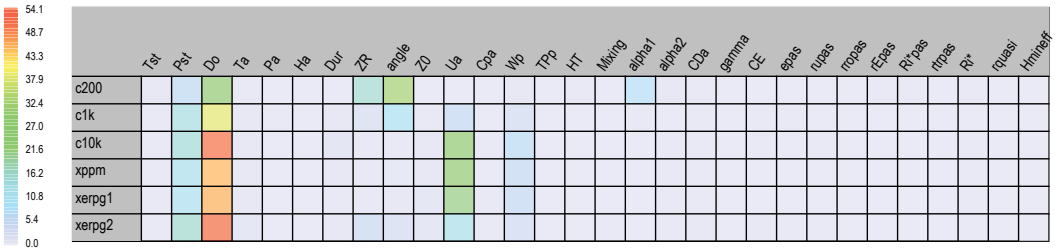
First order indices



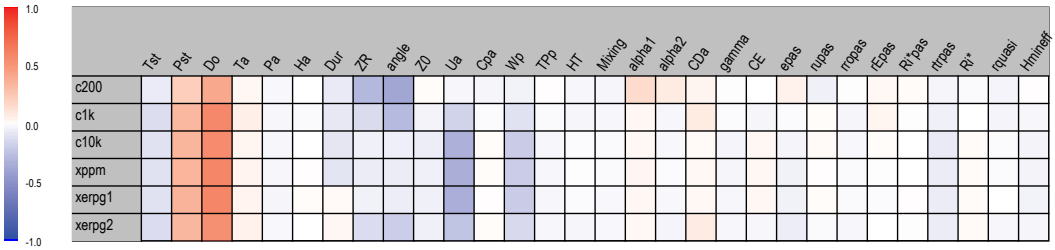
Total indices



Influence (CVSi)



Correlation

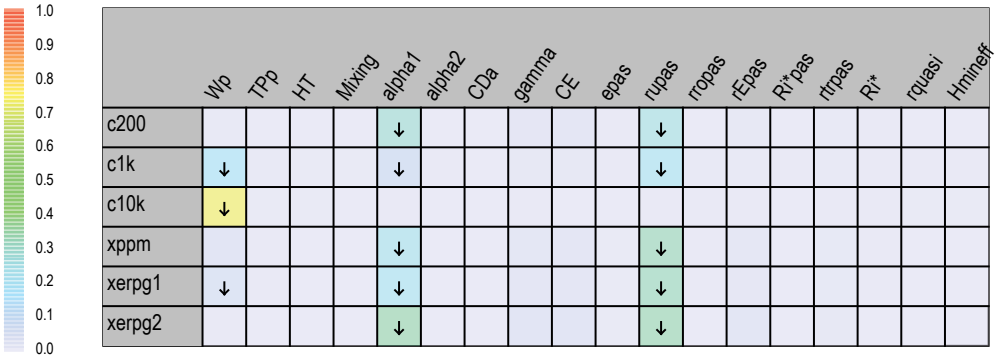


Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
c200	0.00	27229.20	1154.13	603.85	143.71	1	624	0
c1k	0.00	9112.56	561.52	366.82	112.26	0	32	0
c10k	0.00	1254.58	54.37	24.05	142.72	2	3	0
xppm	0.00	51033.71	5762.26	3417.26	122.07	0	3557	97
xerpg1	0.00	50059.70	5851.81	3469.93	122.60	0	3349	109
xerpg2	0.00	21975.16	813.84	328.27	146.20	0	11718	0

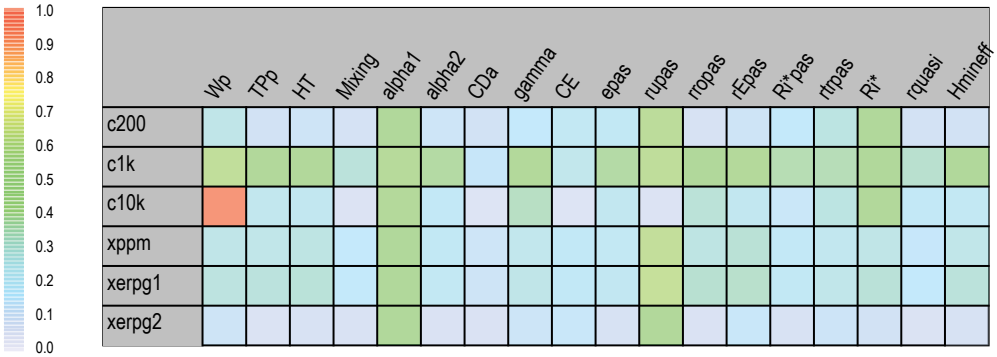
3 Scenario sensitivities

Scenario NO-1 (Nitrogen oxide, low release rate, horizontal release near ground D5)

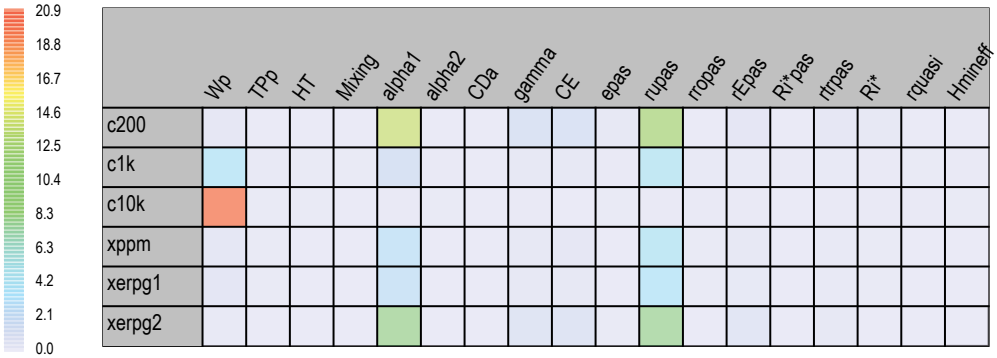
First order indices



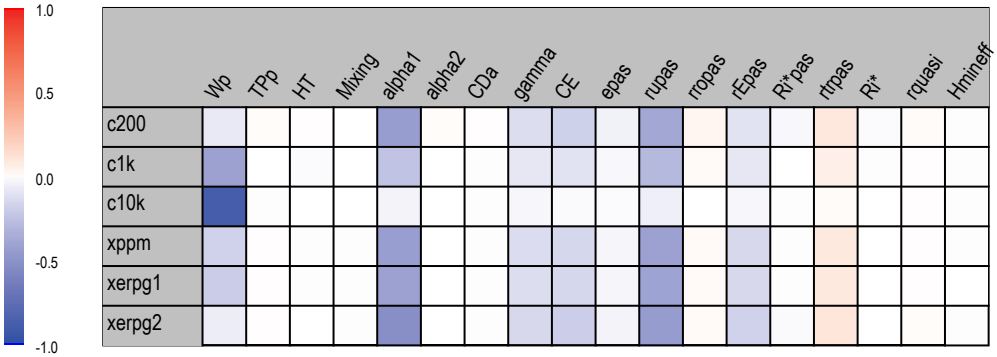
Total indices



Influence (CVSi)



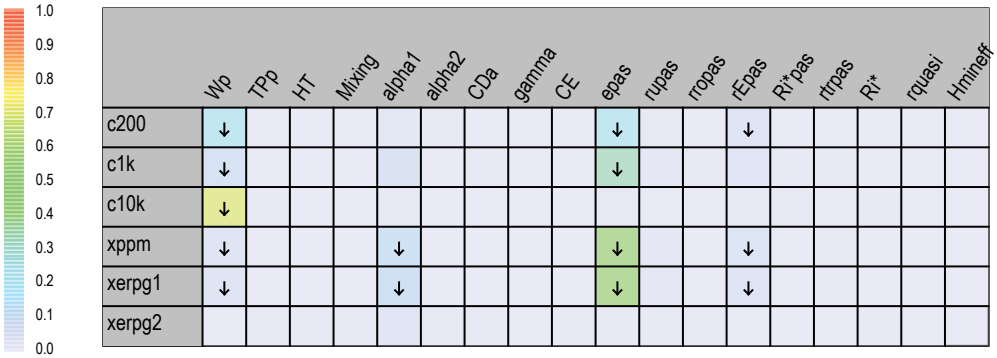
Correlation



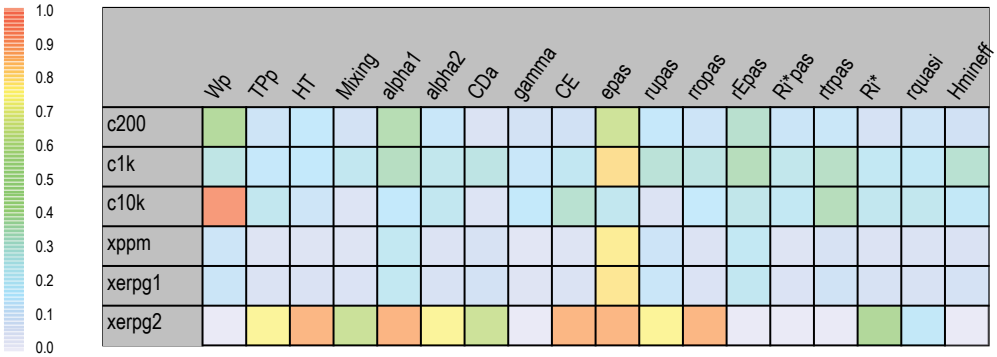
Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
c200	62.33	5873.64	427.99	365.69	50.26	0	0	0
c1k	8.20	129.09	23.52	23.03	20.78	0	0	0
c10k	0.31	4.71	0.57	0.70	28.50	0	0	0
xppm	127.97	1183.84	434.37	422.89	12.73	0	0	0
xerpg1	157.52	1367.20	494.47	482.33	11.71	0	0	0
xerpg2	24.03	466.42	156.97	149.37	23.93	0	0	0

Scenario NO-2 (Nitrogen oxide, low release rate, horizontal elevated release D5)

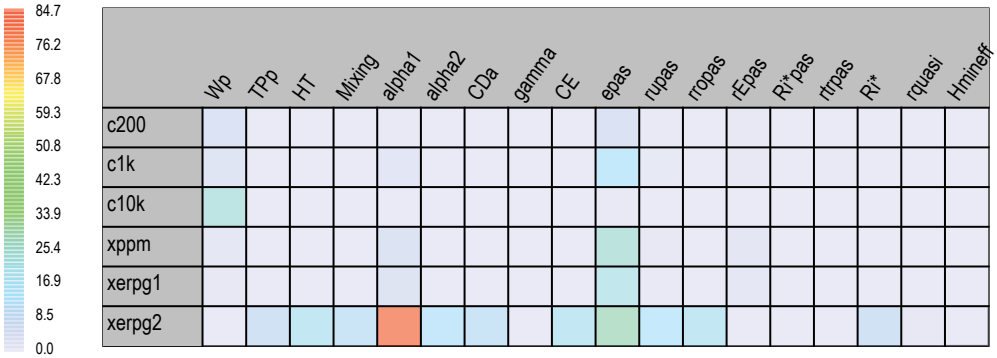
First order indices



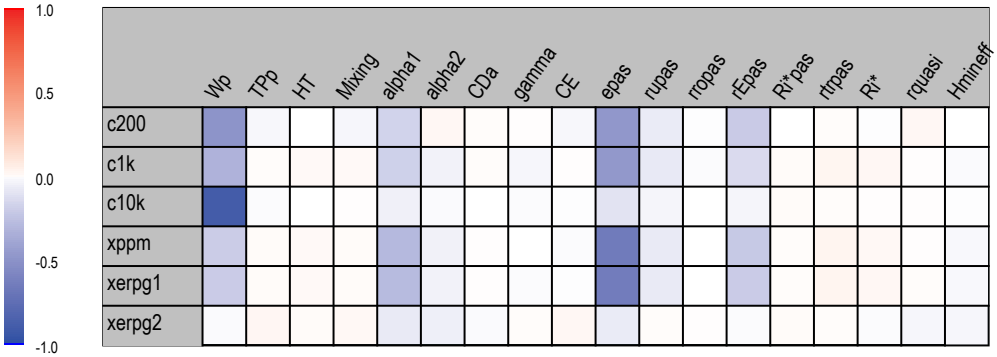
Total indices



Influence (CVSi)



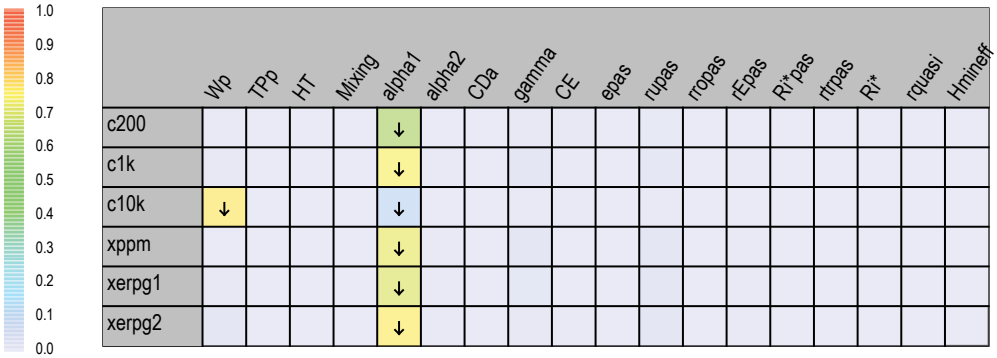
Correlation



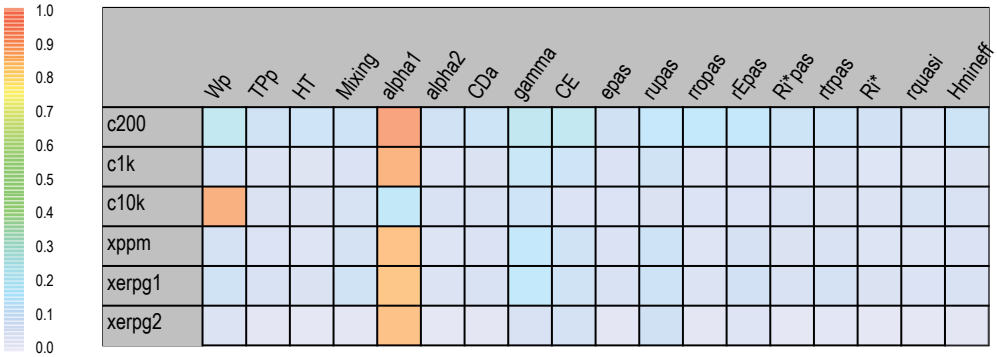
Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
c200	0.00	226.67	120.59	115.58	25.18	0	5	0
c1k	9.92	138.42	15.79	14.86	43.26	0	0	0
c10k	0.31	2.83	0.47	0.58	31.94	0	0	0
xppm	143.27	1265.92	275.92	237.91	42.49	0	0	0
xerpg1	191.60	1462.95	332.47	293.95	36.40	0	0	0
xerpg2	0.00	646.29	0.84	0.00	2337.10	0	19853	0

Scenario NO-3 (Nitrogen oxide, low release rate, horizontal release near ground F3)

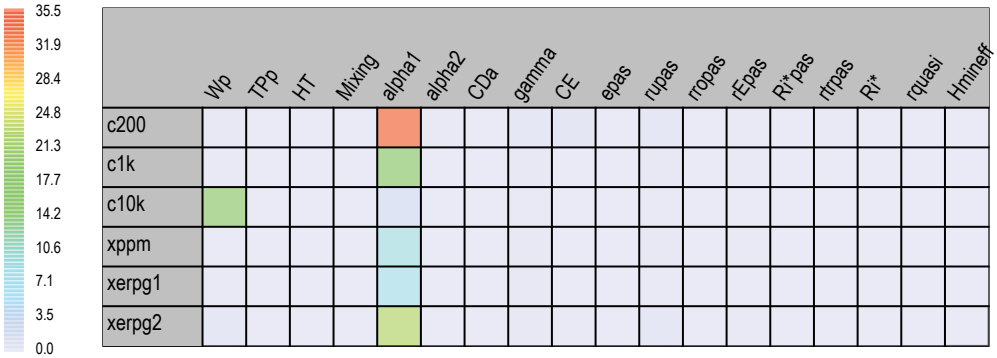
First order indices



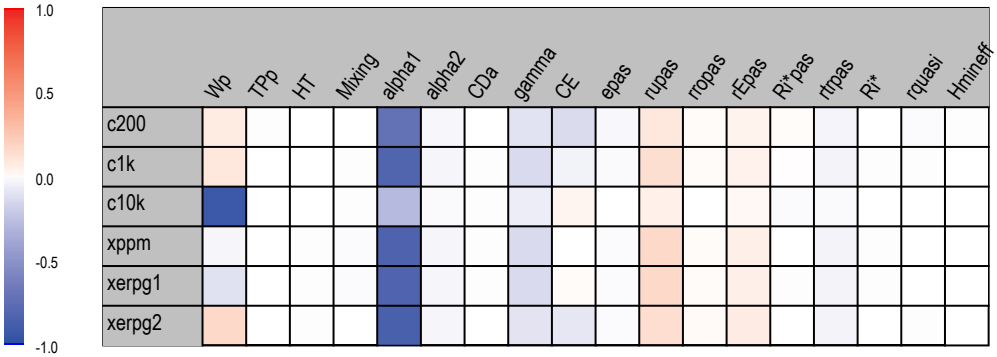
Total indices



Influence (CVSi)



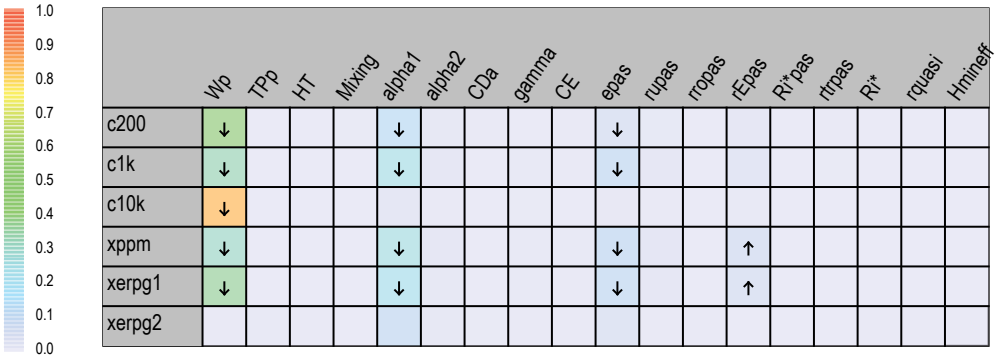
Correlation



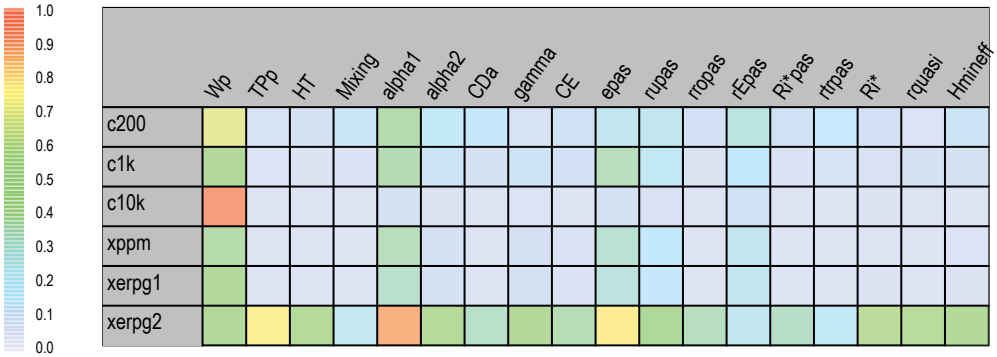
Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
c200	449.13	12114.40	1246.49	1038.43	56.80	0	0	0
c1k	62.13	473.96	176.73	168.04	22.45	0	0	0
c10k	1.55	14.22	6.90	6.89	19.22	0	0	0
xppm	696.32	2395.94	1491.49	1473.87	12.26	0	0	0
xerpg1	824.35	2763.35	1751.03	1734.34	11.33	0	0	0
xerpg2	150.46	892.07	367.57	351.72	29.38	0	0	0

Scenario NO-4 (Nitrogen oxide, low release rate, horizontal elevated release F3)

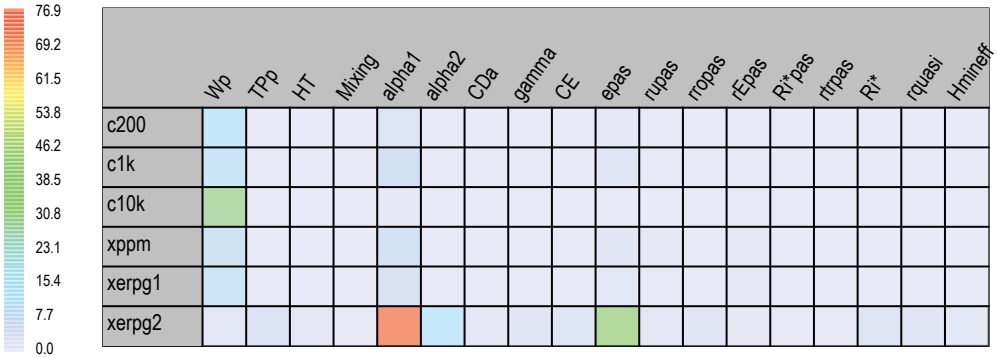
First order indices



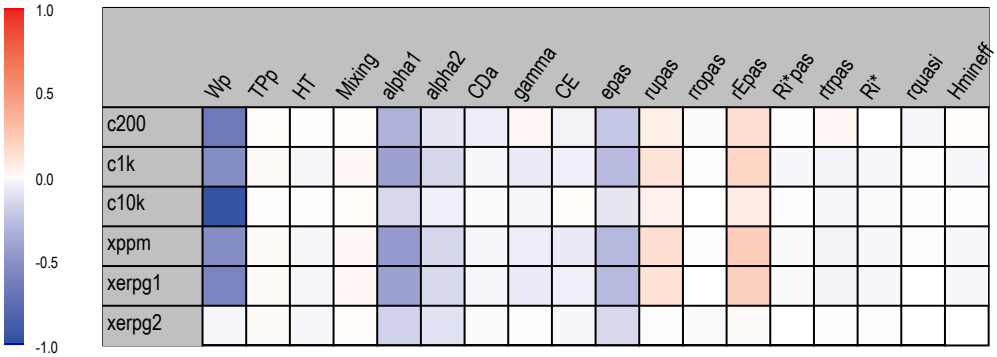
Total indices



Influence (CVSi)



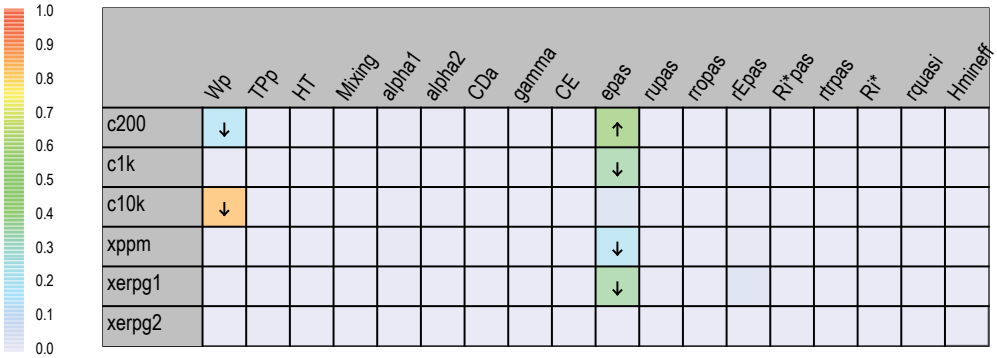
Correlation



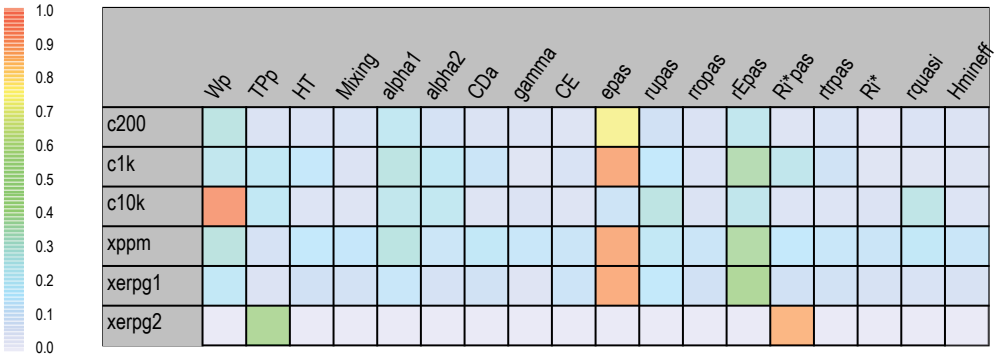
Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
c200	0.00	818.59	248.09	228.51	34.17	0	3	0
c1k	39.62	408.56	78.93	76.20	31.40	0	0	0
c10k	2.26	9.61	4.55	4.94	34.75	0	0	0
xppm	341.24	2055.26	787.00	770.52	28.02	0	0	0
xerpg1	462.89	2366.13	968.05	955.79	25.90	0	0	0
xerpg2	0.00	830.08	5.37	0.00	870.62	0	19610	0

Scenario NO-17 (Nitrogen oxide, low release rate, horizontal elevated release A3)

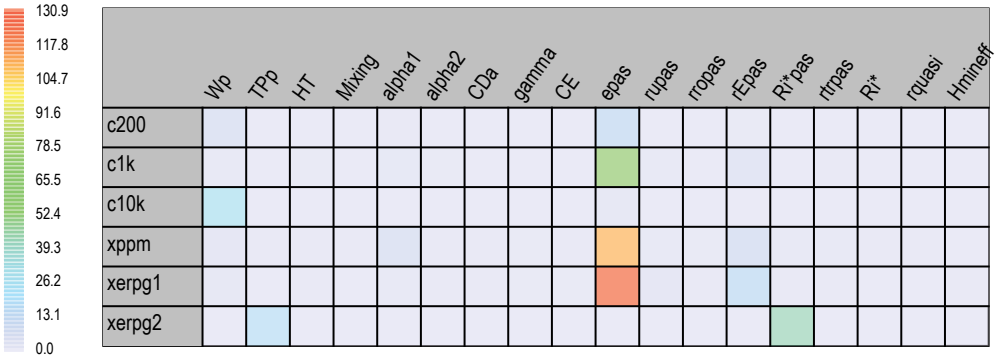
First order indices



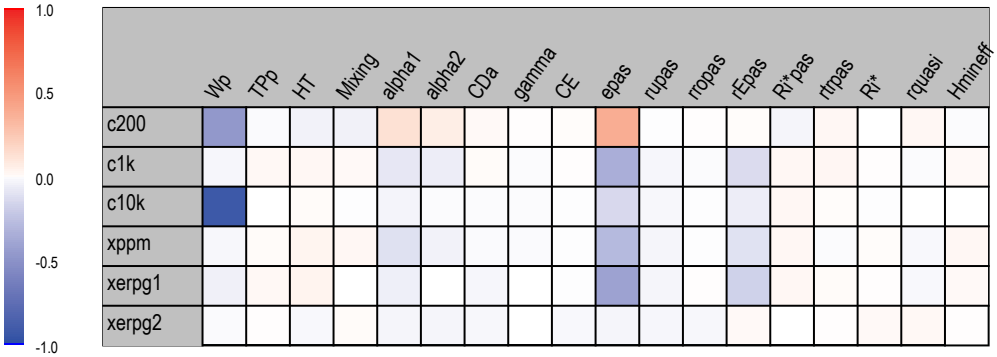
Total indices



Influence (CVSi)



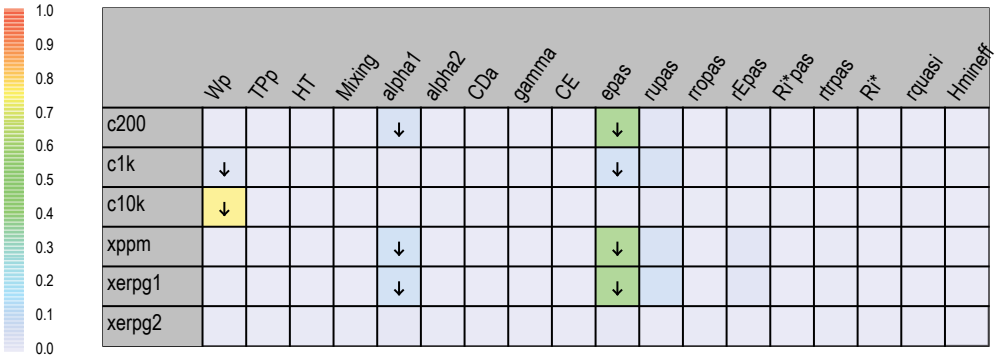
Correlation



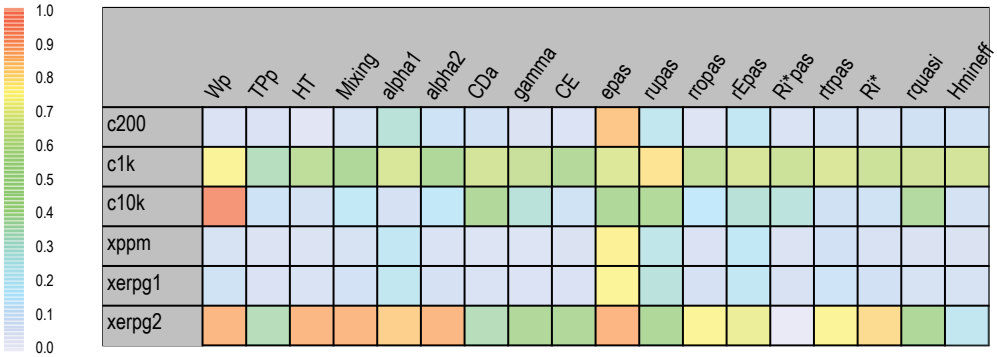
Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
c200	0.00	90.44	48.75	49.69	31.06	0	42	0
c1k	5.18	462.75	10.19	7.64	148.82	0	0	0
c10k	0.16	1.50	0.24	0.29	30.96	0	0	0
xppm	0.00	1758.04	27.03	0.00	554.31	0	19229	0
xerpg1	0.00	1836.45	54.34	0.00	364.40	0	18264	0
xerpg2	0.00	972.89	0.24	0.00	5803.76	0	19884	0

Scenario NO-18 (Nitrogen oxide, low release rate, horizontal elevated release D9)

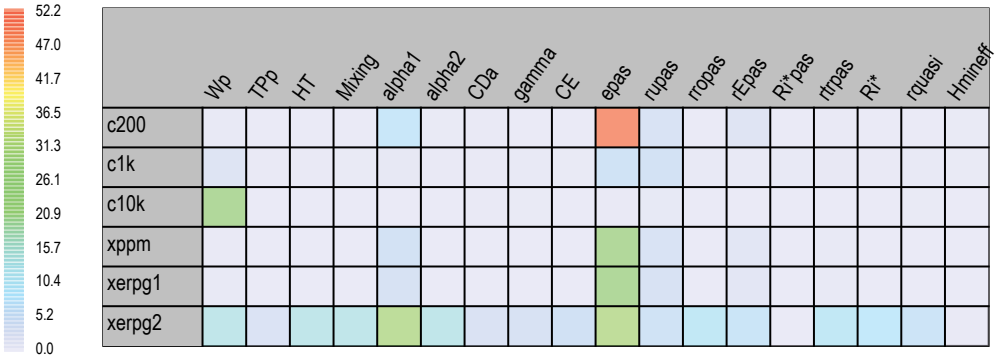
First order indices



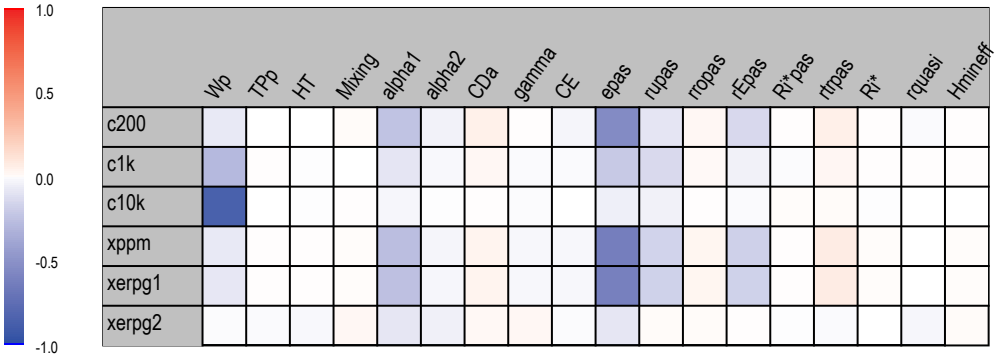
Total indices



Influence (CVSi)



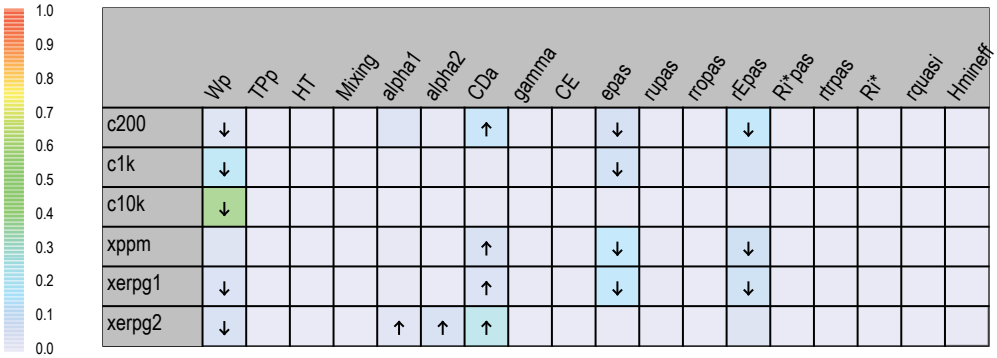
Correlation



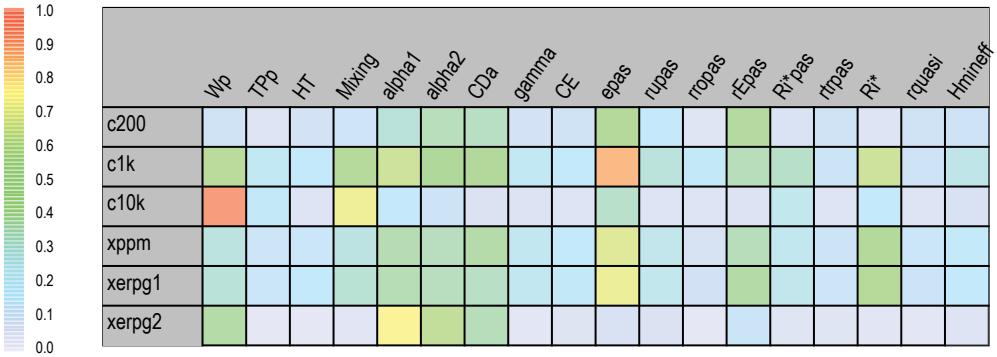
Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
c200	0.00	803.55	70.05	43.57	102.90	0	0	0
c1k	1.80	68.04	2.78	2.87	62.95	0	0	0
c10k	0.04	0.69	0.06	0.08	32.61	0	0	0
xppm	76.60	786.00	140.72	113.98	49.78	0	0	0
xerpg1	94.18	904.43	159.99	132.23	45.26	0	0	0
xerpg2	0.00	442.00	0.96	0.00	1766.85	0	19825	0

Scenario NO-5 (Nitrogen oxide, low release rate, vertical release near ground D5)

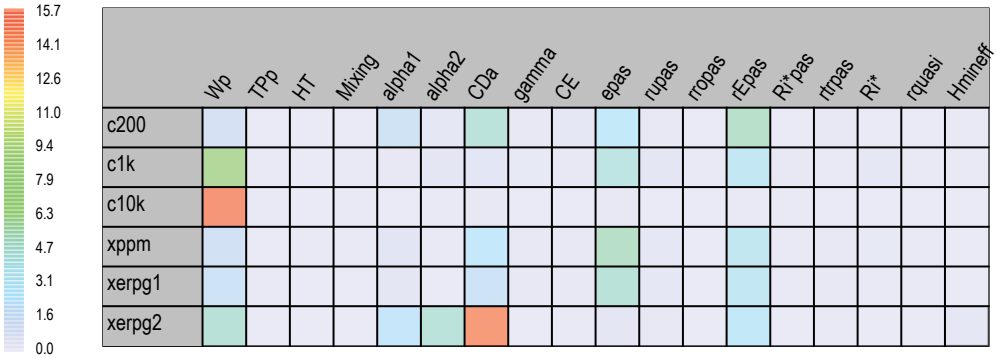
First order indices



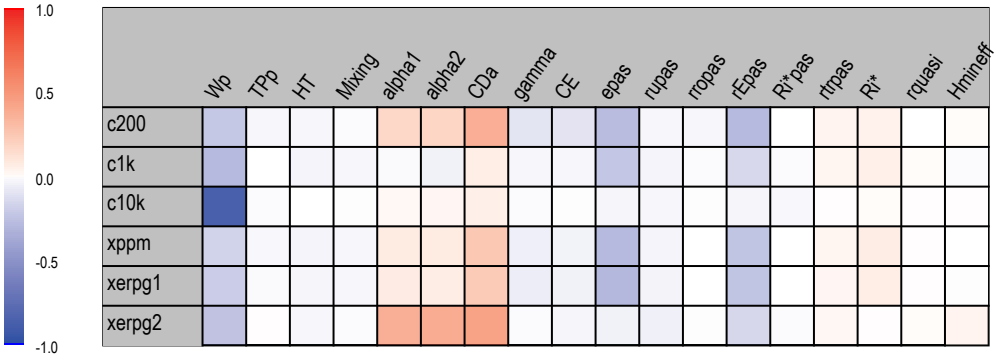
Total indices



Influence (CVSi)



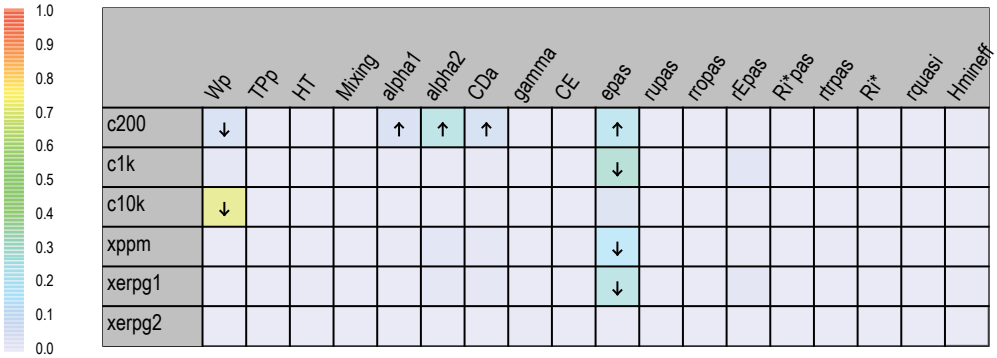
Correlation



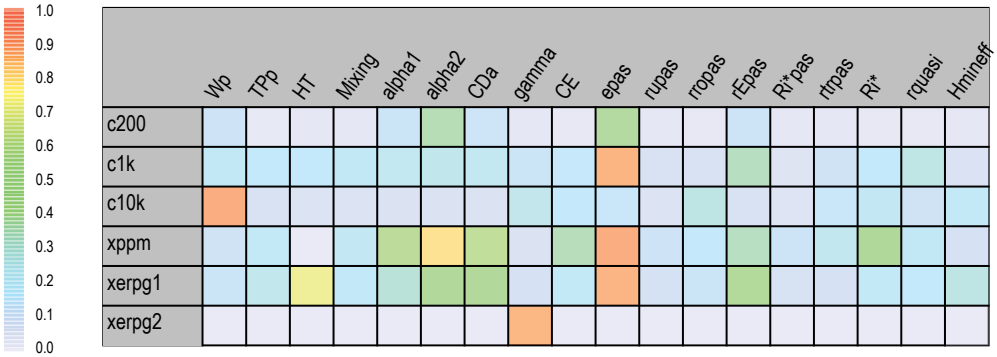
Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
c200	0.00	552.56	156.10	147.39	33.16	0	18	0
c1k	3.80	271.86	15.89	15.44	45.54	0	0	0
c10k	0.27	6.59	0.49	0.53	32.43	0	0	0
xppm	0.00	1565.75	279.47	268.57	33.78	0	218	0
xerpg1	0.00	1659.03	329.35	318.03	29.89	0	155	0
xerpg2	0.00	802.33	38.53	40.46	63.74	0	1100	0

Scenario NO-6 (Nitrogen oxide, low release rate, vertical elevated release D5)

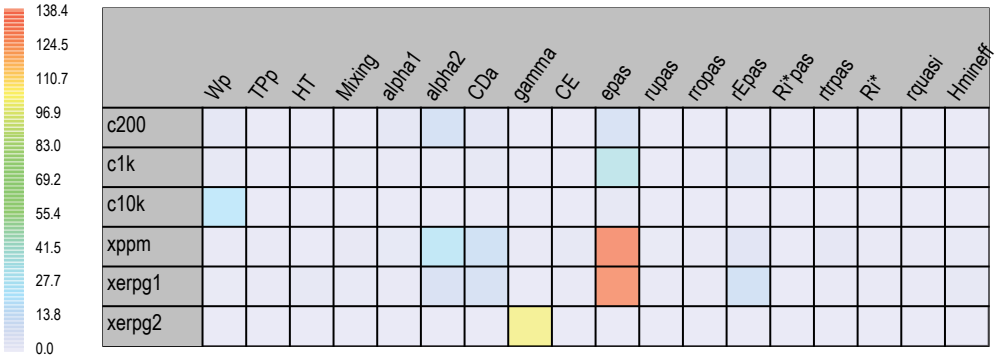
First order indices



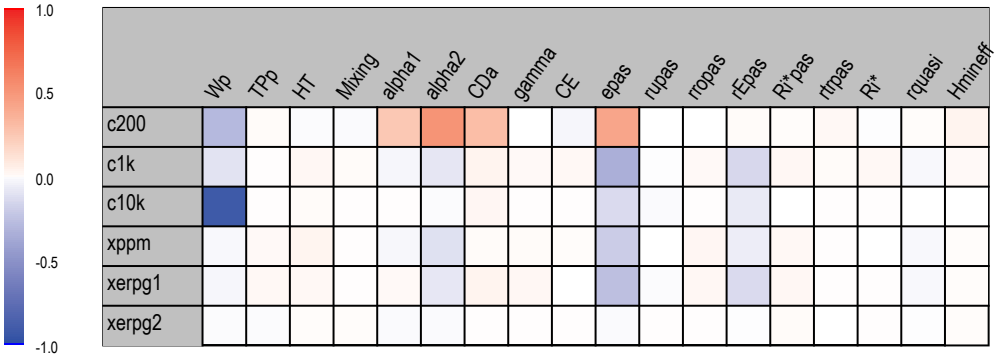
Total indices



Influence (CVSi)



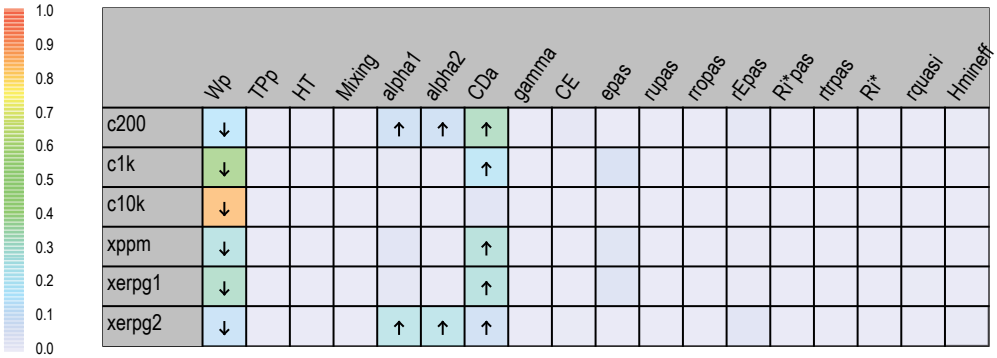
Correlation



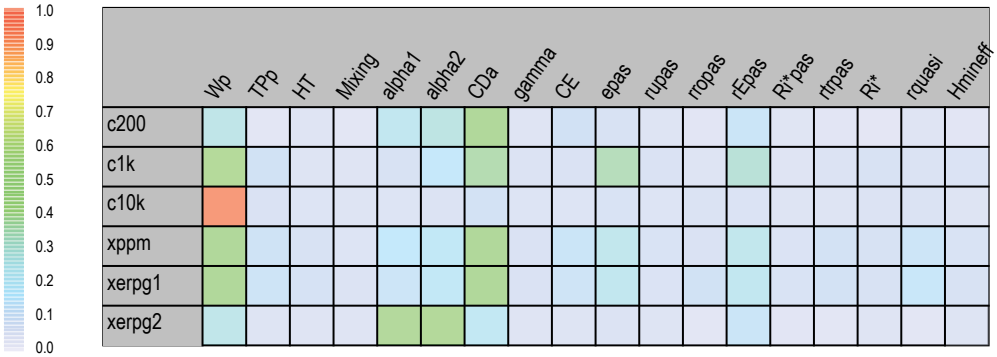
Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
c200	0.00	85.54	42.37	46.41	44.71	1	111	0
c1k	0.00	578.44	14.25	11.92	111.86	0	3	0
c10k	0.21	2.86	0.43	0.51	31.95	0	0	0
xppm	0.00	1655.86	16.35	0.00	815.61	0	19578	0
xerpg1	0.00	1879.92	36.85	0.00	506.38	0	18678	0
xerpg2	0.00	1225.10	0.06	0.00	14103.19	0	19889	0

Scenario NO-7 (Nitrogen oxide, low release rate, vertical release near ground F3)

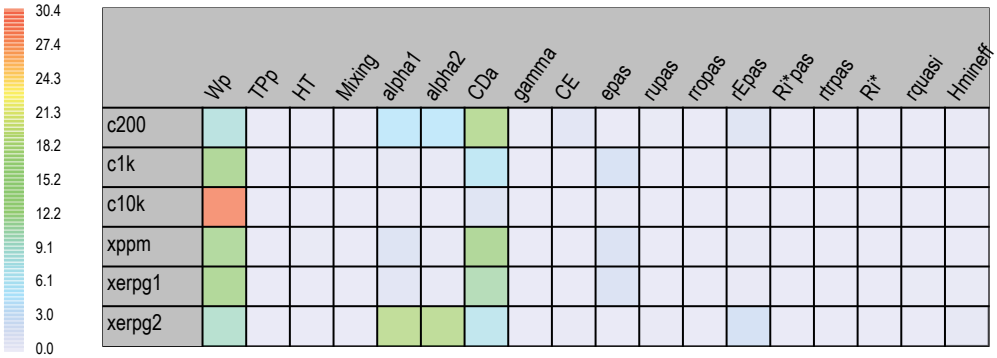
First order indices



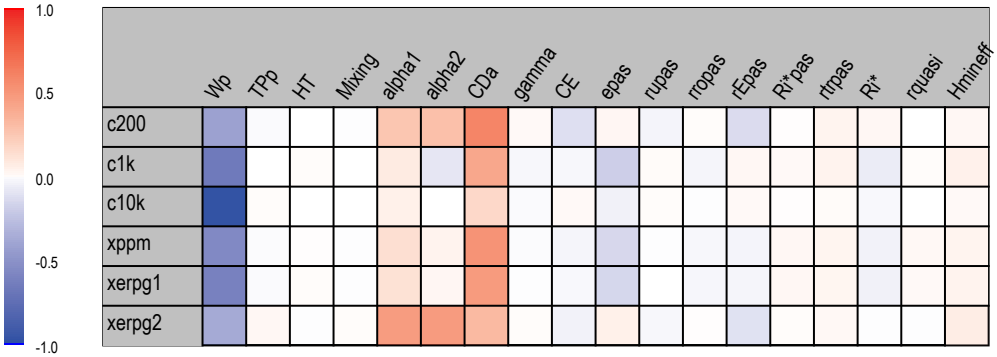
Total indices



Influence (CVSi)



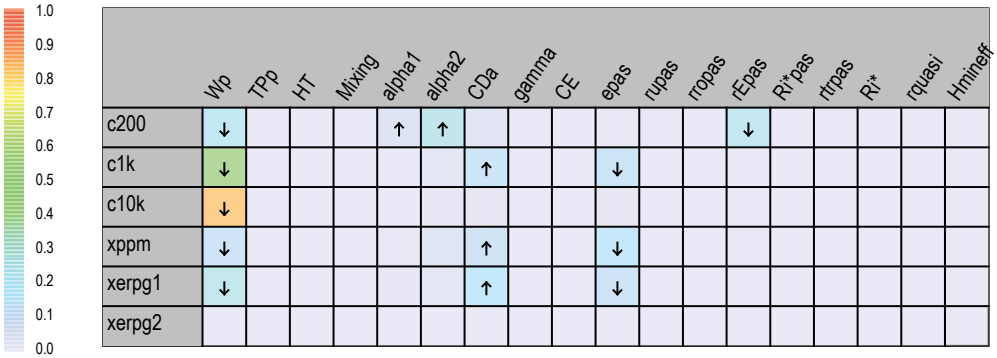
Correlation



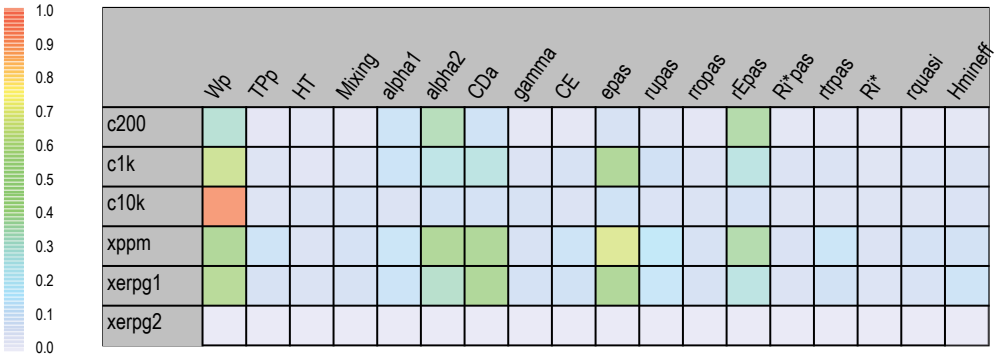
Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
c200	0.00	540.89	195.73	196.61	53.64	0	60	0
c1k	0.06	391.49	71.22	69.08	31.98	0	0	0
c10k	1.52	9.01	4.45	4.72	35.90	0	0	0
xppm	0.00	2143.49	655.77	683.51	45.70	0	712	0
xerpg1	0.00	2323.54	841.19	863.19	39.79	0	545	0
xerpg2	0.00	95.69	25.41	26.03	76.24	0	3069	0

Scenario NO-8 (Nitrogen oxide, low release rate, vertical elevated release F3)

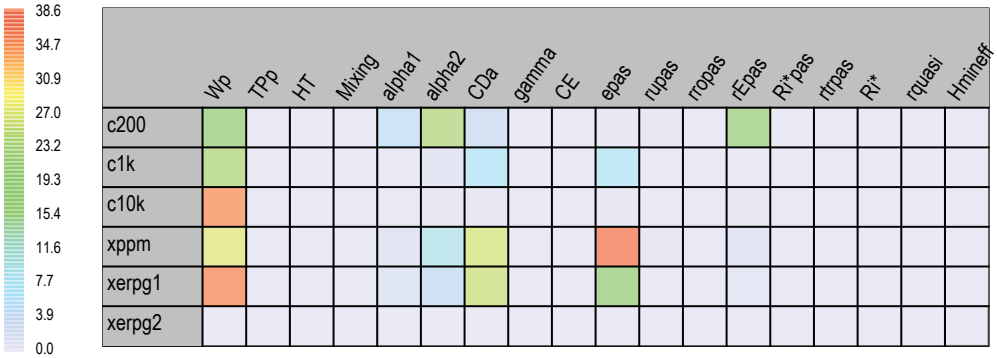
First order indices



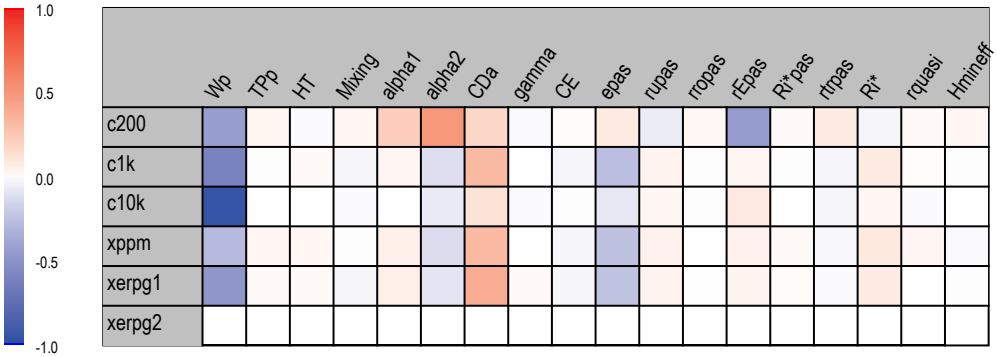
Total indices



Influence (CVSi)



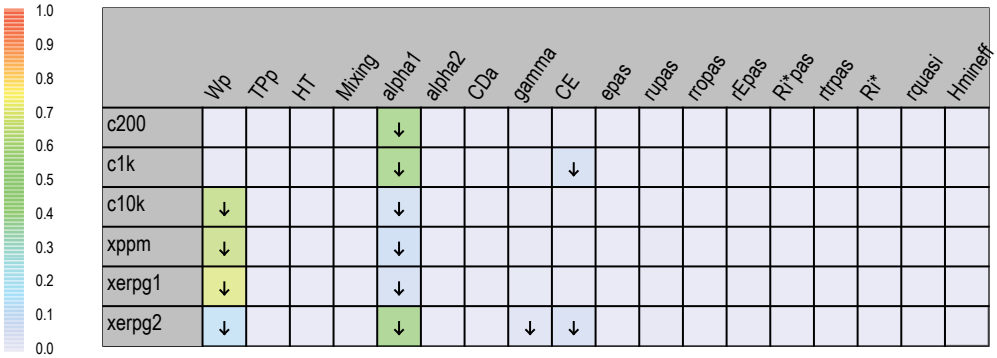
Correlation



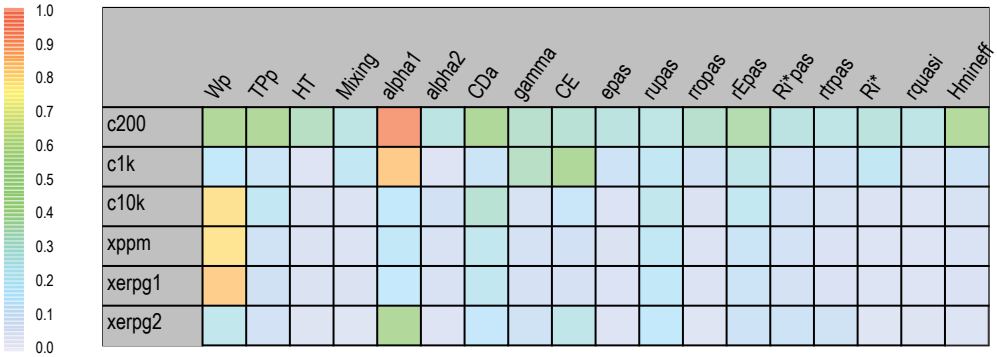
Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
c200	0.00	120.74	31.60	21.61	99.39	2	416	0
c1k	0.00	355.44	45.00	41.89	53.31	0	2	0
c10k	1.00	9.87	3.60	3.95	42.18	0	0	0
xppm	0.00	2221.10	113.10	0.00	246.56	0	16343	0
xerpg1	0.00	2823.79	262.19	0.00	153.07	0	12819	0
xerpg2	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0	0	0

Scenario NO-9 (Nitrogen oxide, high release rate, horizontal release near ground D5)

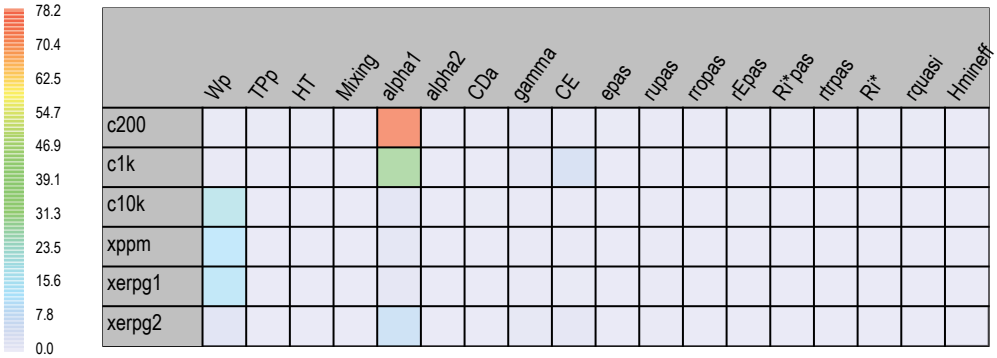
First order indices



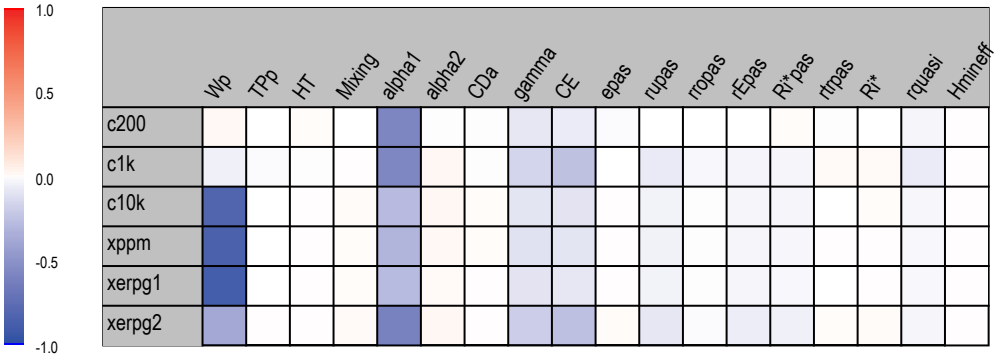
Total indices



Influence (CVSi)



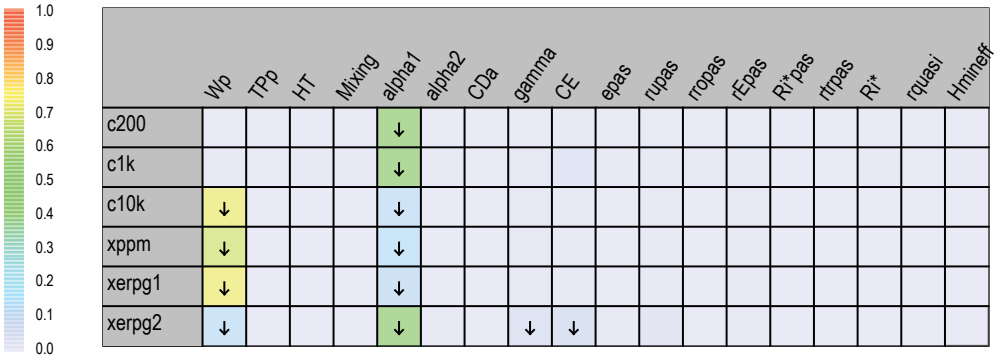
Correlation



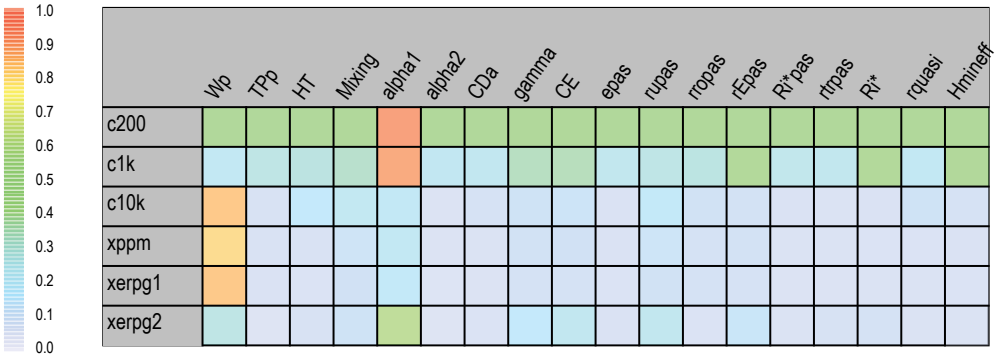
Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
c200	4302.02	327128.40	16321.31	8619.61	145.86	0	0	0
c1k	715.08	49840.14	2509.58	2007.81	71.27	0	0	0
c10k	26.33	520.58	81.30	84.83	28.87	0	0	0
xppm	4212.37	31963.33	8627.71	8898.29	18.61	0	0	0
xerpg1	4886.00	37339.32	10094.60	10429.96	19.16	0	0	0
xerpg2	1146.32	9056.95	2530.58	2455.84	20.08	0	0	0

Scenario NO-10 (Nitrogen oxide, high release rate, horizontal elevated release D5)

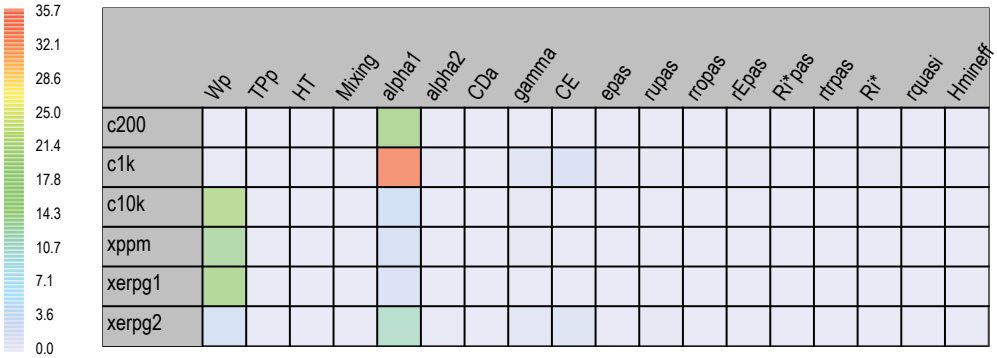
First order indices



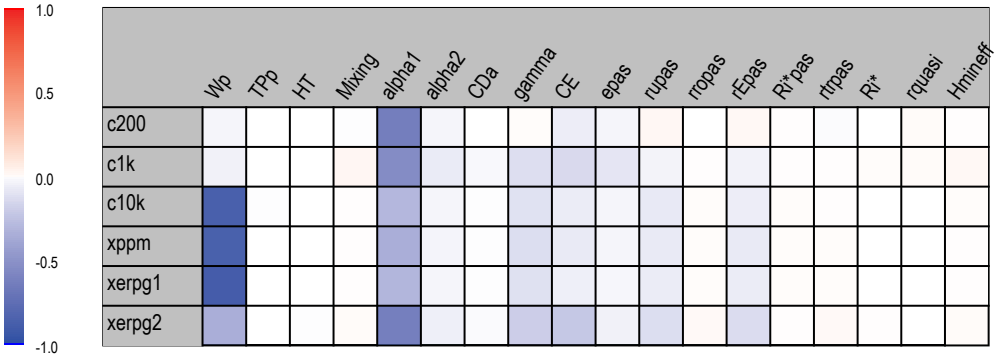
Total indices



Influence (CVSi)



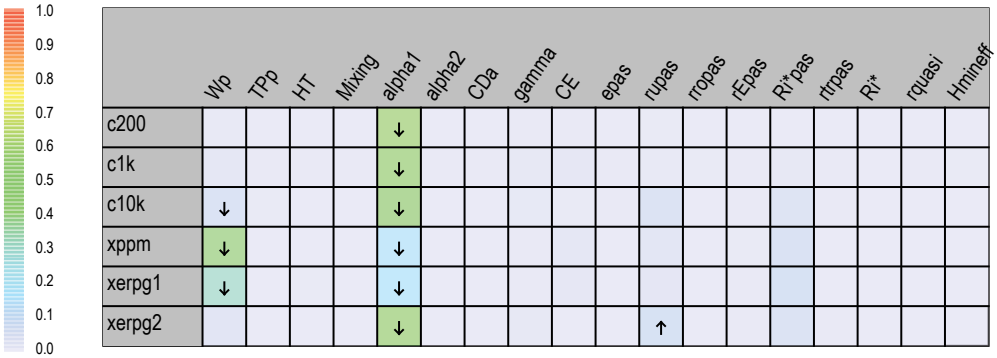
Correlation



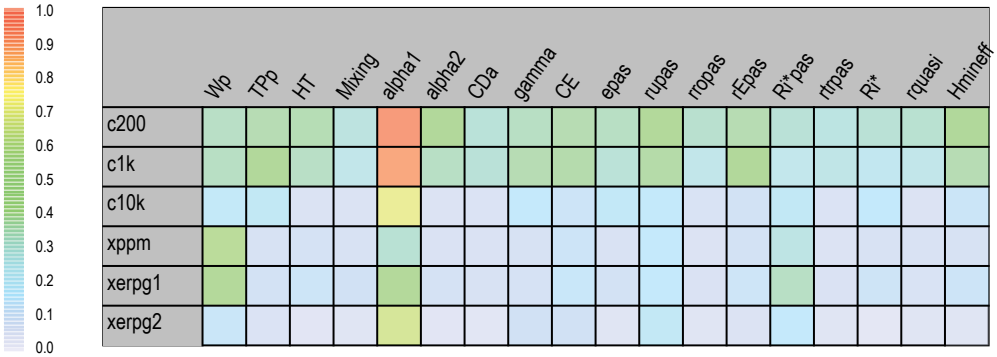
Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
c200	0.00	11500.13	5688.69	5199.05	37.64	0	69	0
c1k	688.85	50931.82	1888.73	1505.87	76.72	0	0	0
c10k	45.29	326.40	74.98	79.91	28.92	0	0	0
xppm	4870.28	18542.30	8101.09	8435.63	19.61	0	0	0
xerpg1	6310.13	21523.70	9519.22	9992.01	20.08	0	0	0
xerpg2	1127.45	7947.69	2250.60	2169.30	23.02	0	0	0

Scenario NO-11 (Nitrogen oxide, high release rate, horizontal release near ground F3)

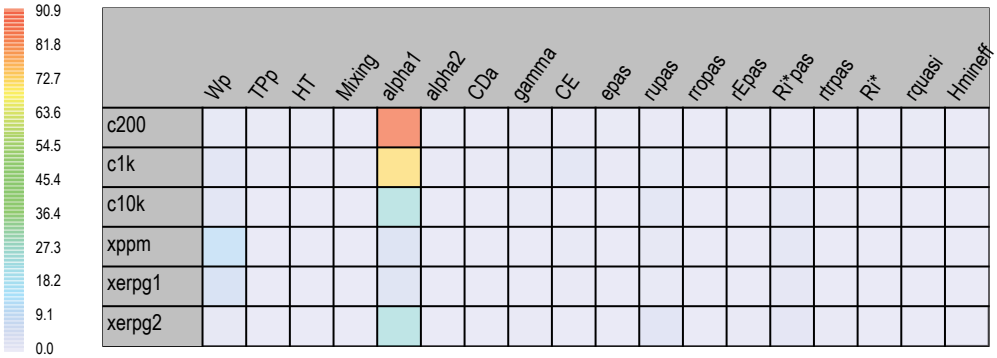
First order indices



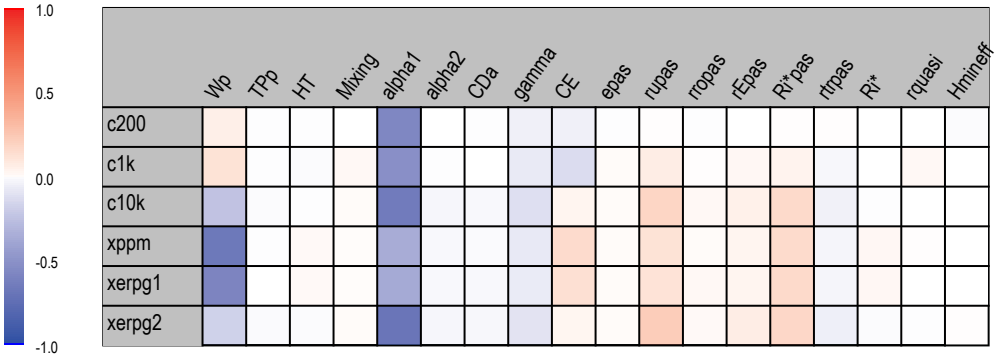
Total indices



Influence (CVSi)



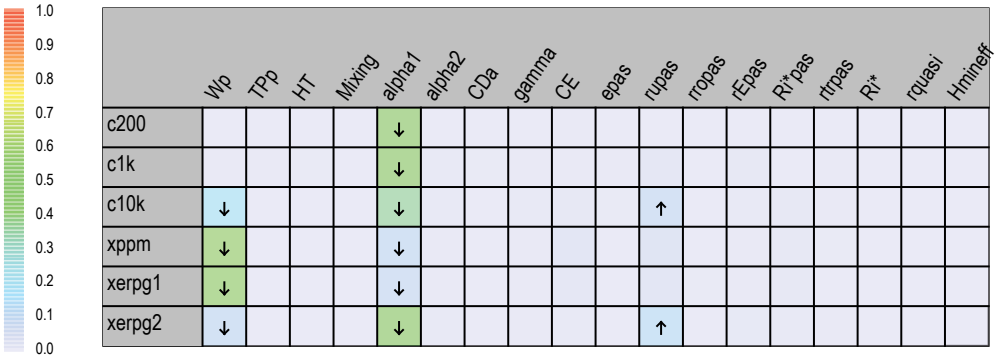
Correlation



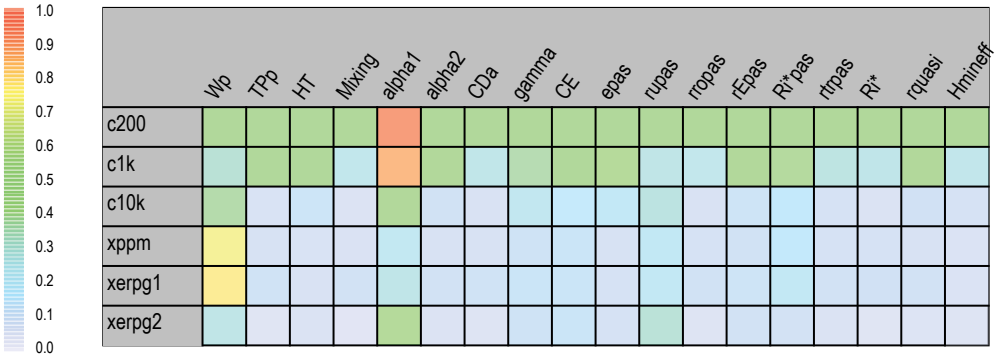
Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
c200	3897.32	314029.90	16359.23	8023.61	158.63	0	0	0
c1k	835.04	178871.10	4149.13	2696.59	130.27	0	0	0
c10k	34.00	3968.38	464.43	425.84	44.19	0	0	0
xppm	4916.61	50088.59	38609.73	40021.81	28.11	0	0	6341
xerpg1	5713.19	50075.23	42655.81	49023.54	21.52	0	0	9661
xerpg2	1318.33	24304.75	7520.26	7046.82	41.75	0	0	0

Scenario NO-12 (Nitrogen oxide, high release rate, horizontal elevated release F3)

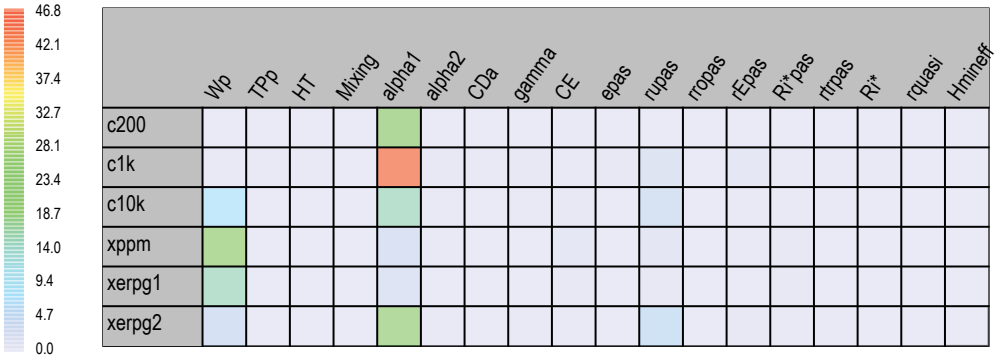
First order indices



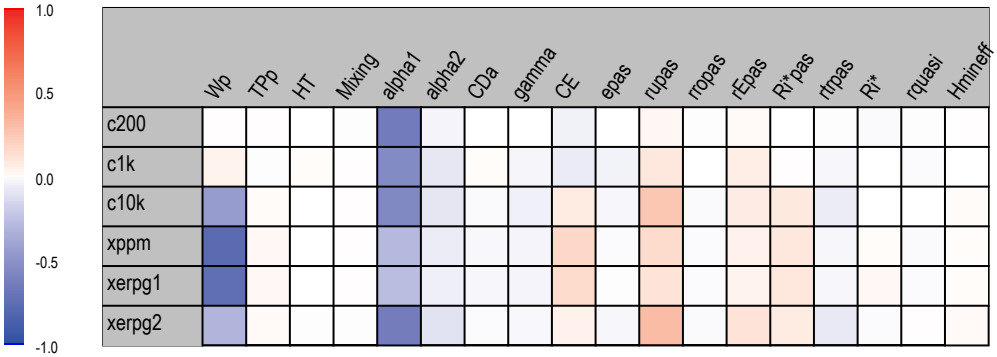
Total indices



Influence (CVSi)



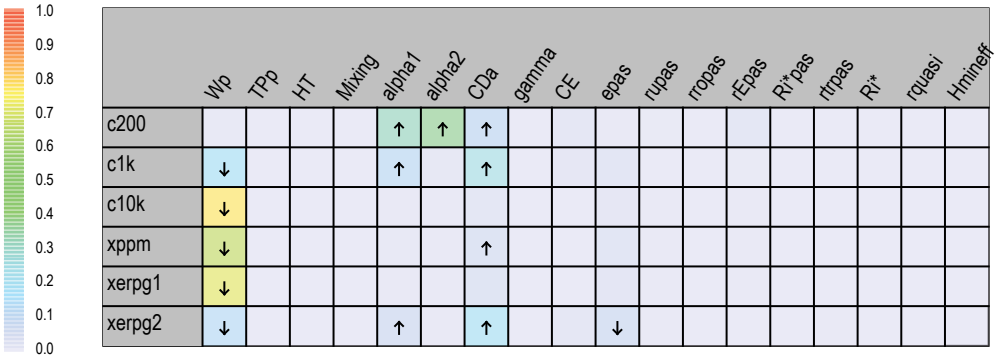
Correlation



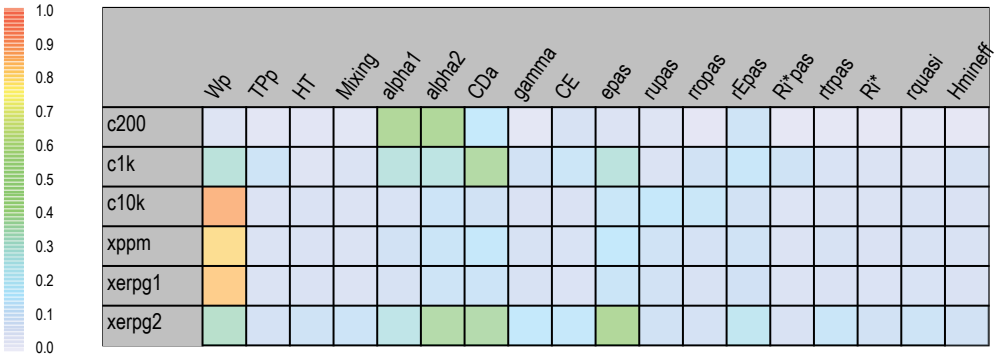
Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
c200	0.00	13045.72	5838.23	5165.32	44.05	0	188	0
c1k	604.03	55433.88	2641.32	2069.28	91.28	0	0	0
c10k	32.32	2780.78	381.00	350.13	42.22	0	0	0
xppm	4573.29	50090.10	35286.62	33688.32	33.74	0	0	4603
xerpg1	5374.03	50045.73	39607.57	41377.83	26.86	0	0	8245
xerpg2	1006.22	22746.11	6108.33	5610.84	43.72	0	0	0

Scenario NO-13 (Nitrogen oxide, high release rate, vertical release near ground D5)

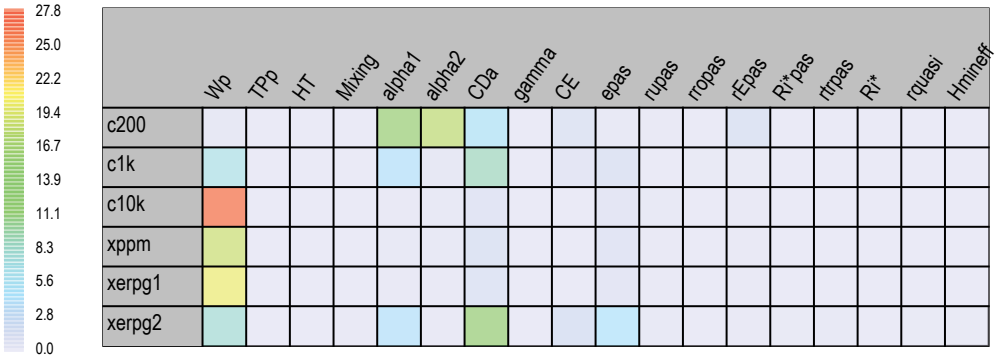
First order indices



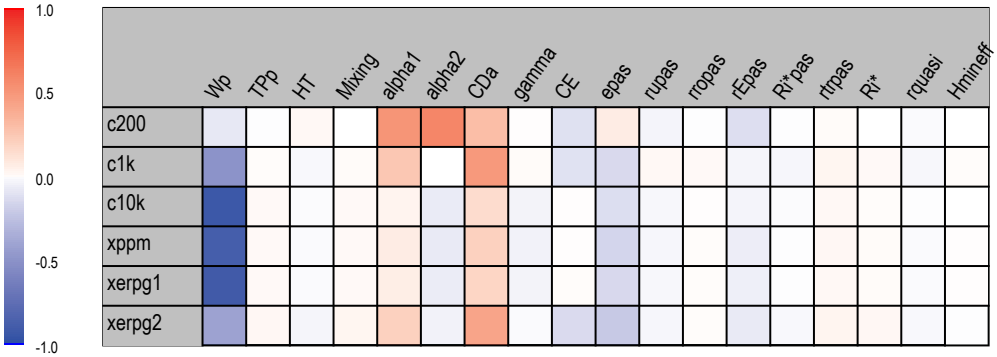
Total indices



Influence (CVSi)



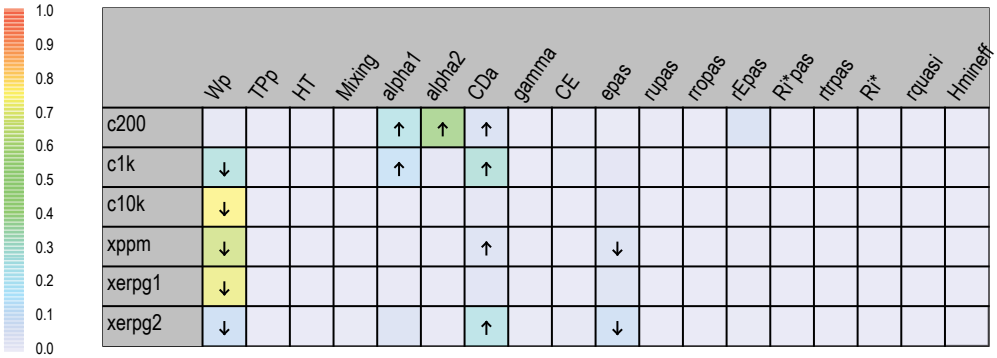
Correlation



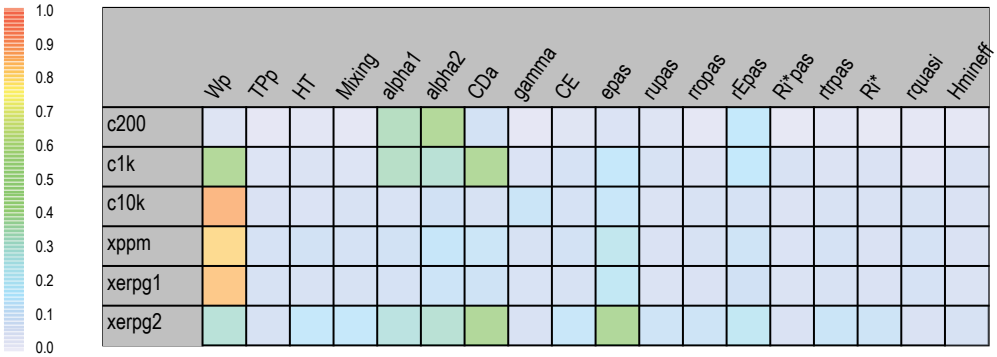
Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
c200	0.00	2050.93	1012.75	1114.61	49.89	0	281	0
c1k	0.00	1686.16	589.52	573.40	37.12	0	35	0
c10k	0.00	240.89	52.00	57.72	35.87	0	2	0
xppm	0.00	16354.44	5842.28	6268.42	28.15	0	78	0
xerpg1	0.00	17747.84	7020.89	7572.53	28.18	0	44	0
xerpg2	0.00	5961.49	946.28	946.53	62.73	0	1838	0

Scenario NO-14 (Nitrogen oxide, high release rate, vertical elevated release D5)

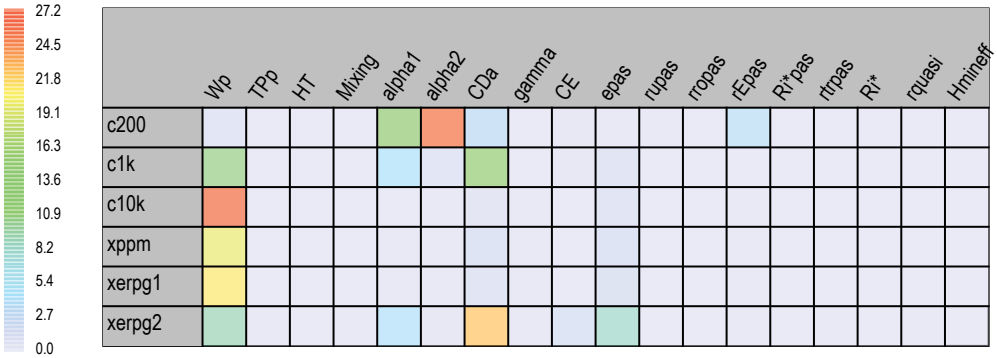
First order indices



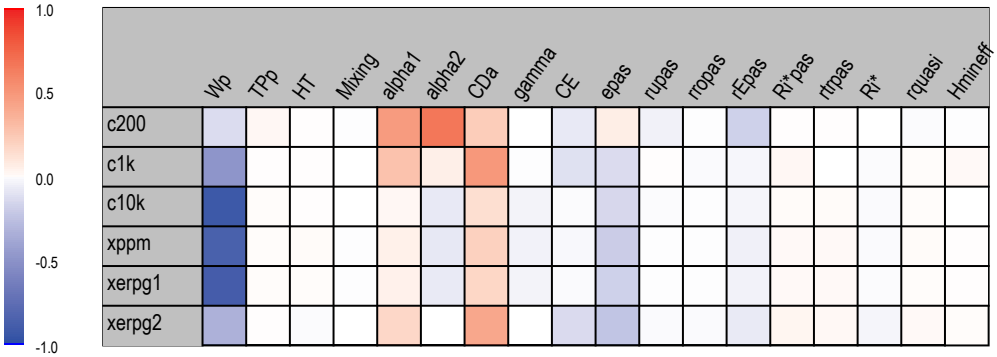
Total indices



Influence (CVSi)



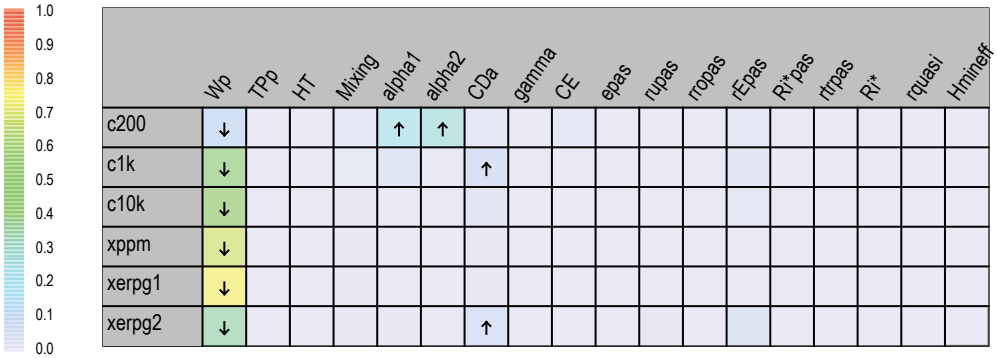
Correlation



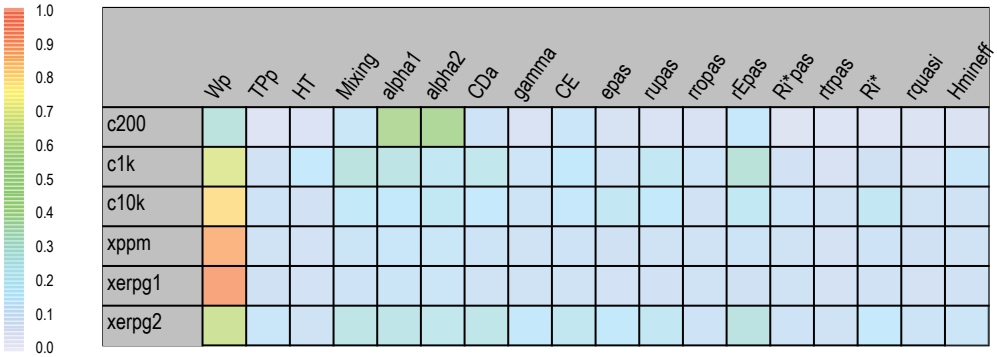
Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
c200	0.00	1509.94	684.46	772.97	58.88	0	365	0
c1k	0.00	1563.56	496.48	481.87	39.61	1	47	0
c10k	0.00	229.18	49.62	55.33	35.98	0	2	0
xppm	0.00	13902.02	5569.40	6087.84	29.31	0	121	0
xerpg1	0.00	15054.81	6715.04	7384.29	29.09	0	72	0
xerpg2	0.00	6197.90	689.99	597.45	89.14	0	4273	0

Scenario NO-15 (Nitrogen oxide, high release rate, vertical release near ground F3)

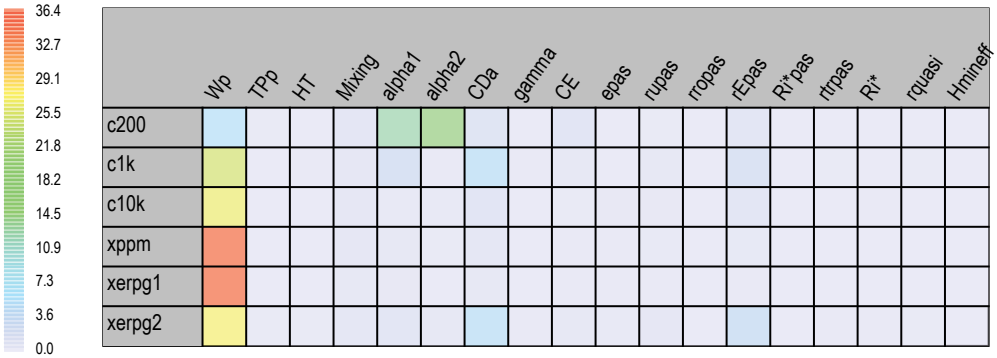
First order indices



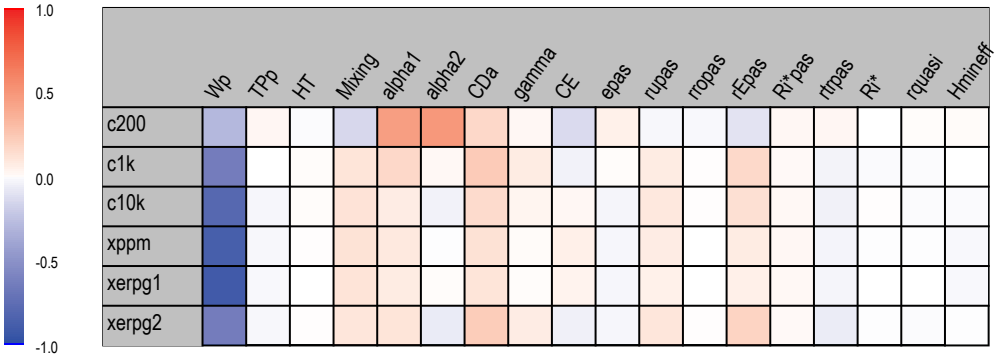
Total indices



Influence (CVSi)



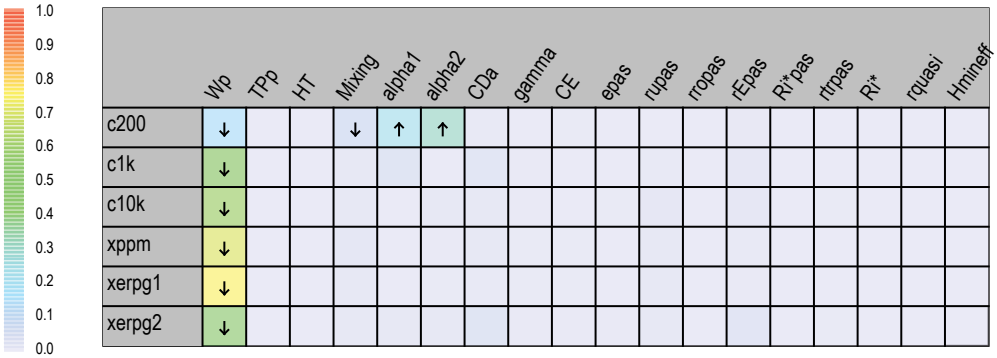
Correlation



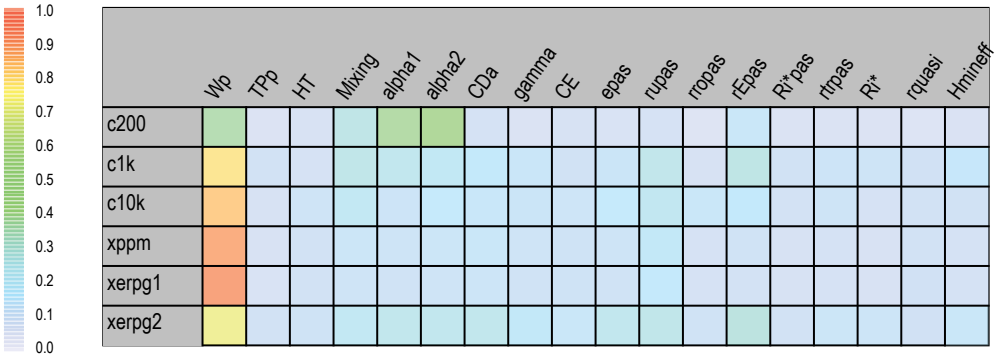
Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
c200	0.00	2147.57	888.76	1004.12	53.80	0	329	0
c1k	0.00	3676.32	867.46	800.80	64.67	0	62	0
c10k	0.02	1417.67	225.60	199.93	47.91	0	0	0
xppm	0.00	50083.76	24415.74	19863.95	51.89	0	222	174
xerpg1	0.00	50066.32	30116.36	24456.96	49.31	0	85	3254
xerpg2	0.00	13139.34	2659.13	2423.08	79.54	0	1640	0

Scenario NO-16 (Nitrogen oxide, high release rate, vertical elevated release F3)

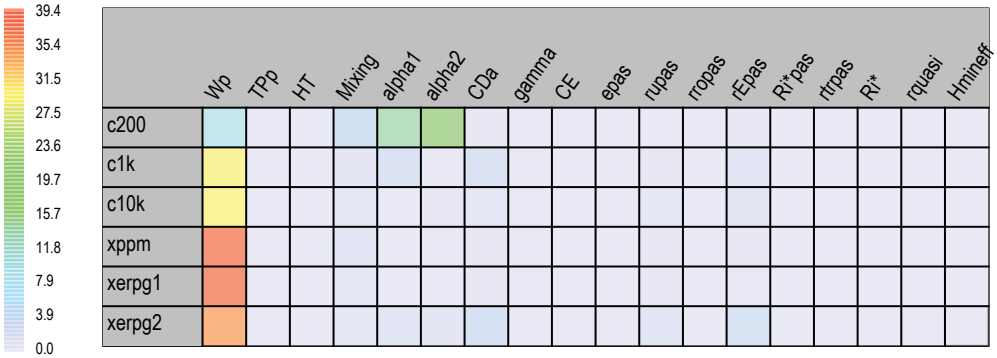
First order indices



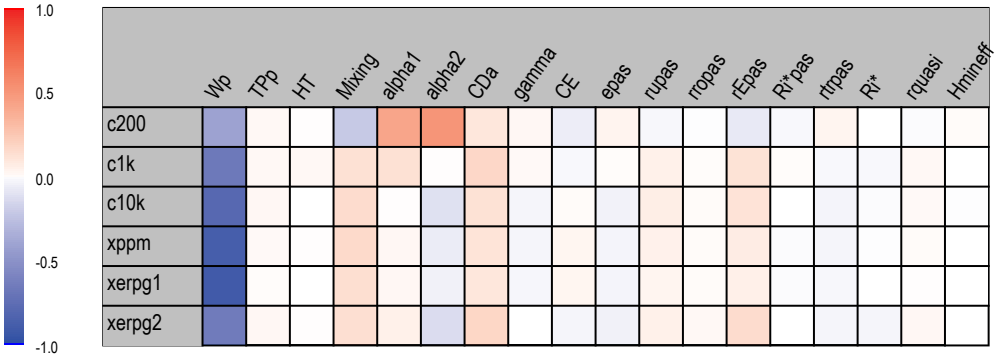
Total indices



Influence (CVSi)



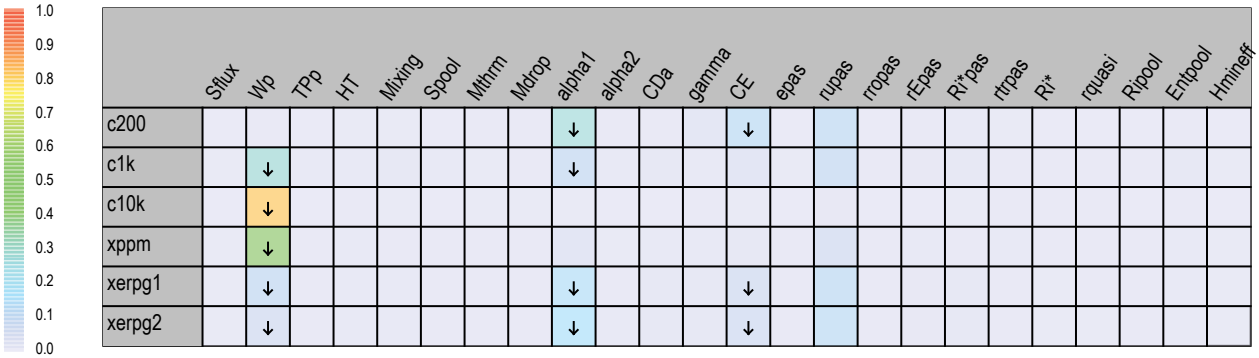
Correlation



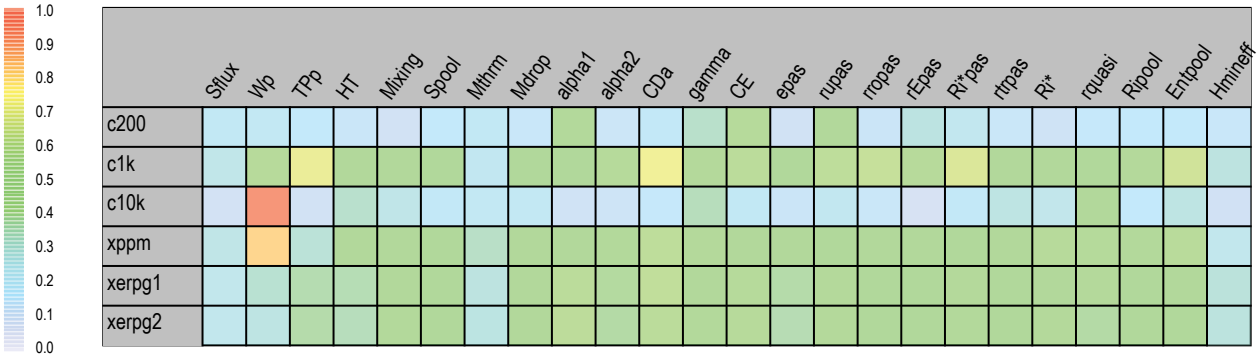
Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
c200	0.00	2108.85	697.79	765.54	64.36	0	491	0
c1k	0.00	3690.38	757.48	686.11	68.86	2	102	0
c10k	1.52	1570.51	209.95	193.61	50.26	0	0	0
xppm	0.00	50007.18	22663.06	19465.70	54.34	0	368	131
xerpg1	0.00	50084.95	28317.41	23971.11	52.23	0	176	1702
xerpg2	0.00	16436.32	2288.30	2142.22	88.36	0	3076	0

Scenario Cl2-1 (Chlorine, low release rate, horizontal release near ground D5)

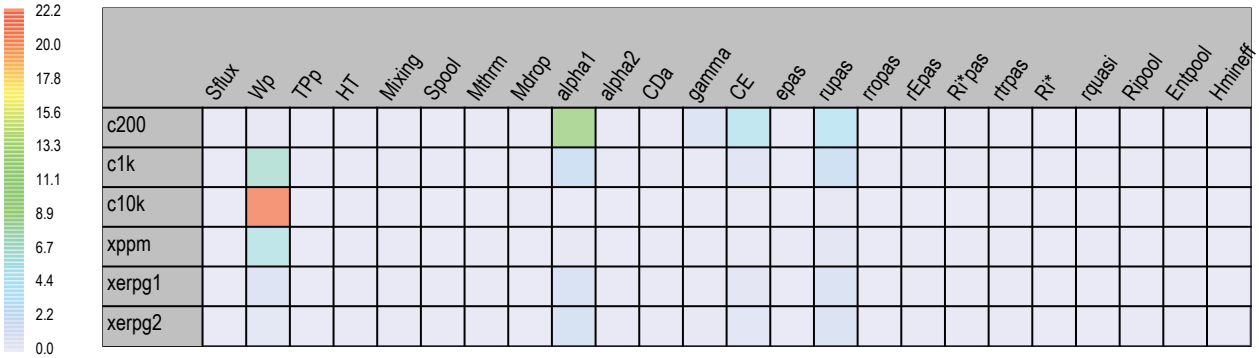
First order indices



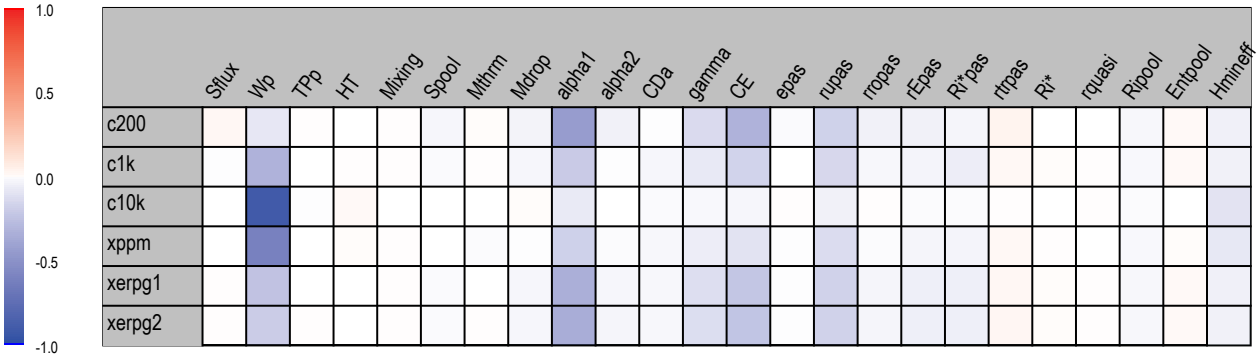
Total indices



Influence (CVSi)



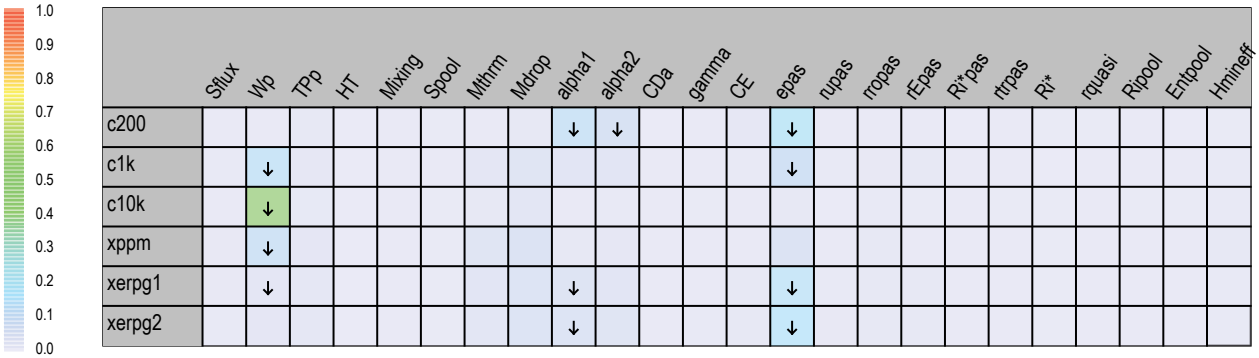
Correlation



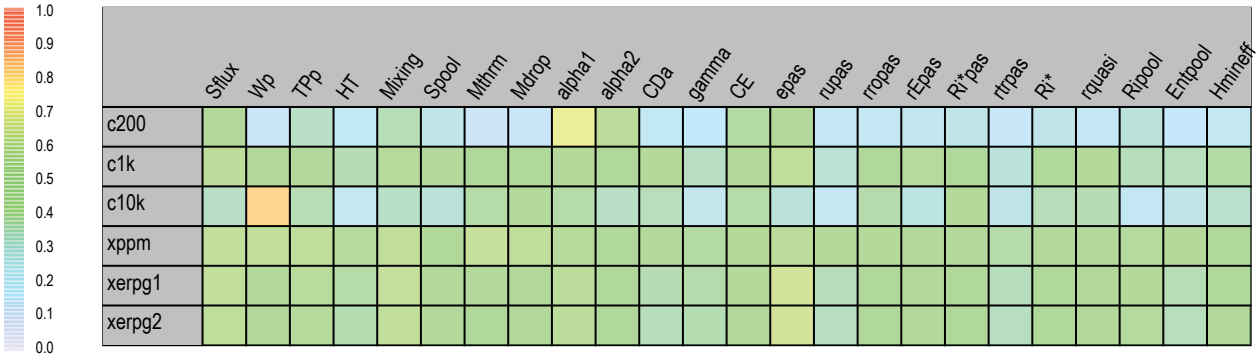
Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
c200	40.10	5876.99	767.31	677.82	42.14	29	0	0
c1k	7.77	397.65	46.85	46.28	23.95	29	0	0
c10k	0.13	7.88	1.15	1.40	27.39	29	0	0
xppm	418.86	5399.66	1697.23	1744.59	10.84	29	0	0
xerpg1	74.25	1863.32	606.01	594.44	11.11	29	0	0
xerpg2	62.95	1711.99	557.86	545.71	11.32	29	0	0

Scenario Cl2-2 (Chlorine, low release rate, horizontal elevated release D5)

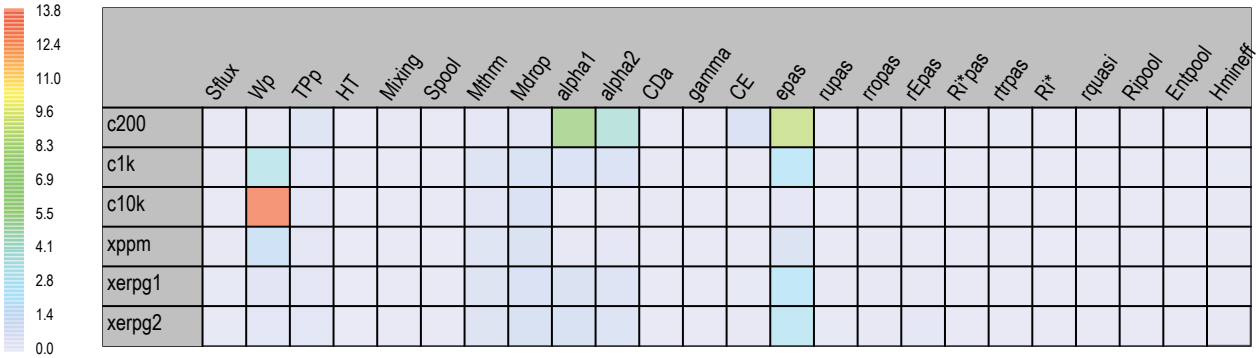
First order indices



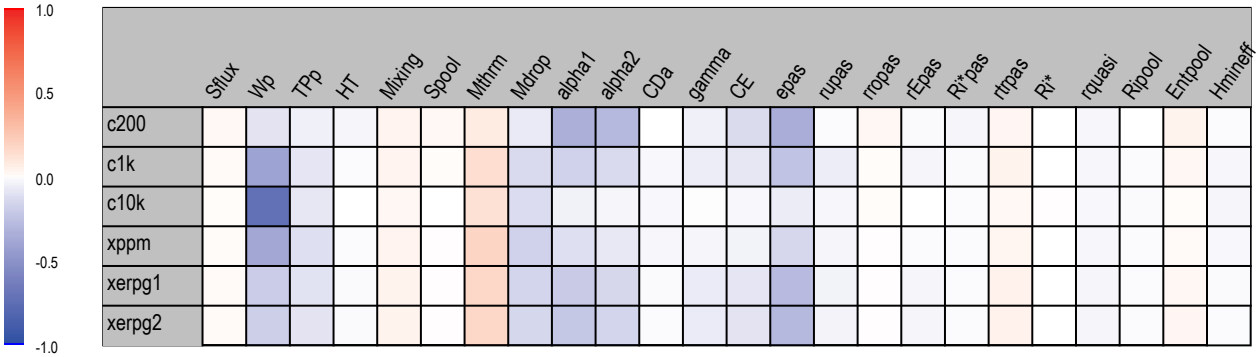
Total indices



Influence (CVSi)



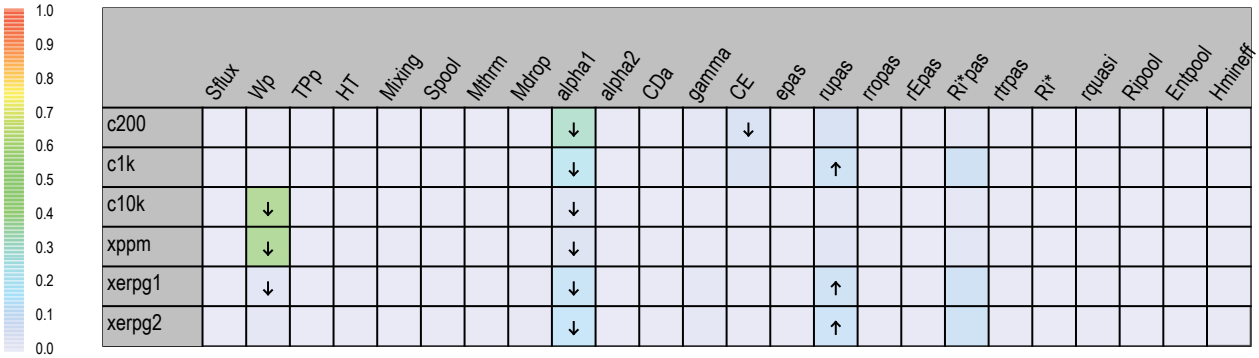
Correlation



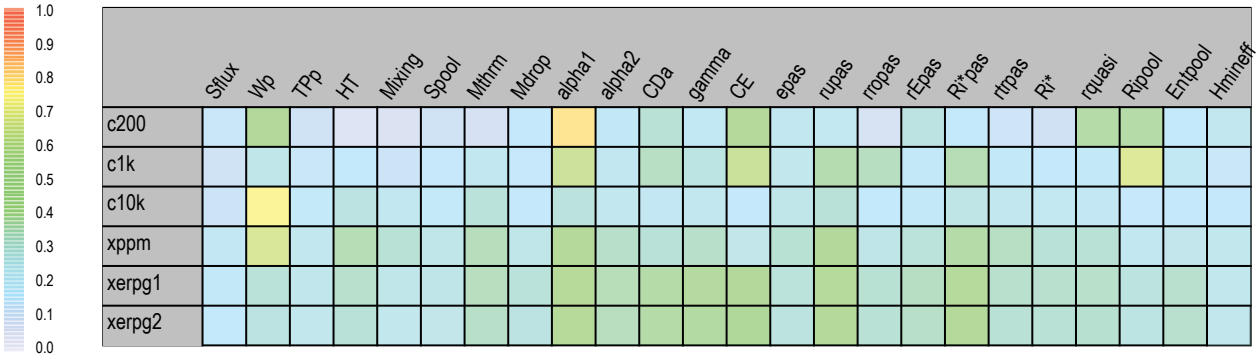
Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
c200	160.97	5152.30	349.09	307.33	51.03	1007	0	0
c1k	20.56	213.31	32.59	32.27	24.20	1007	0	0
c10k	0.65	5.61	1.02	0.90	30.56	1007	0	0
xppm	1054.20	4848.90	1410.88	1427.50	14.18	1007	0	0
xerpg1	284.49	1594.50	444.49	434.64	17.64	1007	0	0
xerpg2	250.68	1445.20	403.46	393.06	18.44	1007	0	0

Scenario Cl2-3 (Chlorine, low release rate, horizontal release near ground F3)

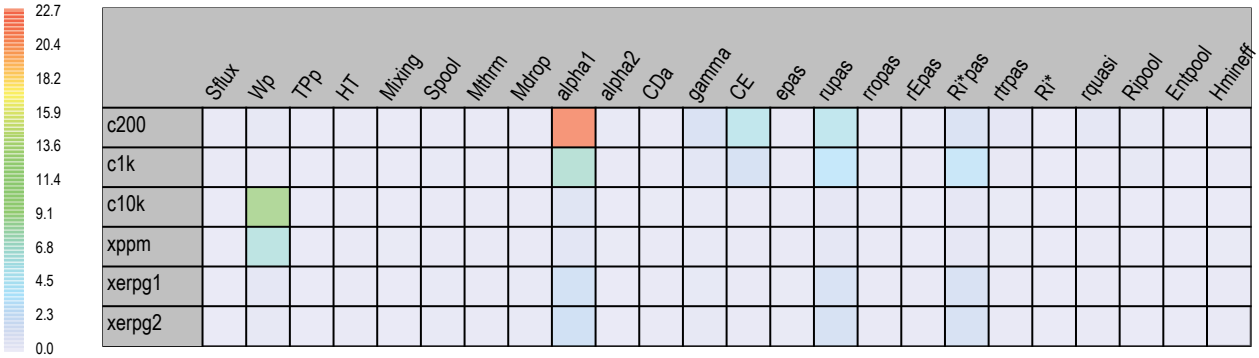
First order indices



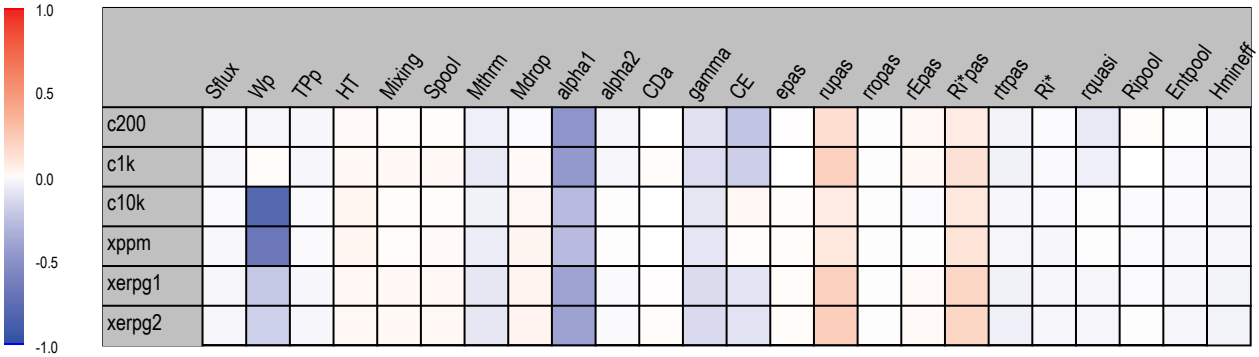
Total indices



Influence (CVSi)



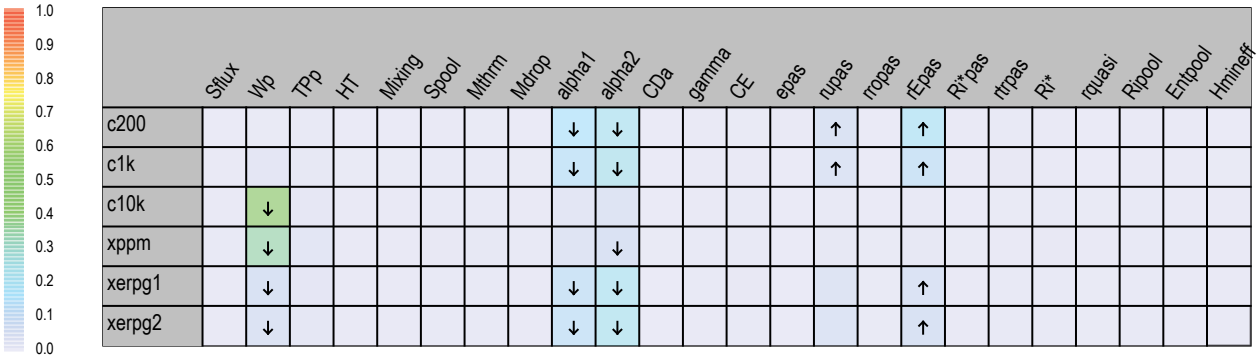
Correlation



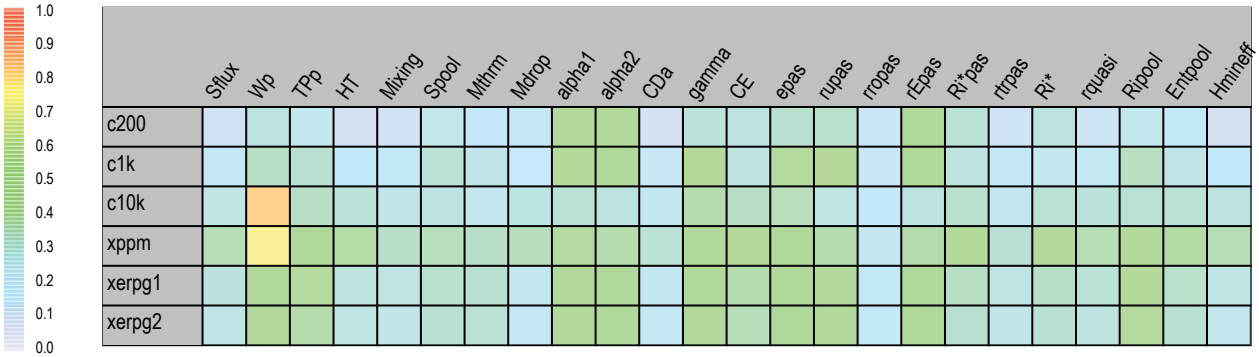
Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
c200	126.65	60250.00	2293.58	1979.80	73.72	142	0	0
c1k	14.85	6624.50	348.58	342.37	32.41	142	0	0
c10k	1.25	37.67	14.08	13.81	20.86	142	0	0
xppm	809.69	16935.00	8048.50	8067.05	15.06	142	0	0
xerpg1	221.23	5225.50	2283.81	2316.00	15.25	142	0	0
xerpg2	199.55	4707.50	2058.79	2086.95	15.72	142	0	0

Scenario Cl2-4 (Chlorine, low release rate, horizontal elevated release F3)

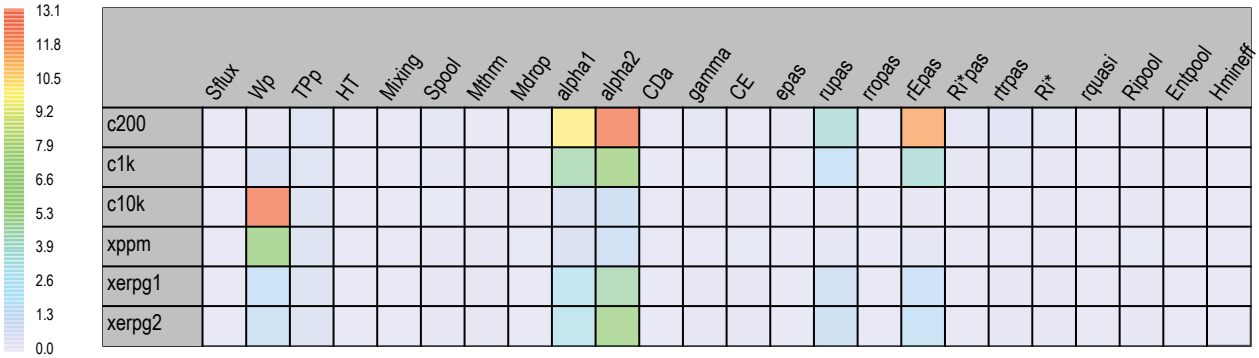
First order indices



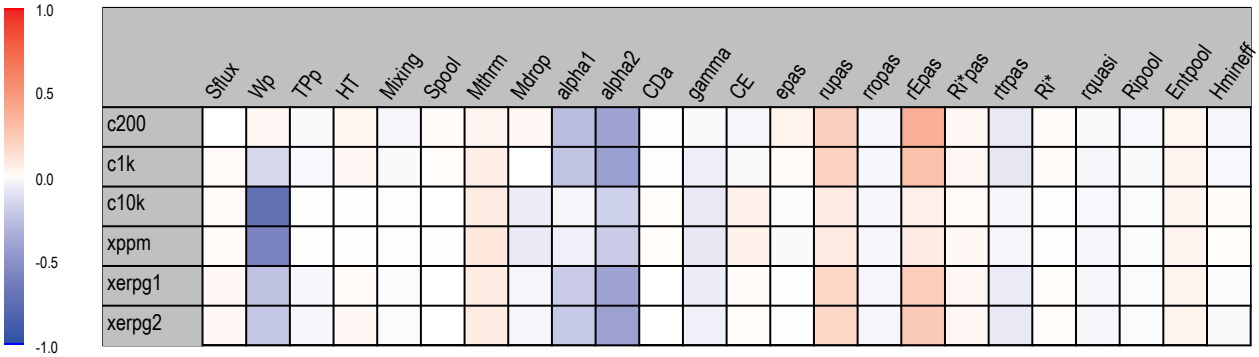
Total indices



Influence (CVSi)



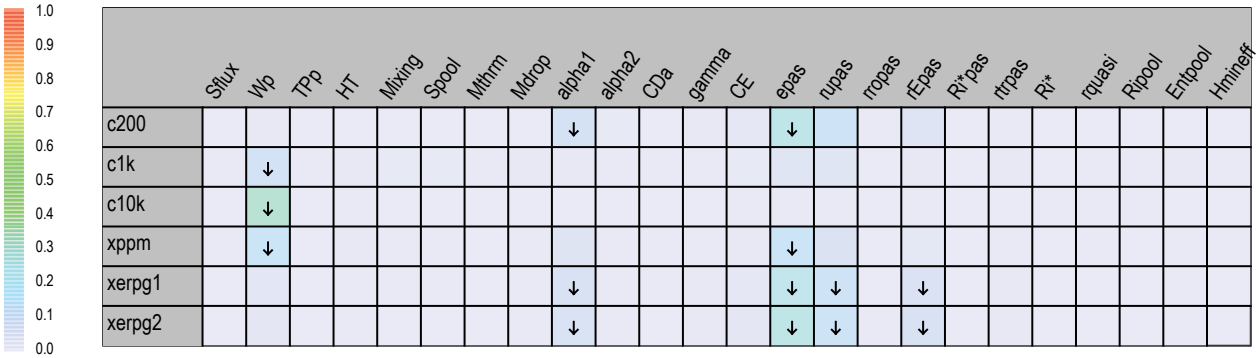
Correlation



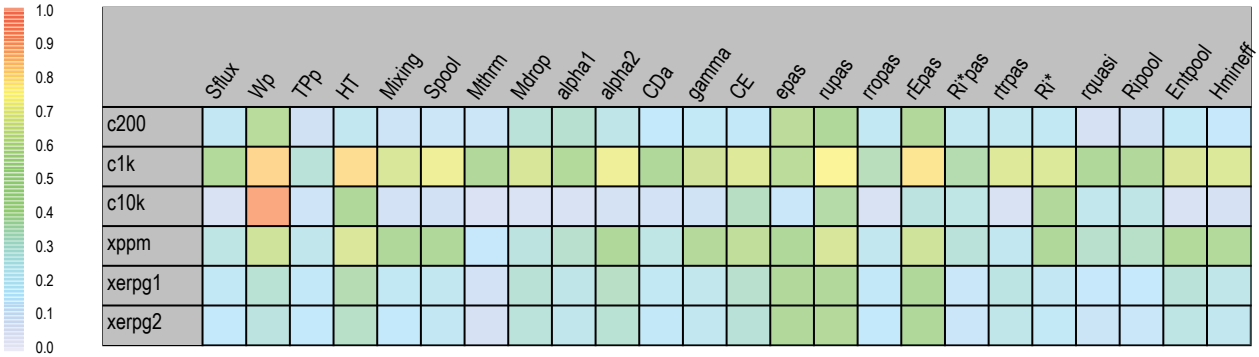
Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
c200	233.28	12649.00	799.72	648.97	63.77	568	0	0
c1k	42.80	981.36	184.42	172.44	32.91	568	0	0
c10k	1.55	19.37	10.92	10.86	26.51	568	0	0
xppm	1916.50	10143.00	6471.02	6475.30	19.33	568	0	0
xerpg1	471.09	3070.90	1537.25	1518.80	23.31	568	0	0
xerpg2	415.96	2838.90	1353.58	1331.65	24.67	568	0	0

Scenario Cl2-18 (Chlorine, low release rate, horizontal elevated release A3)

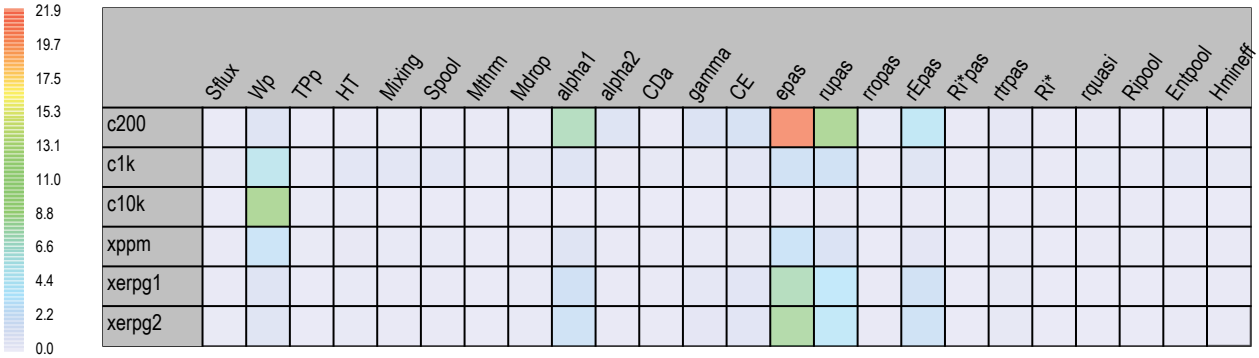
First order indices



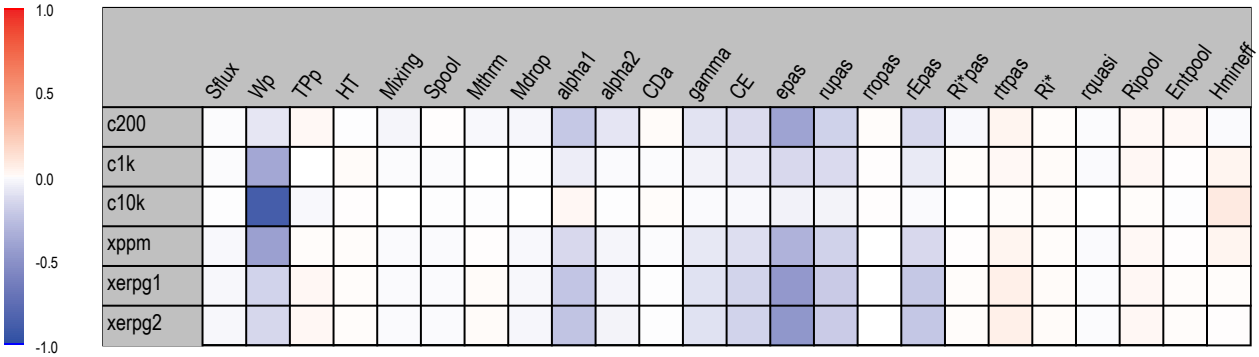
Total indices



Influence (CVSi)



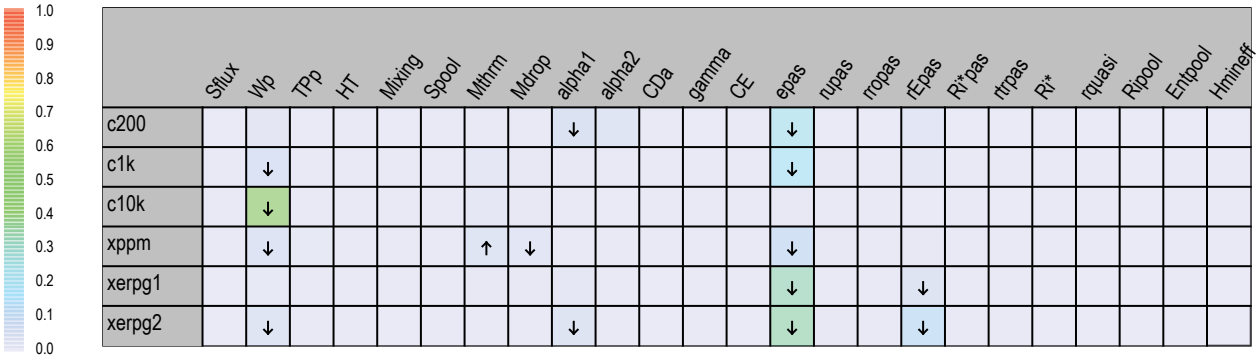
Correlation



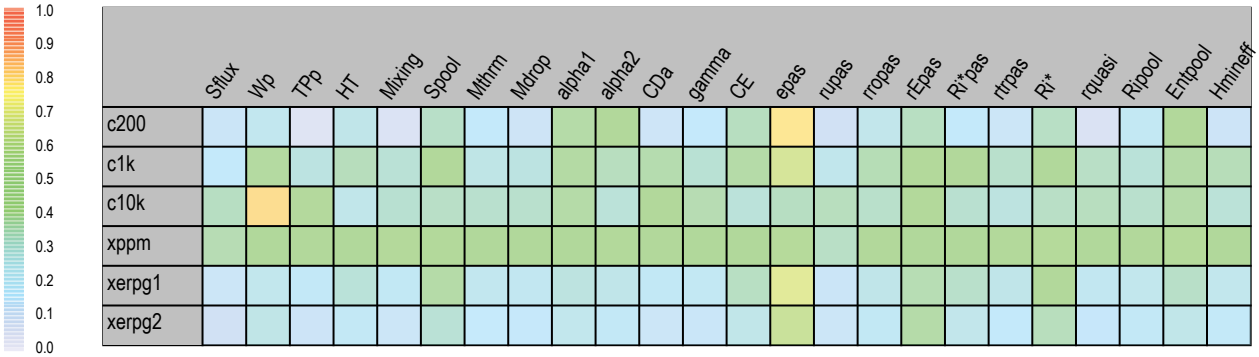
Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
c200	58.00	5672.52	131.63	94.99	87.29	3	0	0
c1k	3.74	125.41	5.88	6.10	55.63	3	0	0
c10k	0.09	1.57	0.13	0.16	32.37	3	0	0
xppm	394.35	3488.92	519.79	514.51	20.75	3	0	0
xerpg1	129.86	1101.16	202.74	182.68	31.13	3	0	0
xerpg2	114.84	990.54	187.71	167.71	32.40	3	0	0

Scenario Cl2-17 (Chlorine, low release rate, horizontal elevated release D9)

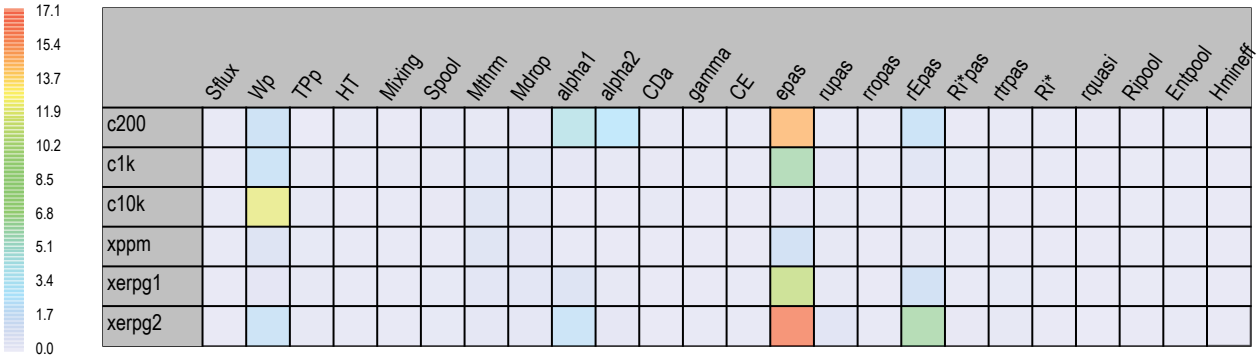
First order indices



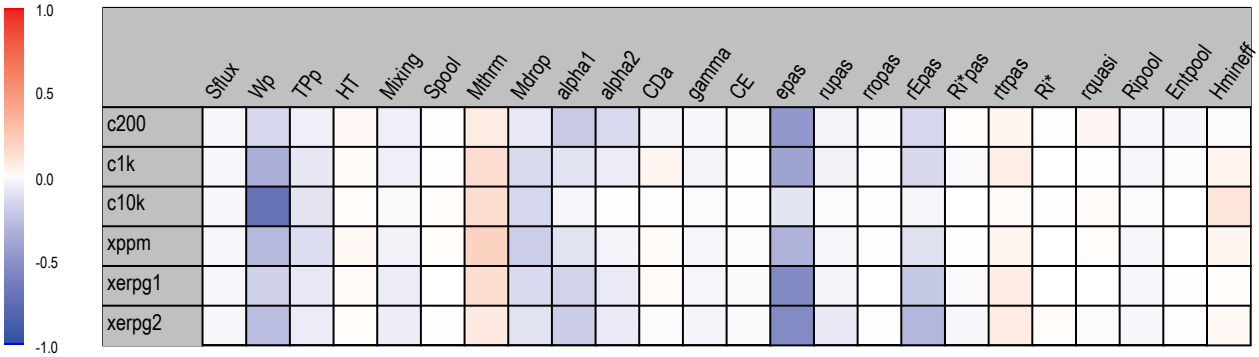
Total indices



Influence (CVSi)



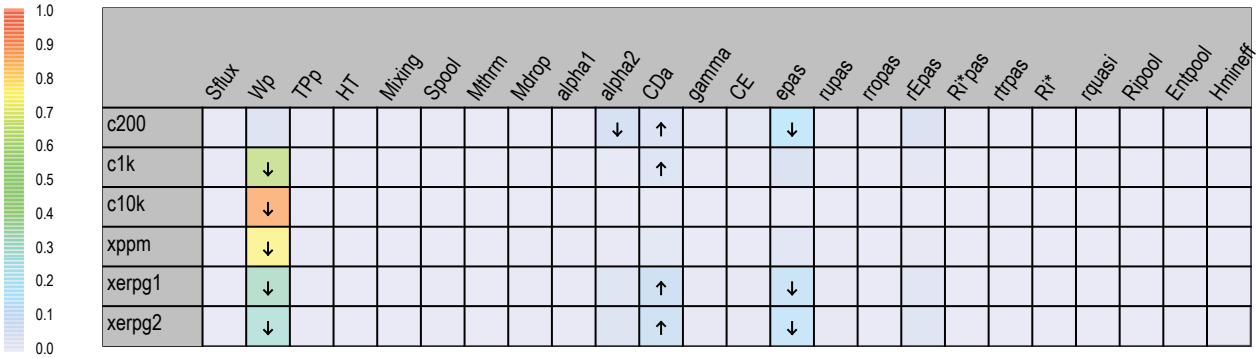
Correlation



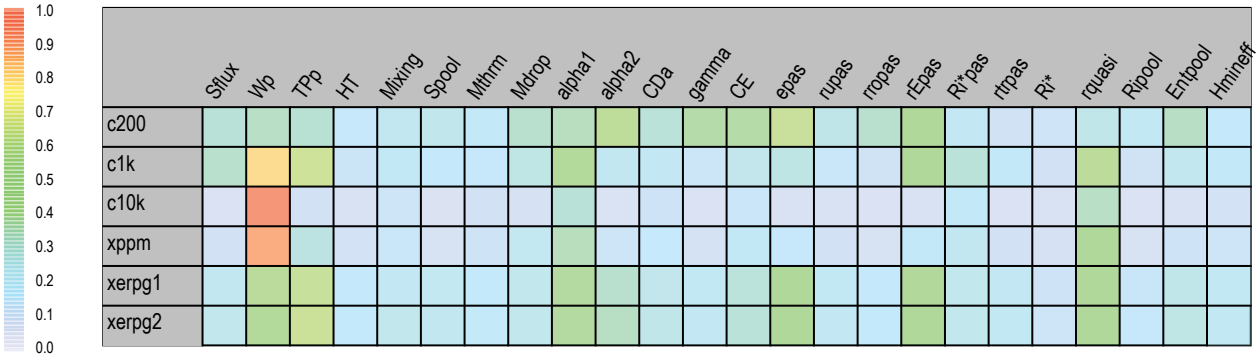
Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
c200	86.94	2866.40	175.30	138.42	70.26	1119	0	0
c1k	10.45	125.51	16.10	15.87	32.89	1119	0	0
c10k	0.32	3.28	0.48	0.45	30.58	1119	0	0
xppm	668.88	3002.98	883.36	884.88	16.81	1119	0	0
xerpg1	150.55	1068.34	278.53	248.10	35.22	1119	0	0
xerpg2	0.00	992.94	231.81	217.32	52.03	1119	1854	0

Scenario Cl2-5 (Chlorine, low release rate, vertical release near ground D5)

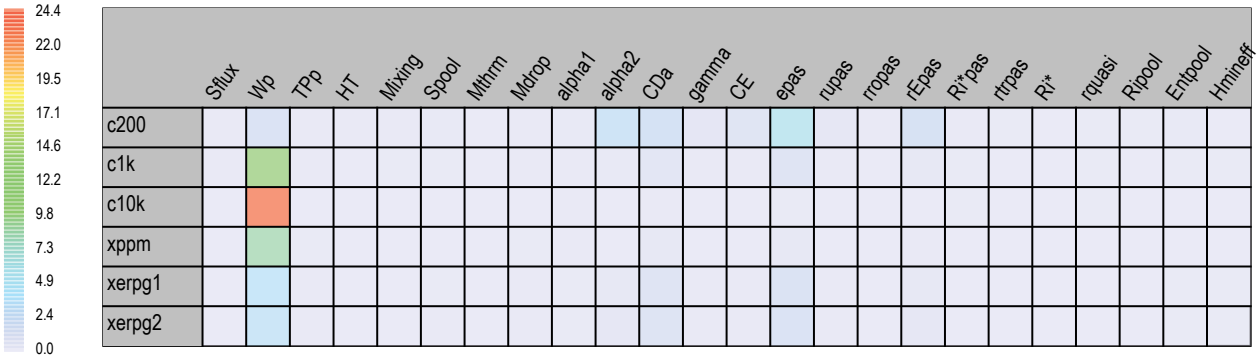
First order indices



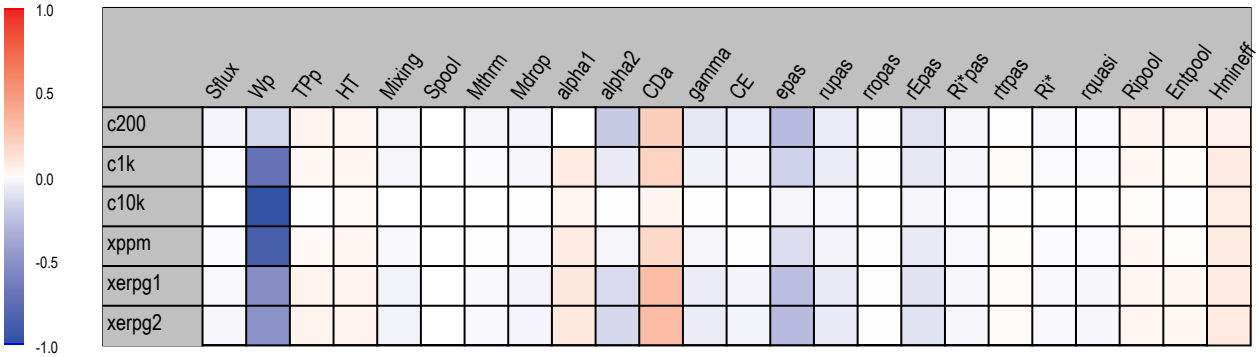
Total indices



Influence (CVSi)



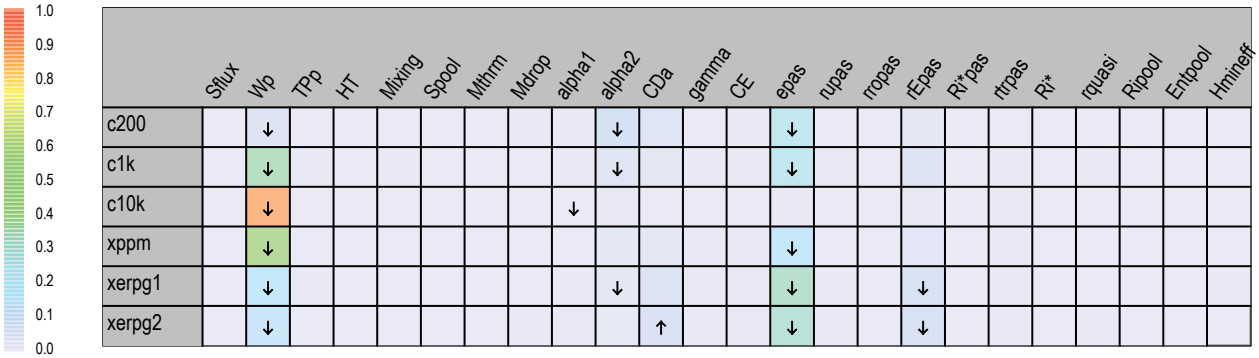
Correlation



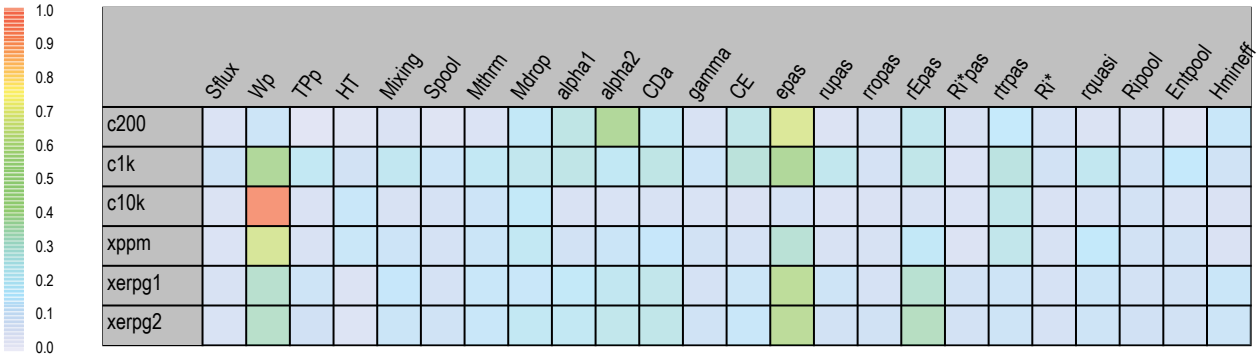
Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
c200	0.42	4819.44	390.80	366.20	33.69	2	0	0
c1k	16.92	239.39	35.89	37.20	17.61	2	0	0
c10k	0.57	5.83	1.07	1.30	27.87	2	0	0
xppm	917.24	4776.06	1502.70	1559.23	11.00	2	0	0
xerpg1	0.00	1775.15	478.35	476.42	10.96	2	7	0
xerpg2	0.00	1655.30	434.01	430.61	11.31	2	9	0

Scenario Cl2-6 (Chlorine, low release rate, vertical elevated release D5)

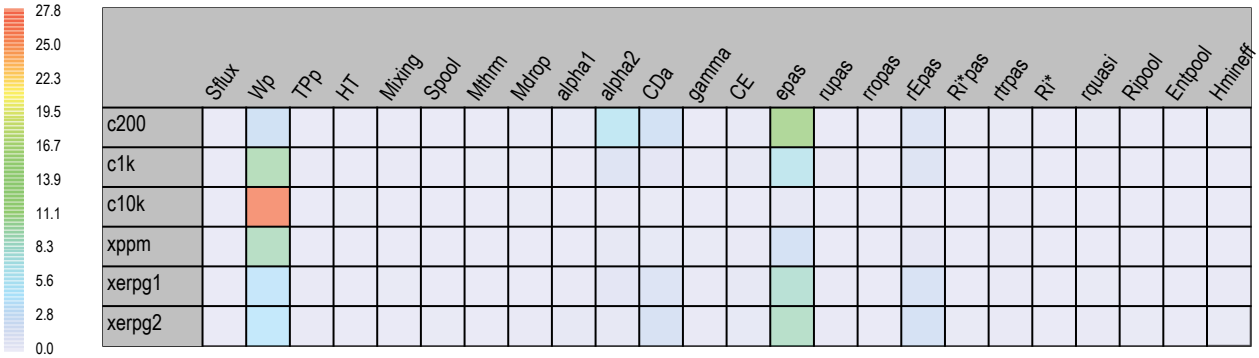
First order indices



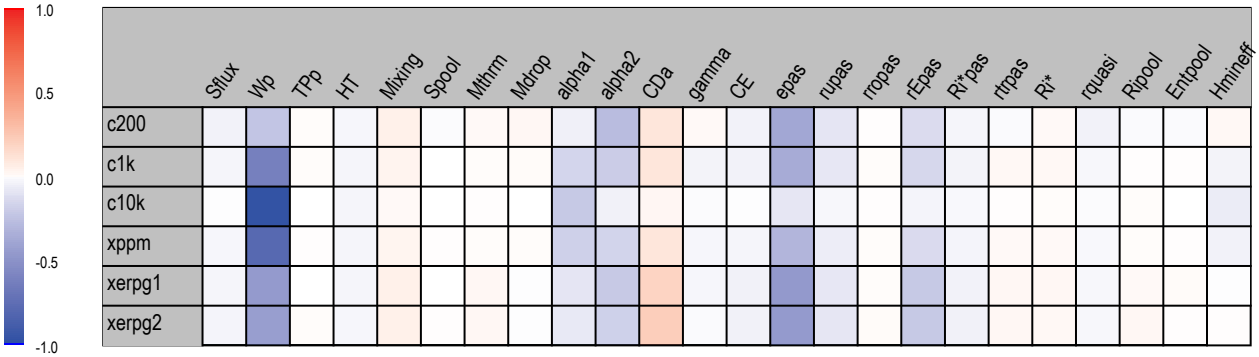
Total indices



Influence (CVSi)



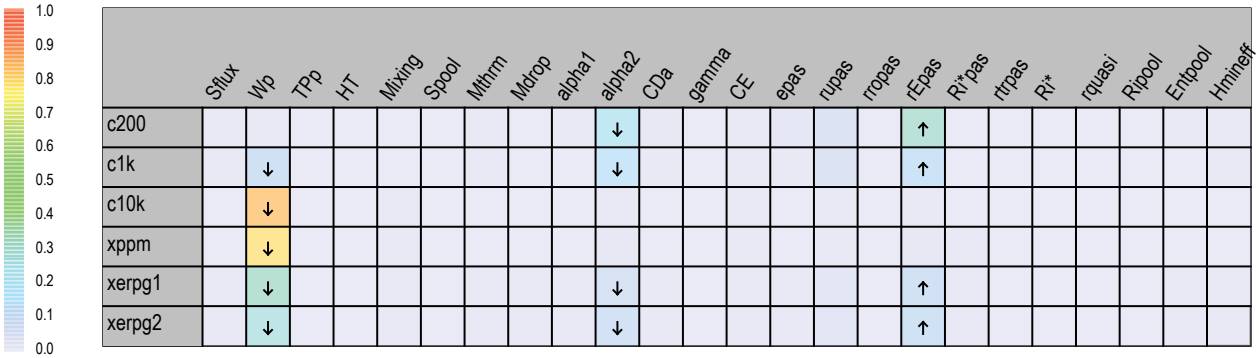
Correlation



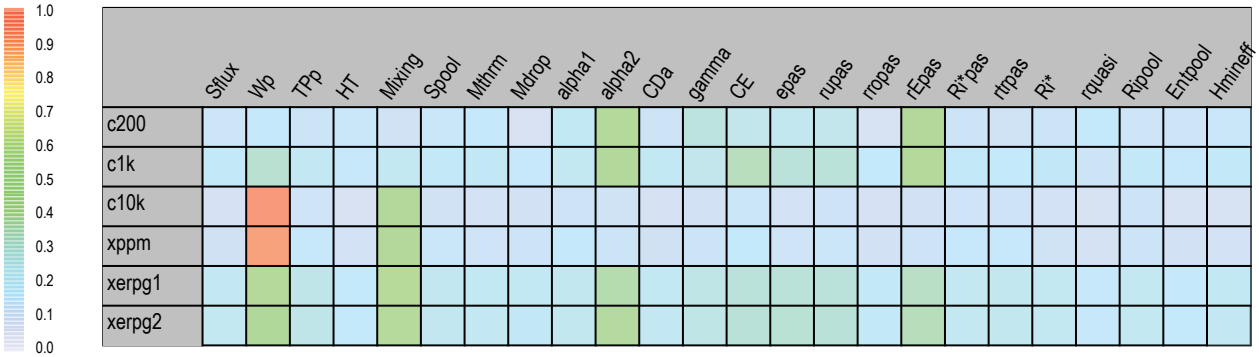
Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
c200	0.00	4009.65	231.86	207.34	63.34	1	0	0
c1k	15.43	182.61	28.32	29.56	28.45	1	0	0
c10k	0.56	5.00	0.96	1.16	31.78	1	0	0
xppm	849.88	4134.96	1293.66	1365.01	16.44	1	0	0
xerpg1	0.00	1309.65	376.89	378.19	26.47	1	181	0
xerpg2	0.00	1204.57	331.82	334.24	31.18	1	470	0

Scenario Cl2-7 (Chlorine, low release rate, vertical release near ground F3)

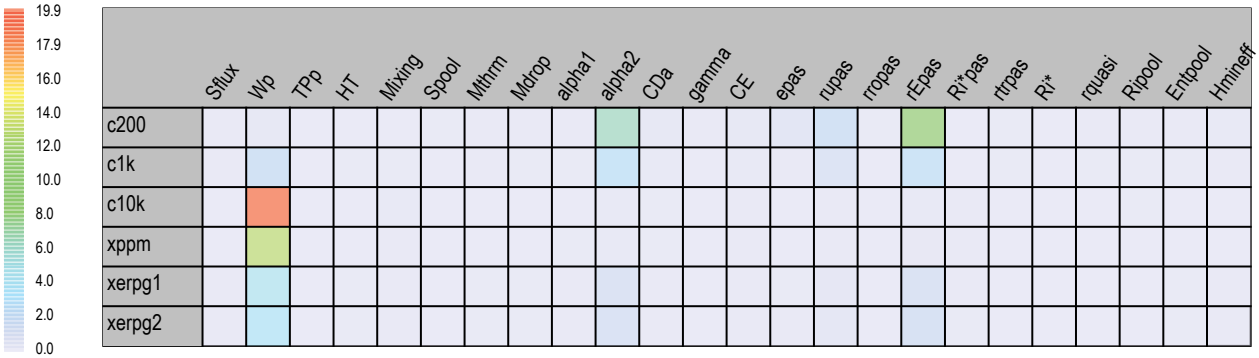
First order indices



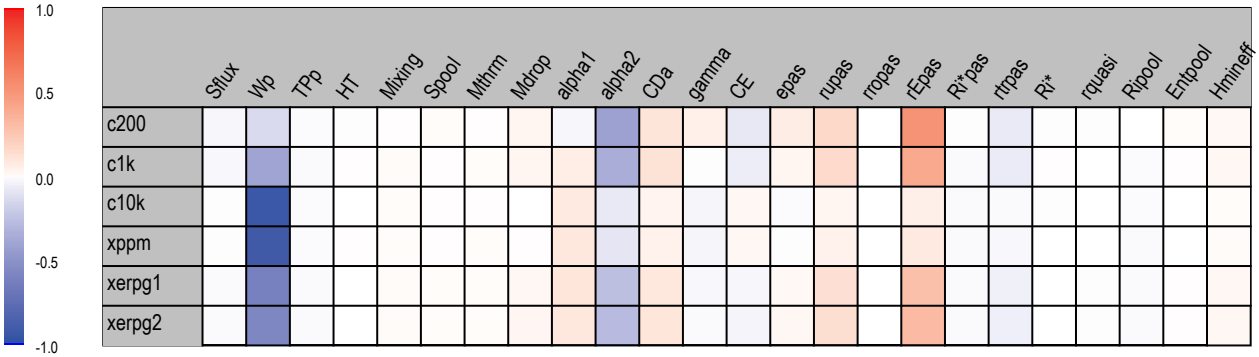
Total indices



Influence (CVSi)



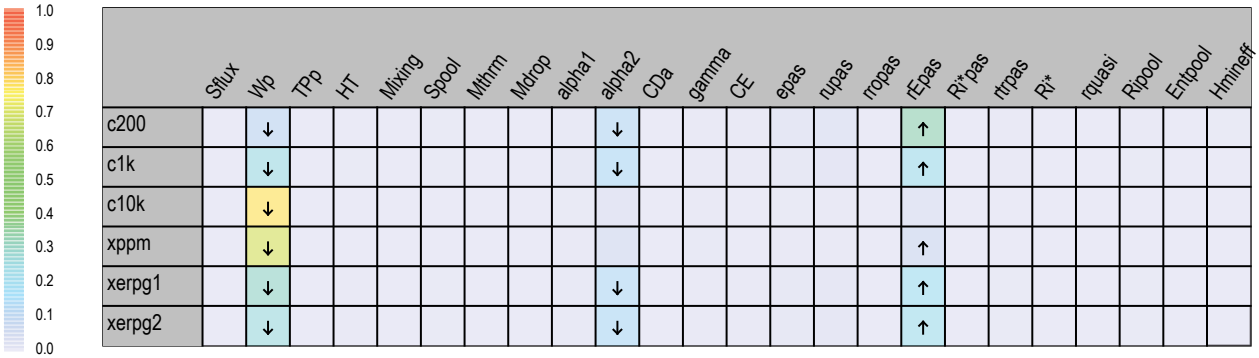
Correlation



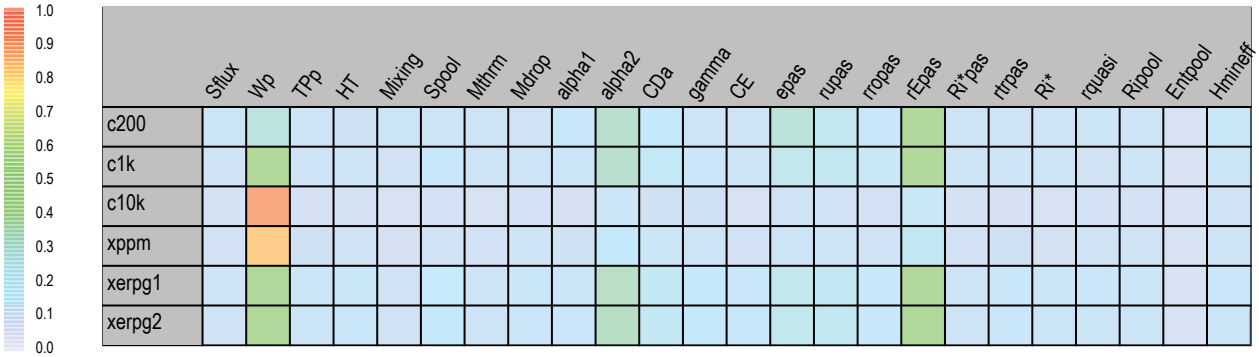
Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
c200	0.00	7047.01	1275.02	1255.93	32.60	4	4	0
c1k	49.99	837.93	249.32	252.58	18.70	4	0	0
c10k	1.46	99.28	12.39	11.72	24.03	4	0	0
xppm	1951.63	40059.80	7267.68	7054.83	16.43	4	0	0
xerpg1	566.10	9054.08	1916.45	1938.65	13.50	4	0	0
xerpg2	504.38	7830.61	1711.75	1733.51	13.74	4	0	0

Scenario Cl2-8 (Chlorine, low release rate, vertical elevated release F3)

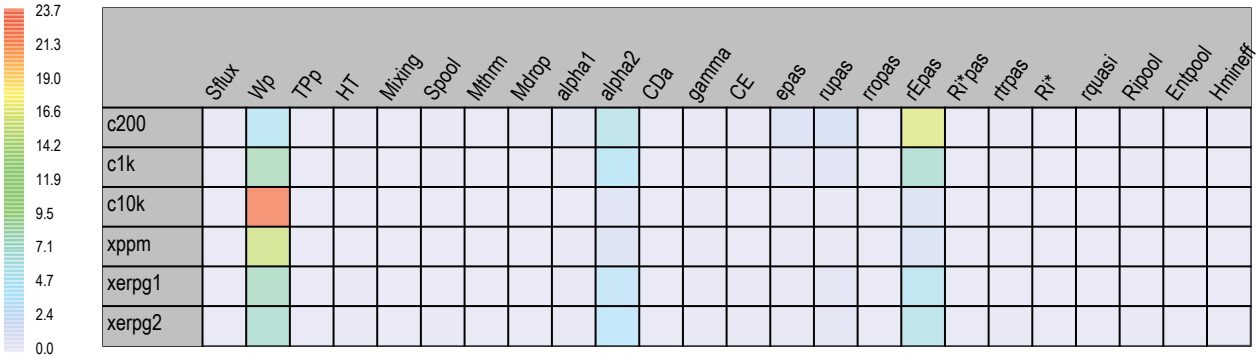
First order indices



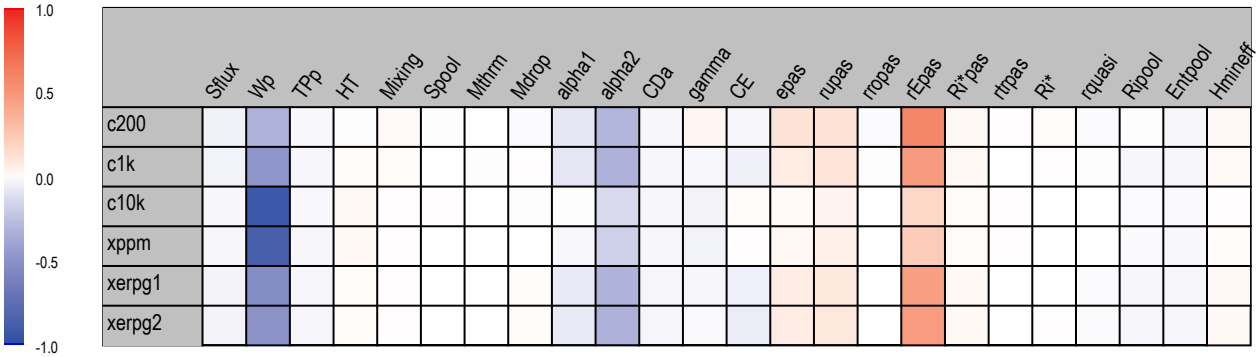
Total indices



Influence (CVSi)



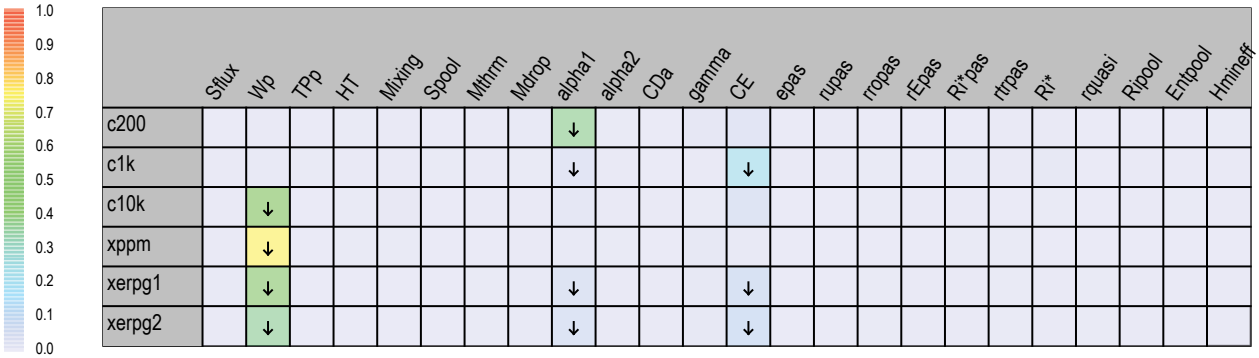
Correlation



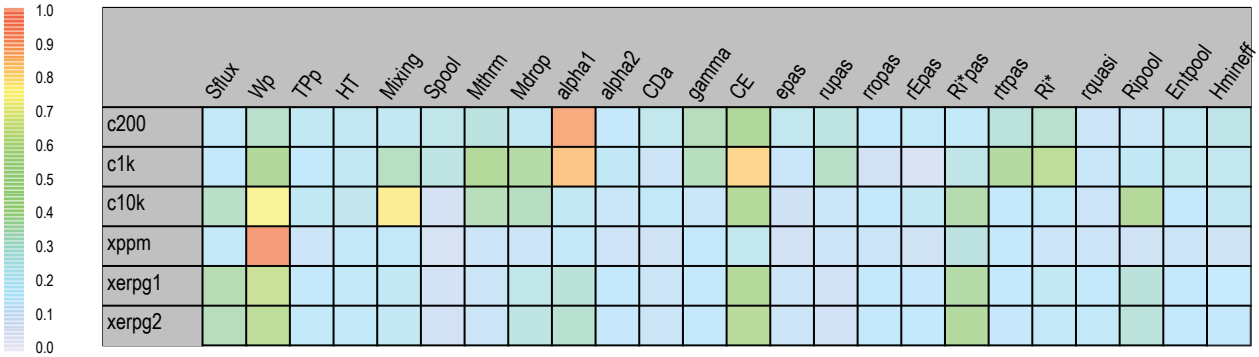
Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
c200	0.00	3343.88	821.23	787.91	51.87	1	5	0
c1k	34.48	471.31	186.77	175.99	33.09	1	0	0
c10k	2.92	17.10	10.80	9.95	30.53	1	0	0
xppm	1999.35	9215.99	6402.65	6024.85	22.68	1	0	0
xerpg1	354.22	2568.18	1538.22	1486.06	26.69	1	0	0
xerpg2	260.54	2342.01	1357.75	1318.44	28.02	1	0	0

Scenario Cl2-9 (Chlorine, high release rate, horizontal release near ground D5)

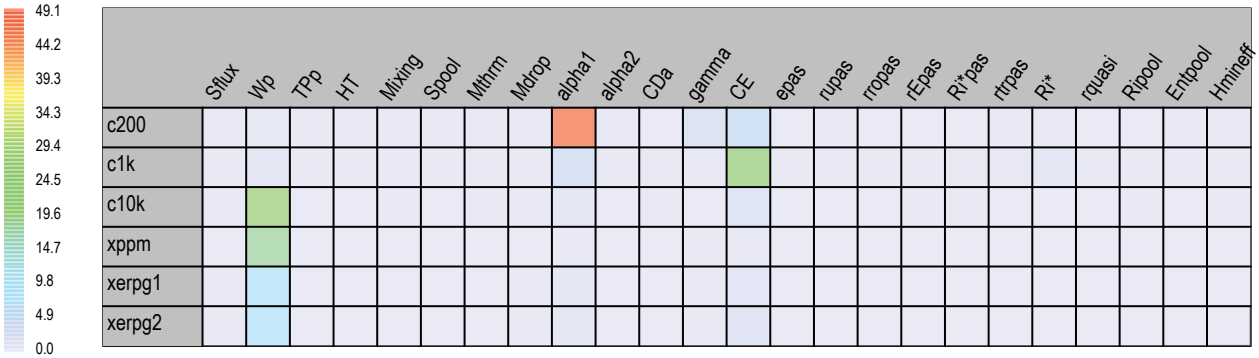
First order indices



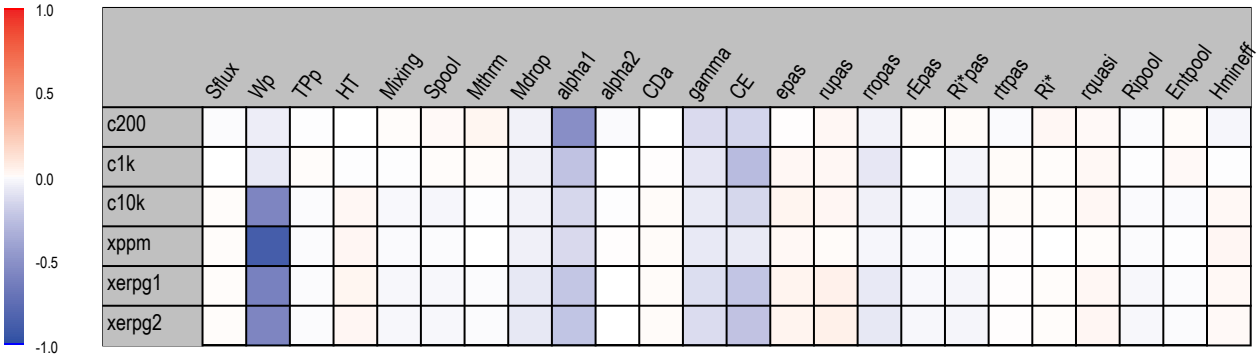
Total indices



Influence (CVSi)



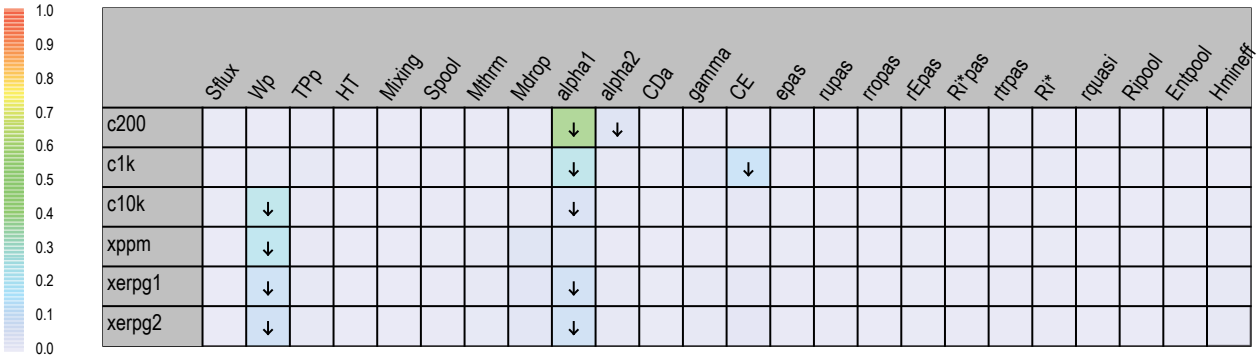
Correlation



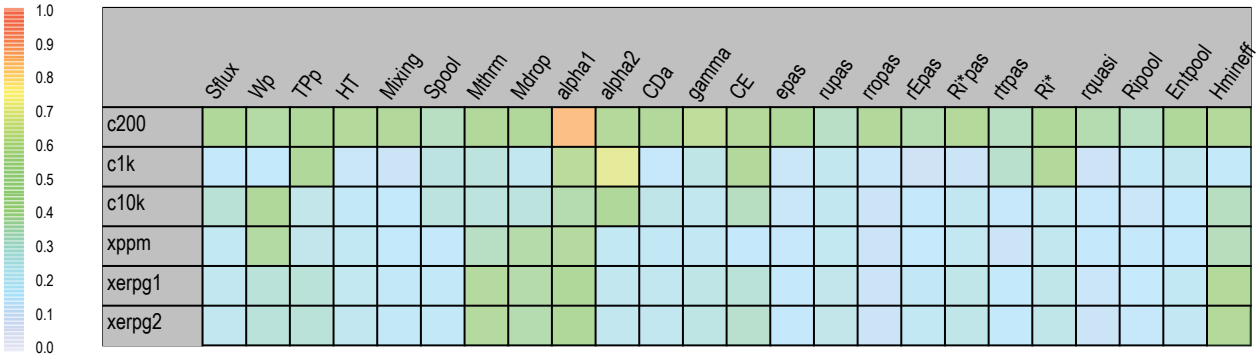
Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
c200	18.10	455170.00	14631.59	8789.20	136.11	11	0	0
c1k	3.79	116780.00	1583.43	1319.80	108.66	11	0	0
c10k	0.47	1043.70	44.79	41.17	40.83	11	0	0
xppm	187.58	50000.00	18246.63	16822.00	23.20	11	0	10
xerpg1	35.53	32779.00	5367.40	5243.90	21.46	11	0	0
xerpg2	29.91	29245.00	4875.49	4770.70	21.56	11	0	0

Scenario Cl2-10 (Chlorine, high release rate, horizontal elevated release D5)

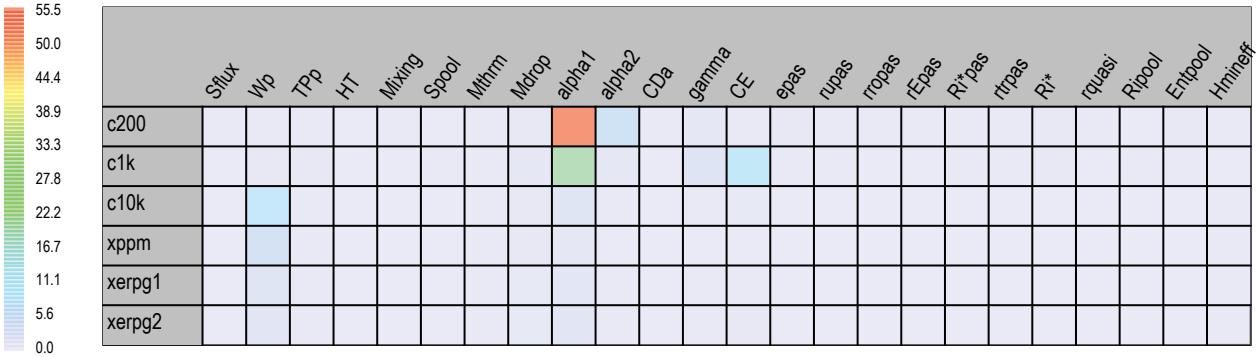
First order indices



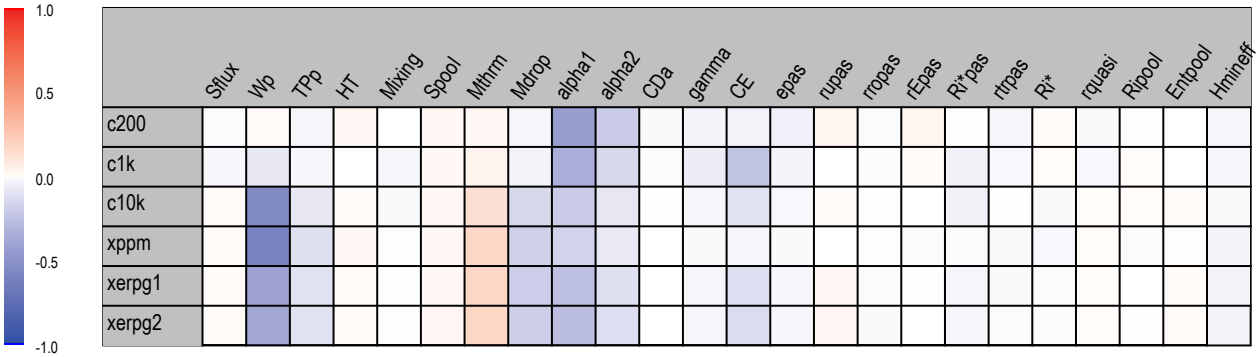
Total indices



Influence (CVSi)



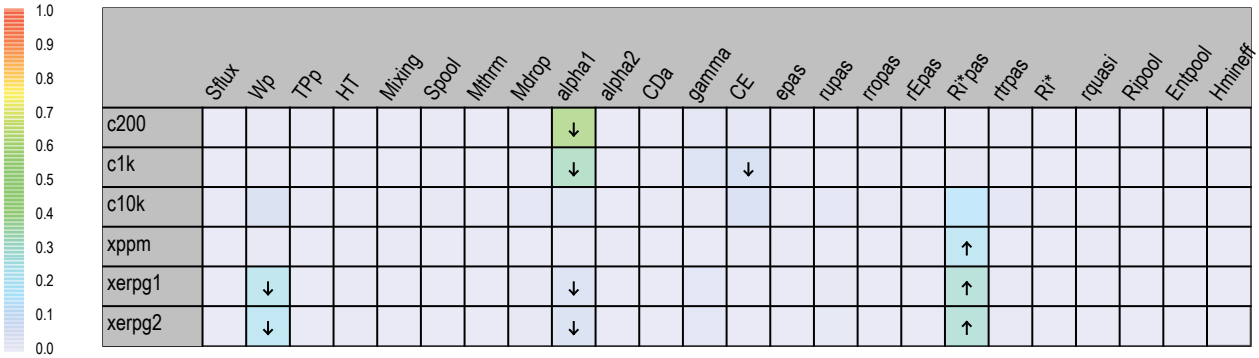
Correlation



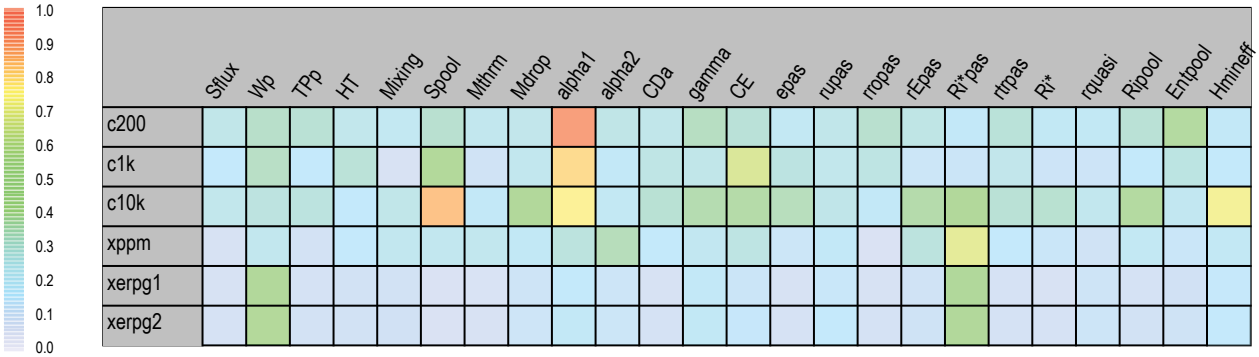
Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
c200	1923.81	264296.30	6948.13	4941.82	132.71	1241	0	0
c1k	323.67	60368.91	1199.93	1020.22	80.98	1241	0	0
c10k	11.06	589.50	42.14	40.94	35.02	1241	0	0
xppm	7220.55	47165.55	17714.93	16566.37	22.50	1241	0	0
xerpg1	2432.69	17475.11	5074.02	5083.24	19.57	1241	0	0
xerpg2	2211.36	16696.08	4594.08	4583.01	19.76	1241	0	0

Scenario Cl2-11 (Chlorine, high release rate, horizontal release near ground F3)

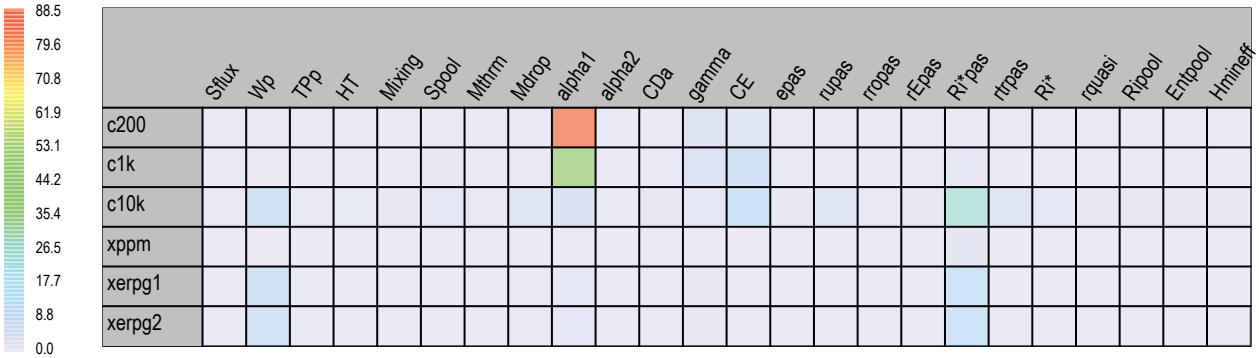
First order indices



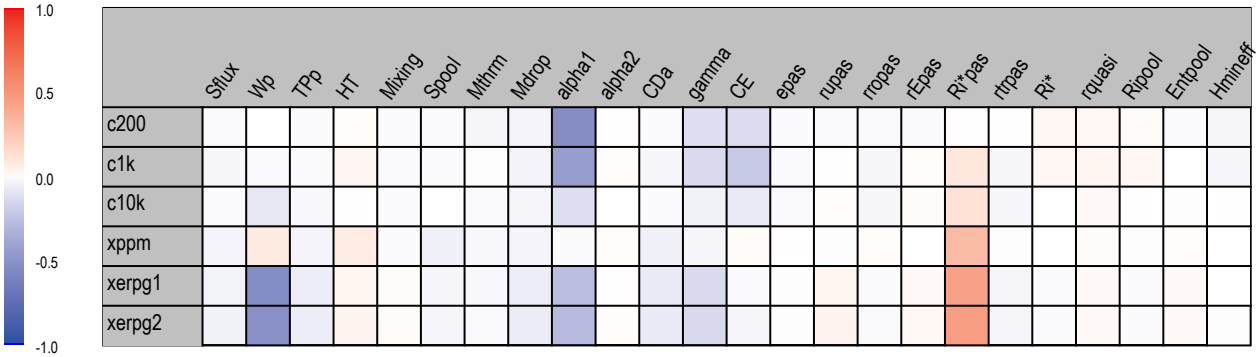
Total indices



Influence (CVSi)



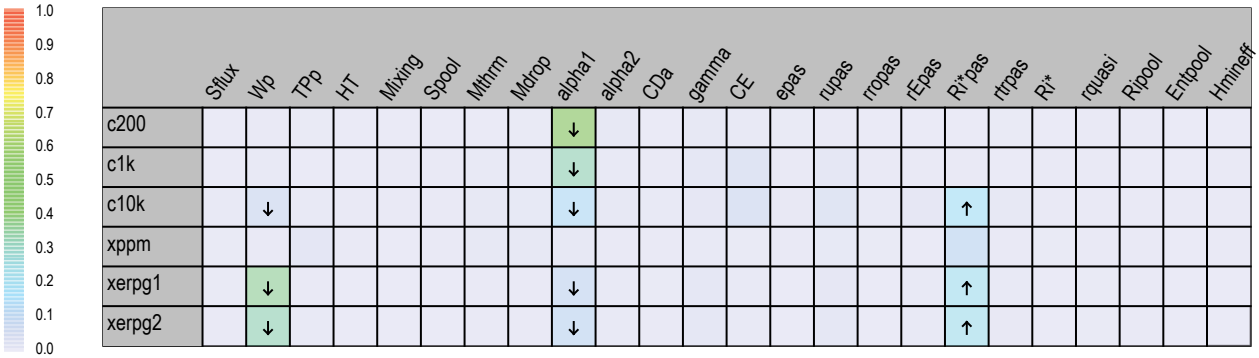
Correlation



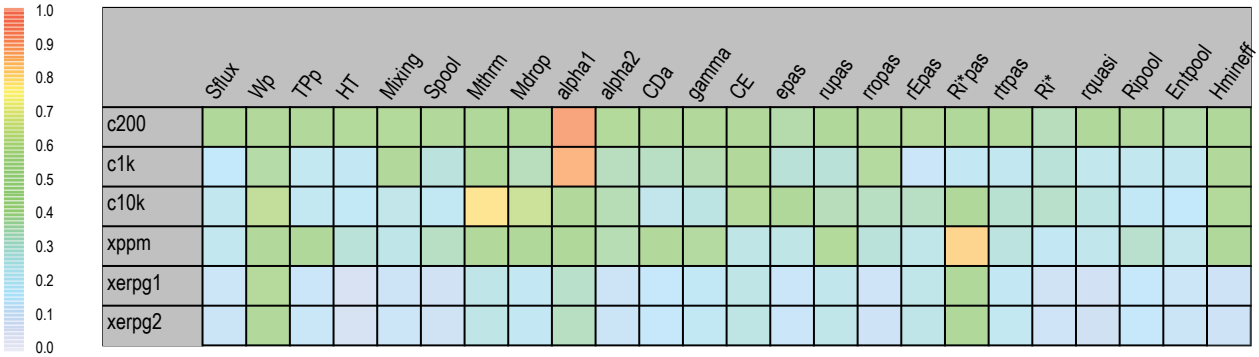
Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
c200	44.36	403256.40	14004.95	7443.16	151.05	6	0	0
c1k	6.51	177635.00	2922.06	2138.99	116.28	6	0	0
c10k	2.51	65905.77	305.18	284.12	162.67	6	0	0
xppm	415.57	50014.87	48678.02	50000.00	12.71	6	0	18856
xerpg1	90.69	50000.00	24970.95	23220.70	38.71	6	0	33
xerpg2	78.86	50000.00	21860.56	20513.53	38.70	6	0	17

Scenario Cl2-12 (Chlorine, high release rate, horizontal elevated release F3)

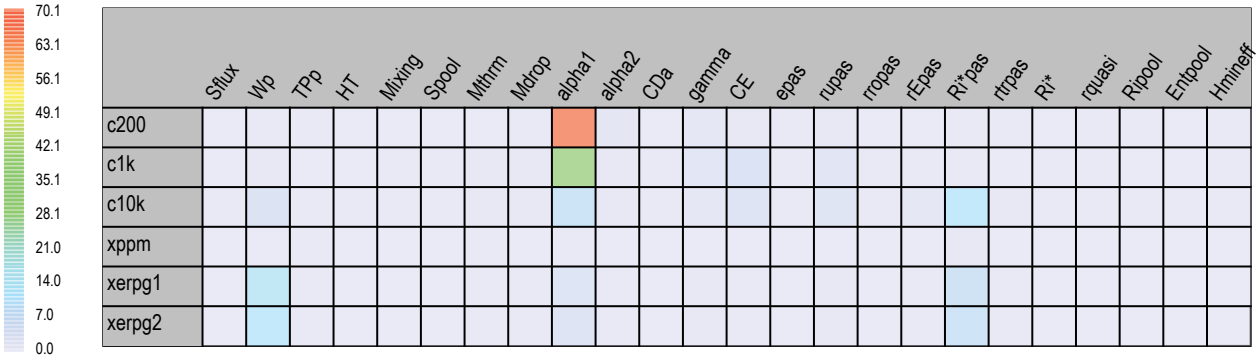
First order indices



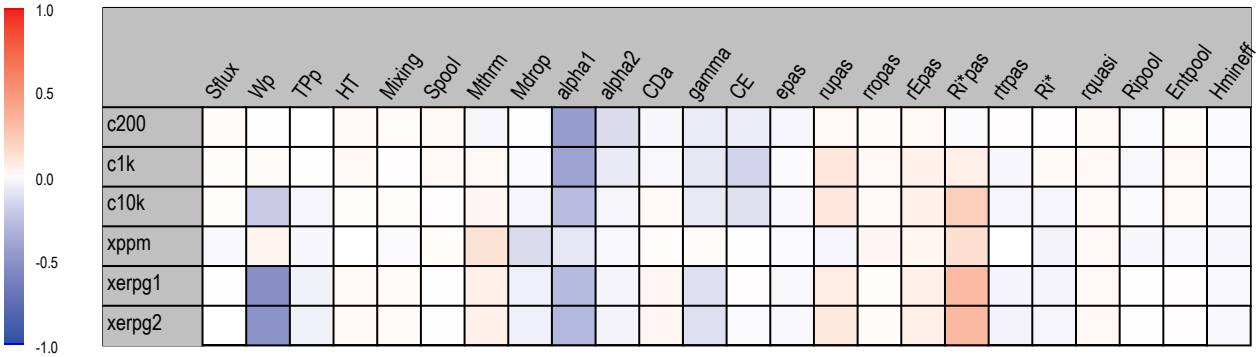
Total indices



Influence (CVSi)



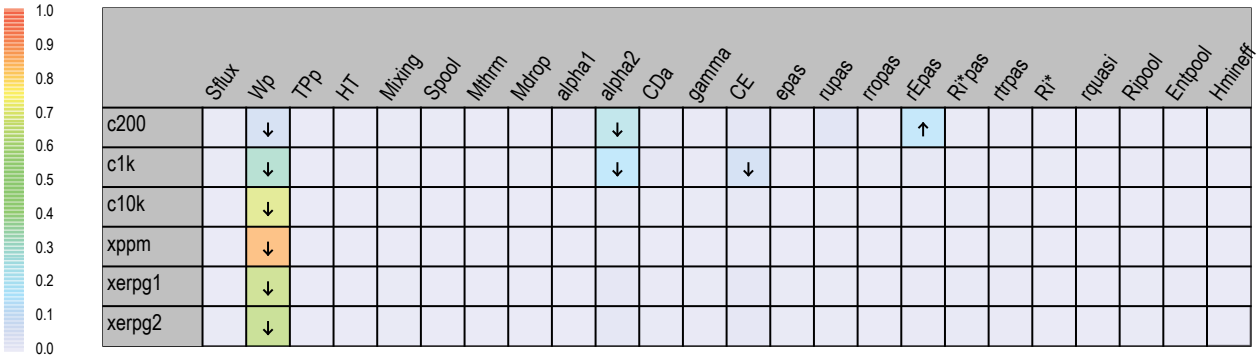
Correlation



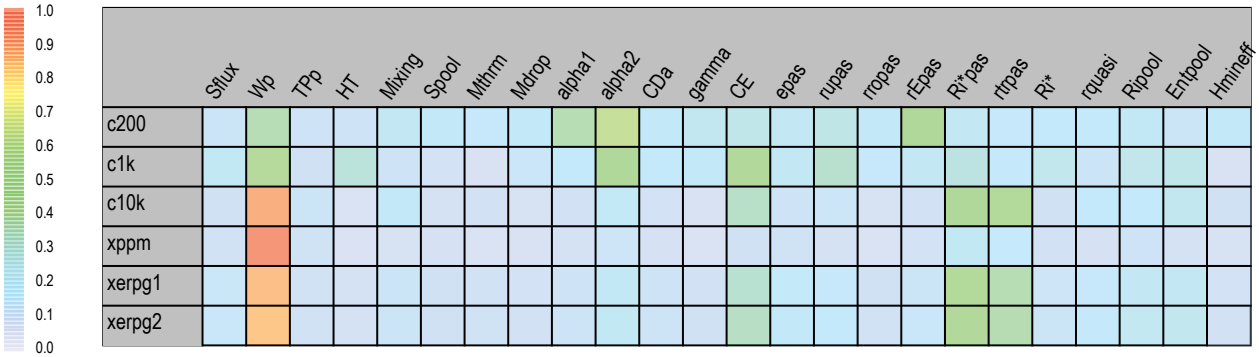
Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
c200	1762.68	299338.90	8204.03	5038.34	164.39	517	0	0
c1k	362.03	89905.13	2443.88	1870.18	107.29	517	0	0
c10k	13.14	13565.25	281.90	260.32	65.77	517	0	0
xppm	8075.73	50055.82	49140.84	50000.00	10.08	517	0	18735
xerpg1	2872.76	50000.00	23699.98	21497.73	37.61	517	0	34
xerpg2	2617.34	50000.00	20716.45	18953.40	37.62	517	0	15

Scenario Cl2-13 (Chlorine, high release rate, vertical release near ground D5)

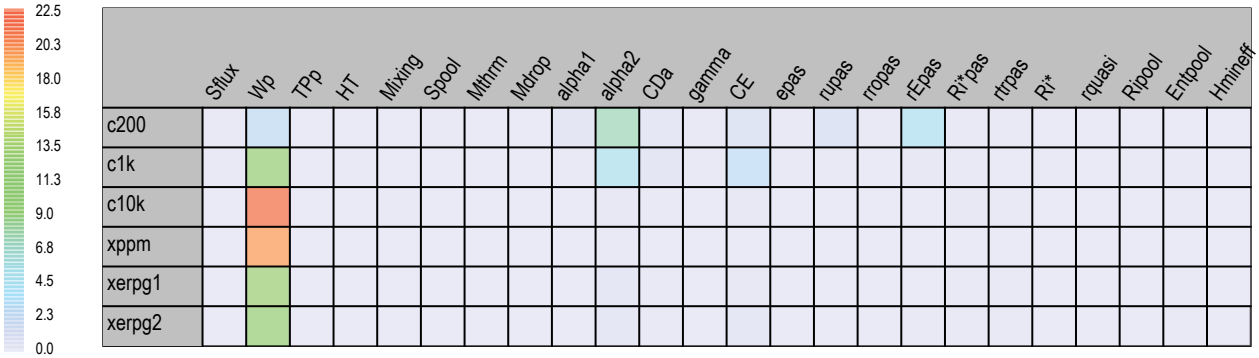
First order indices



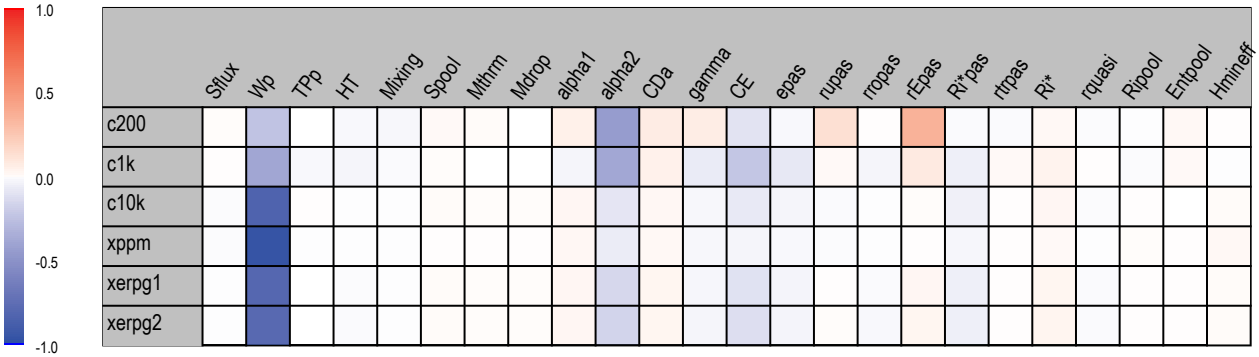
Total indices



Influence (CVSi)



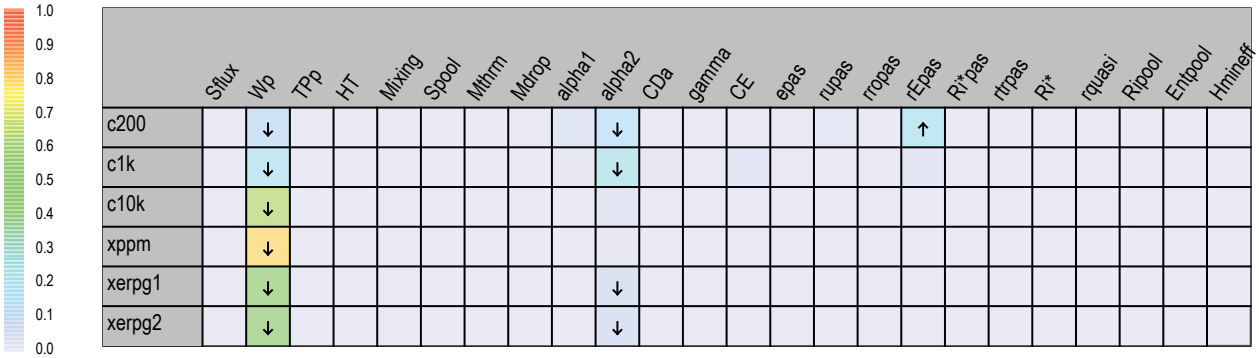
Correlation



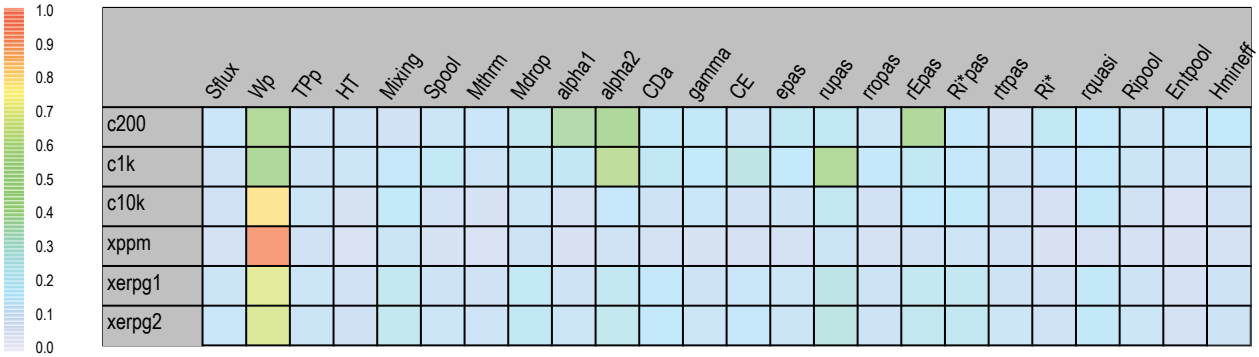
Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
c200	0.00	12142.59	4196.48	4170.05	30.62	9	36	0
c1k	317.46	6530.11	922.74	878.26	30.37	9	0	0
c10k	12.37	362.16	39.59	39.58	32.11	9	0	0
xppm	7433.38	50000.00	17157.30	17155.78	23.28	9	0	3
xerpg1	2152.07	24859.39	4784.65	4732.53	19.40	9	0	0
xerpg2	1930.58	22549.22	4317.51	4259.97	19.31	9	0	0

Scenario Cl2-14 (Chlorine, high release rate, vertical elevated release D5)

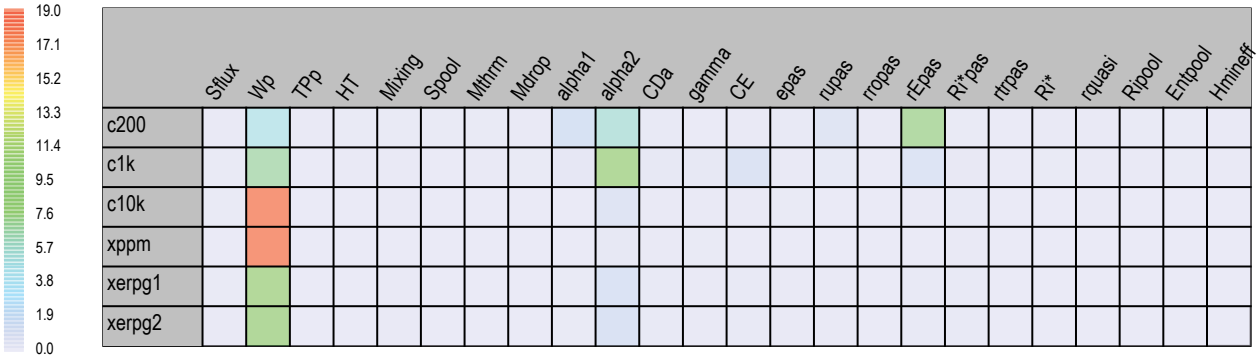
First order indices



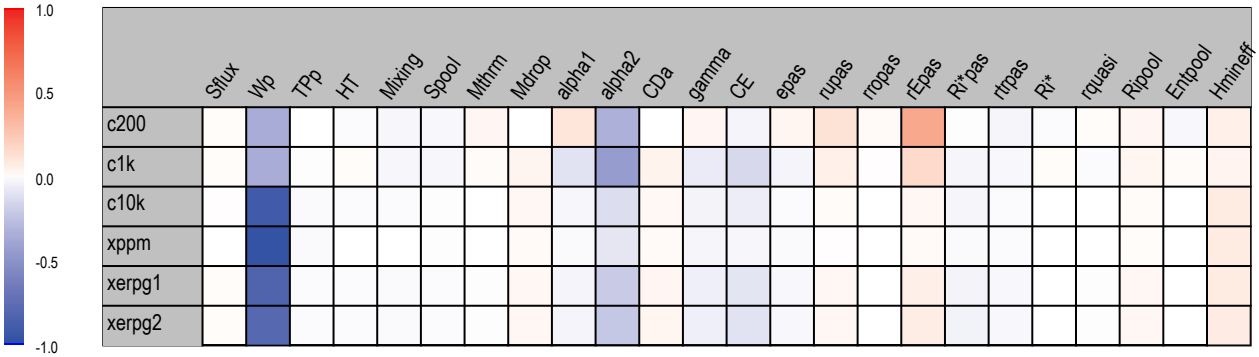
Total indices



Influence (CVSi)



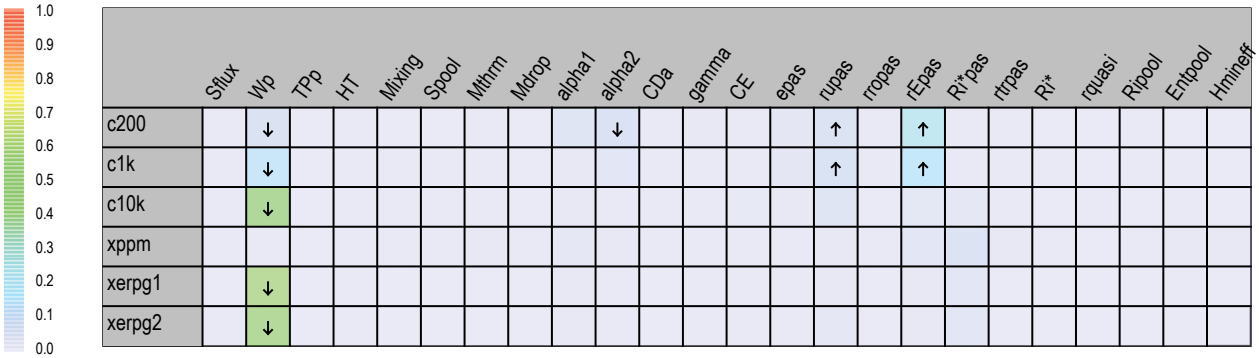
Correlation



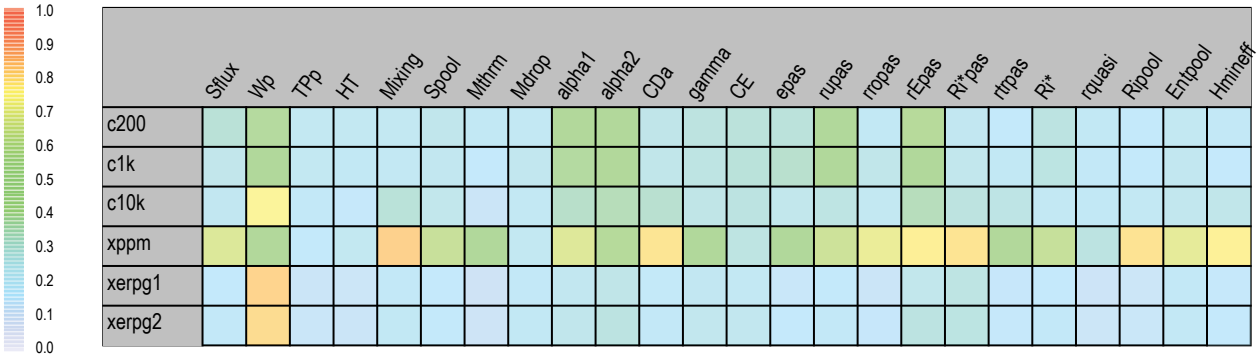
Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
c200	0.00	10217.55	3258.26	3149.06	38.67	5	44	0
c1k	307.95	11695.97	827.32	779.87	33.03	5	0	0
c10k	12.12	147.19	38.08	37.99	29.84	5	0	0
xppm	7527.85	39584.07	16778.86	16664.65	23.54	5	0	0
xerpg1	2363.79	12242.03	4601.82	4457.14	19.32	5	0	0
xerpg2	2121.36	11072.28	4144.12	3990.29	19.25	5	0	0

Scenario Cl2-15 (Chlorine, high release rate, vertical release near ground F3)

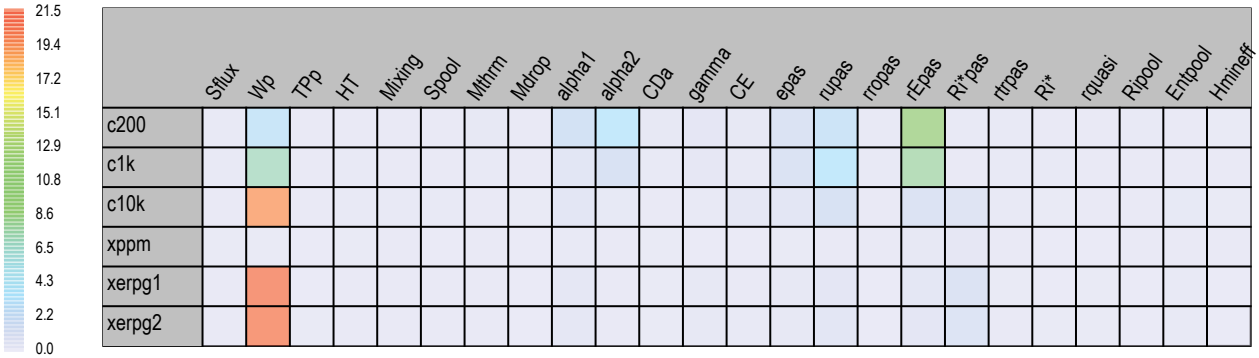
First order indices



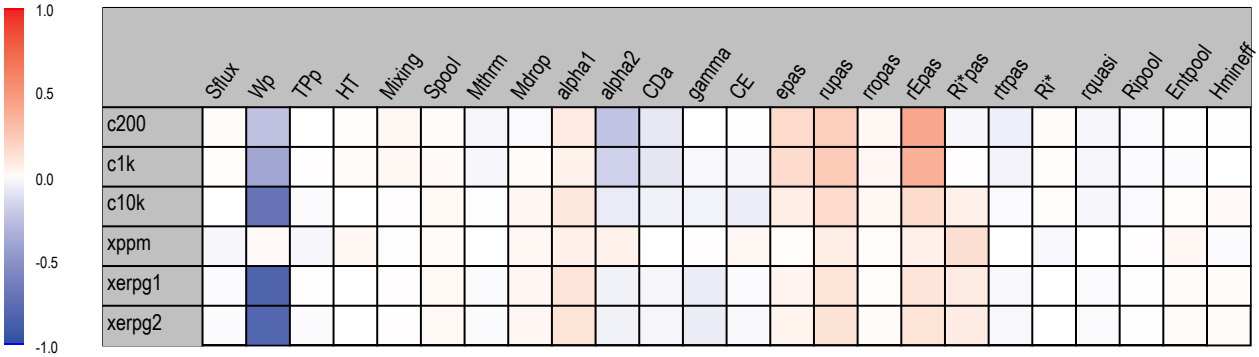
Total indices



Influence (CVSi)



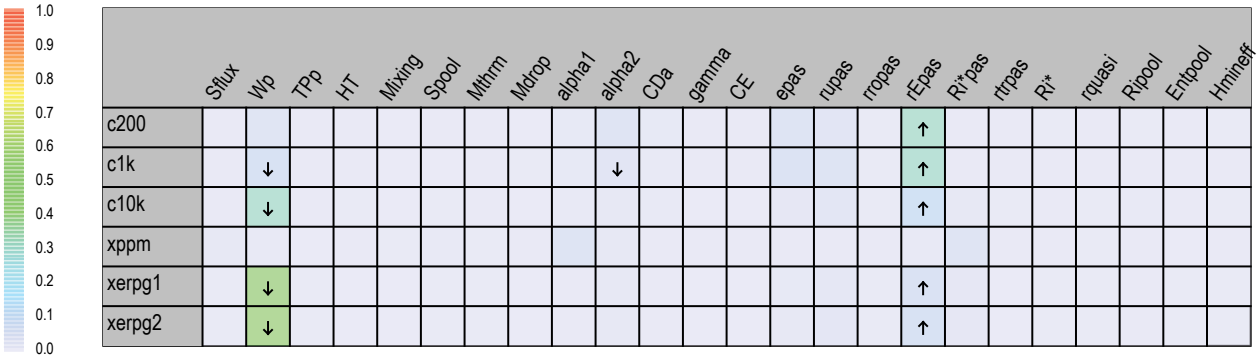
Correlation



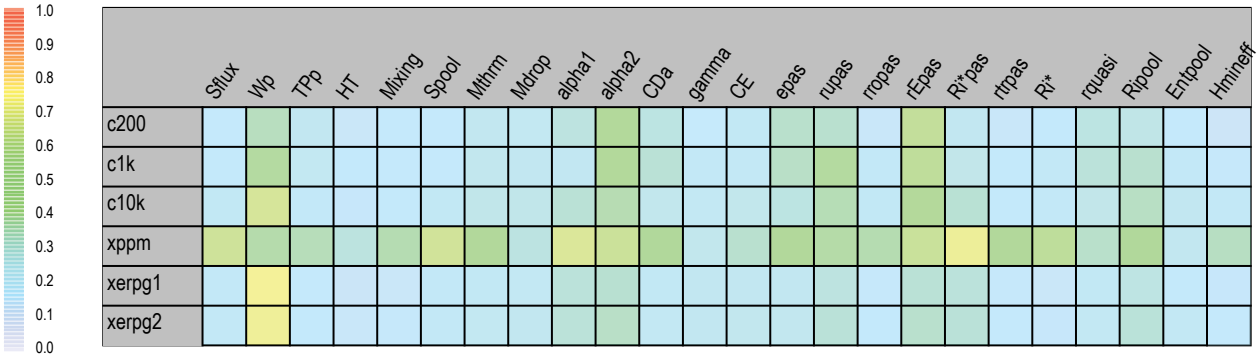
Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
c200	0.00	26353.46	6244.35	6496.68	49.61	17	91	0
c1k	0.00	16623.46	2823.71	2703.80	48.80	17	7	0
c10k	8.93	1965.58	304.34	257.09	42.44	17	0	0
xppm	4353.30	50082.68	49530.22	50000.00	7.20	17	0	19503
xerpg1	0.00	50000.00	24643.55	20338.44	37.61	17	18	50
xerpg2	0.00	50024.72	21664.90	18069.04	37.54	17	21	10

Scenario Cl2-16 (Chlorine, high release rate, vertical elevated release F3)

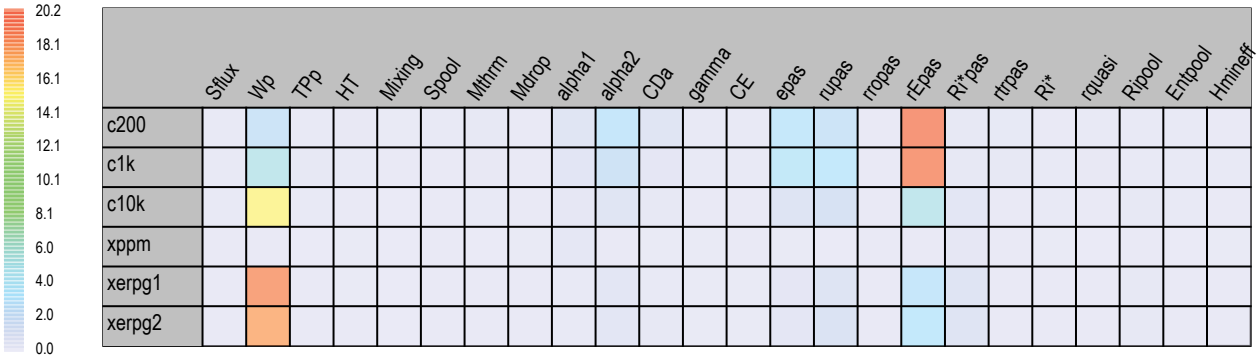
First order indices



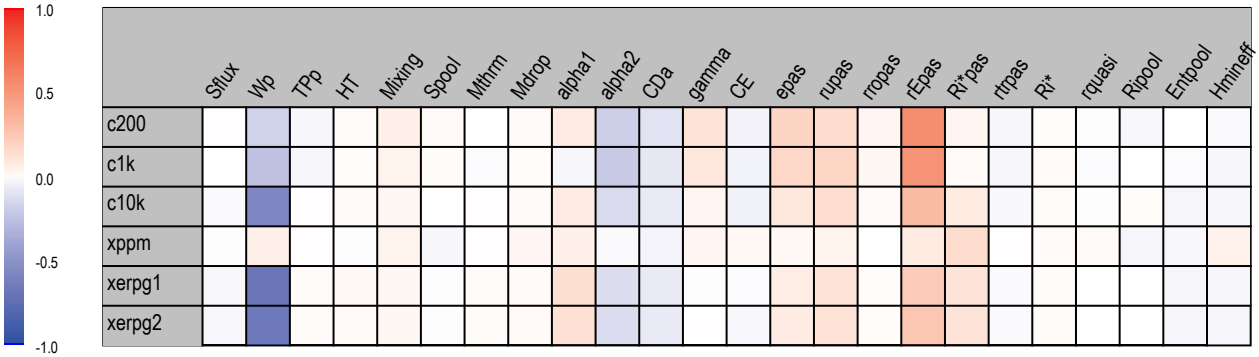
Total indices



Influence (CVSi)



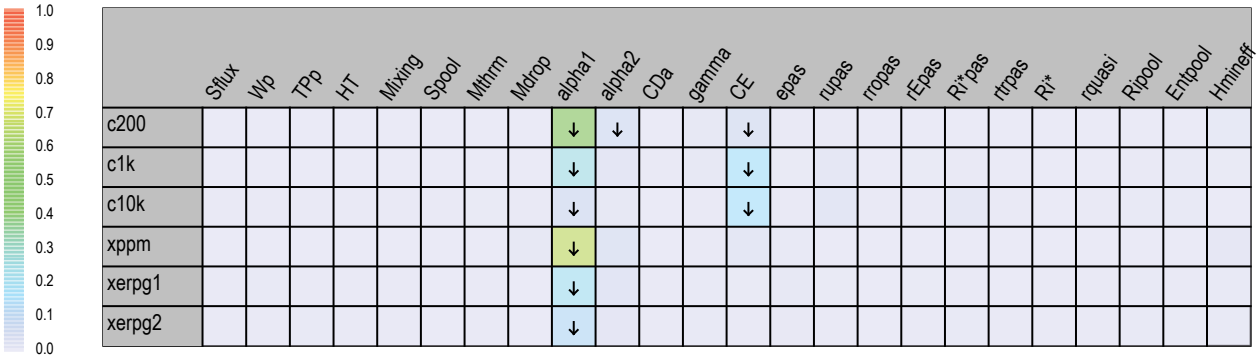
Correlation



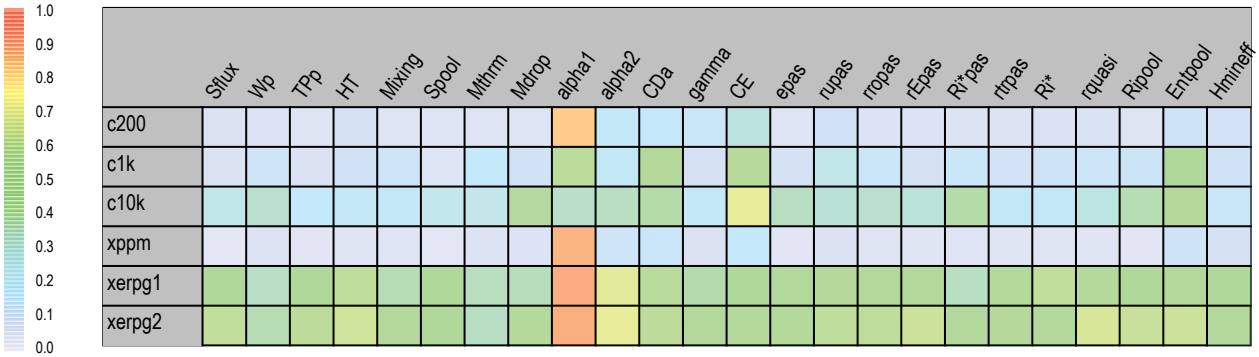
Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
c200	0.00	27590.95	4789.33	4310.36	66.52	10	160	0
c1k	0.00	11625.69	2300.56	1984.23	64.48	10	20	0
c10k	0.00	953.67	265.96	222.11	50.58	10	1	0
xppm	0.00	50082.53	49257.57	50000.00	9.61	10	2	19220
xerpg1	0.00	50033.31	22216.15	18634.89	43.45	10	49	155
xerpg2	0.00	50000.00	19444.42	16447.96	43.95	10	54	2

Scenario N2-1 (Nitrogen, low release rate, horizontal release near ground D5)

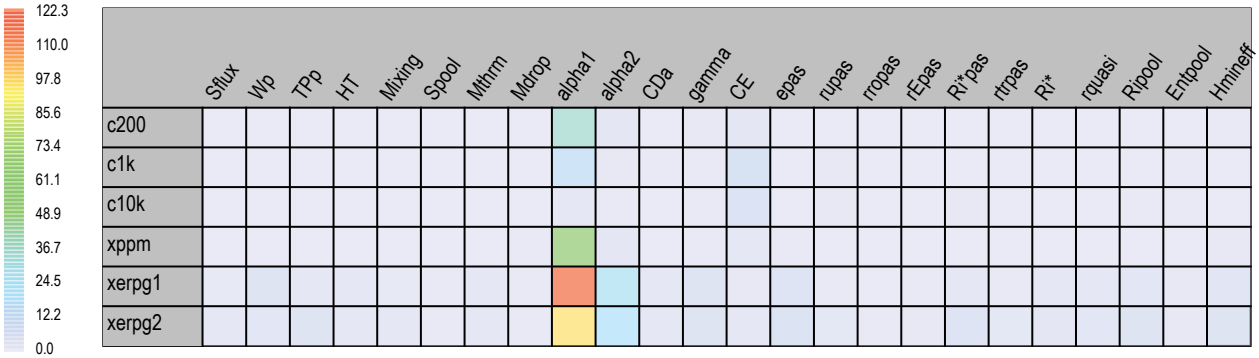
First order indices



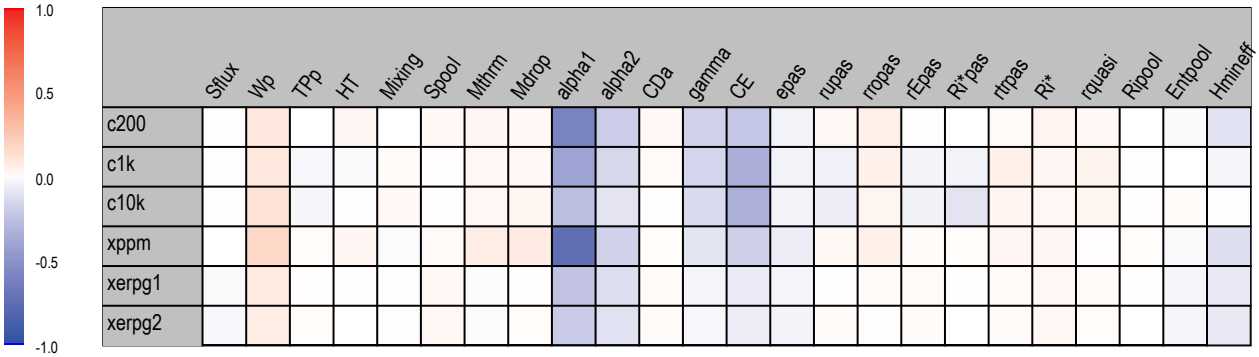
Total indices



Influence (CVSi)



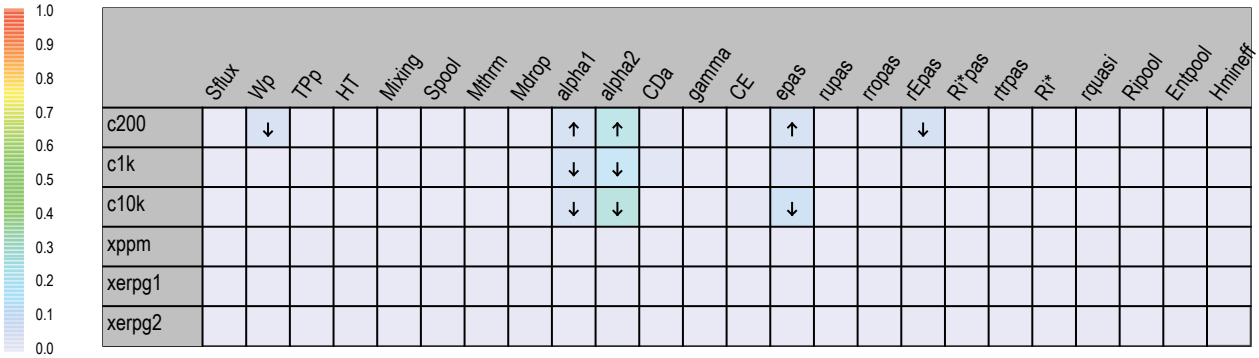
Correlation



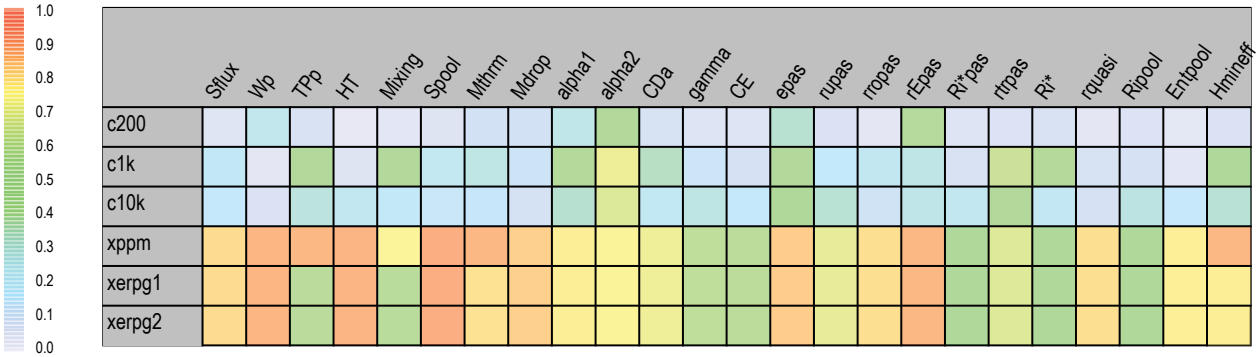
Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
c200	1308.72	608011.00	75610.92	60372.67	66.96	71	0	0
c1k	551.47	430783.50	21141.00	18139.15	58.37	71	0	0
c10k	277.29	85640.27	5995.40	5356.11	48.49	71	0	0
xppm	0.00	91.13	8.17	6.56	89.21	71	1889	0
xerpg1	0.00	42.81	0.32	0.00	645.69	72	19041	0
xerpg2	0.00	26.02	0.21	0.00	782.52	71	19395	0

Scenario N2-2 (Nitrogen, low release rate, horizontal elevated release D5)

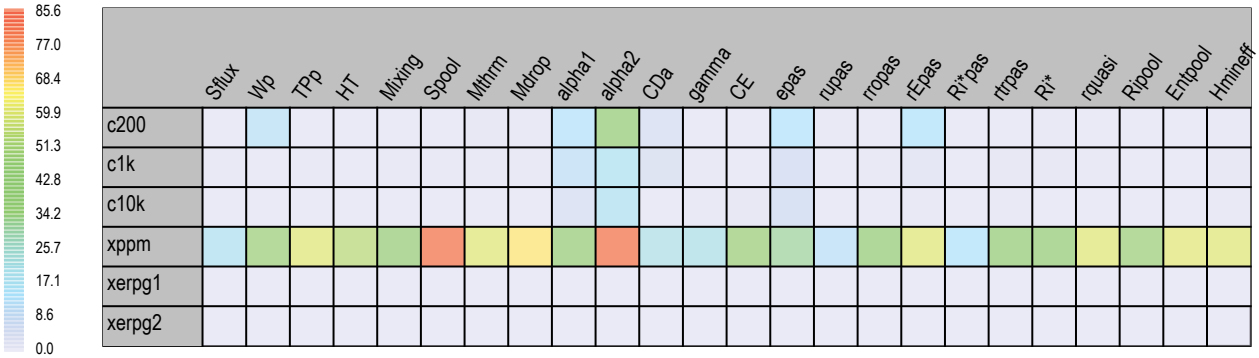
First order indices



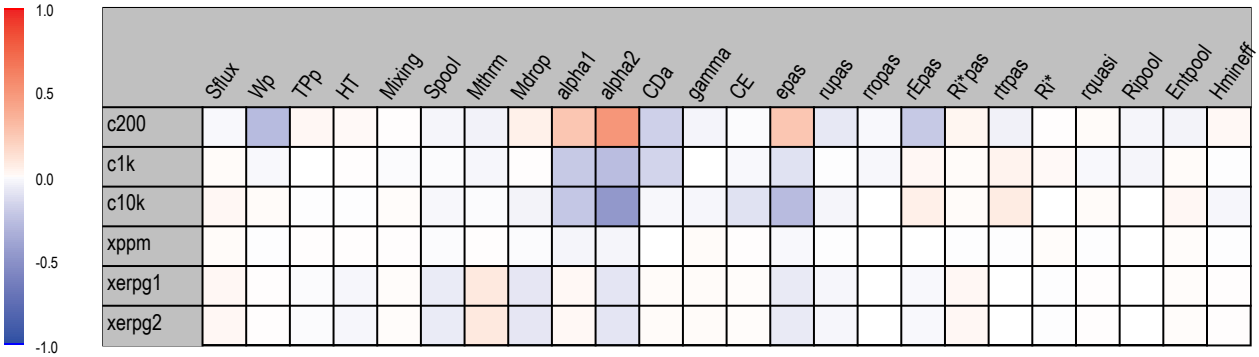
Total indices



Influence (CVSi)



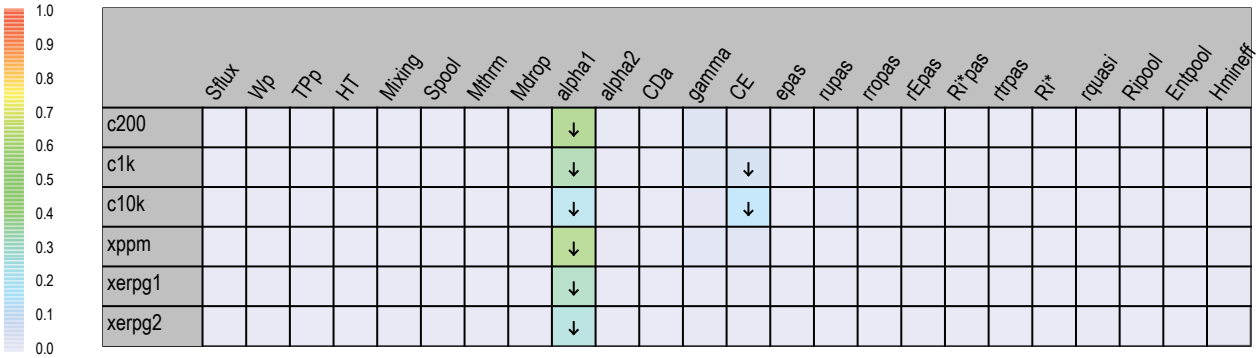
Correlation



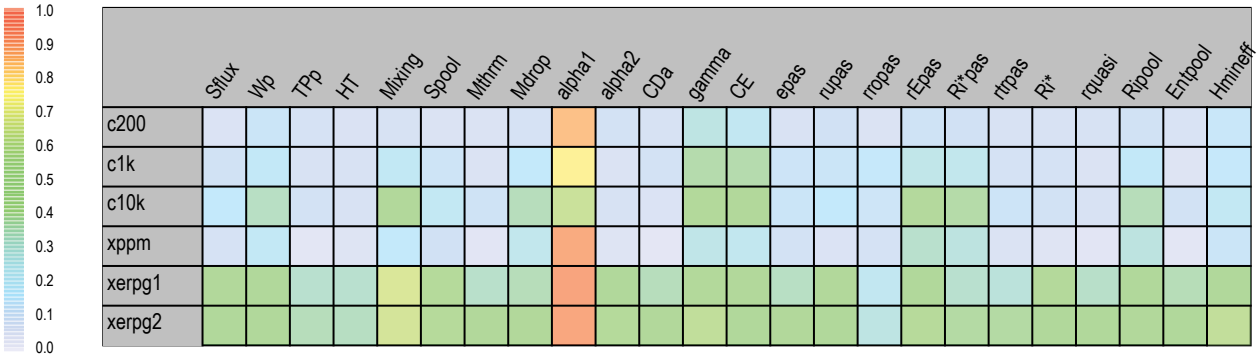
Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
c200	0.00	438.56	36.70	8.92	167.43	182	579	0
c1k	894.55	122899.80	2847.81	2227.10	119.09	177	0	0
c10k	0.00	36990.74	2361.60	2120.26	61.15	177	557	0
xppm	0.00	45.75	0.01	0.00	6308.56	177	19810	0
xerpg1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0	0	0
xerpg2	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0	0	0

Scenario N2-3 (Nitrogen, low release rate, horizontal release near ground F3)

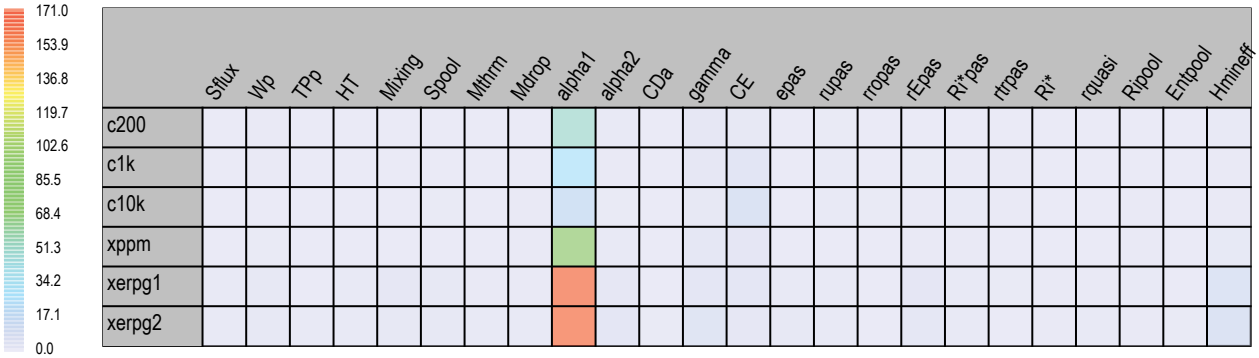
First order indices



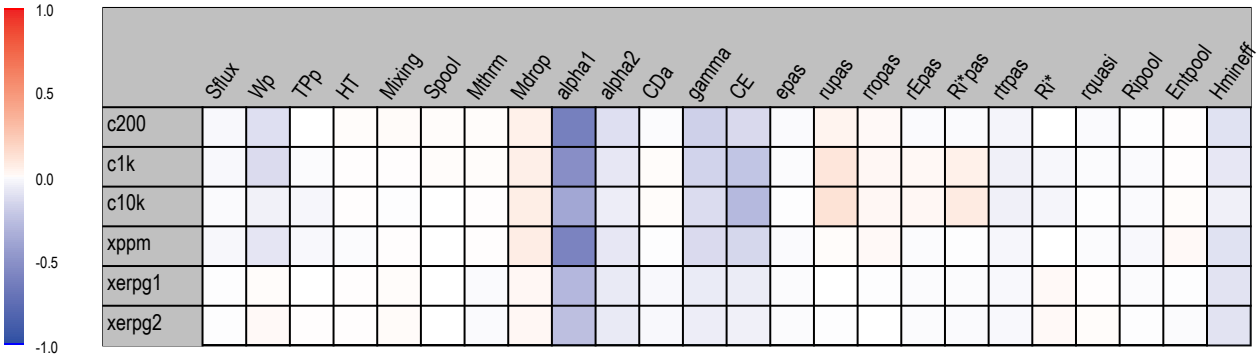
Total indices



Influence (CVSi)



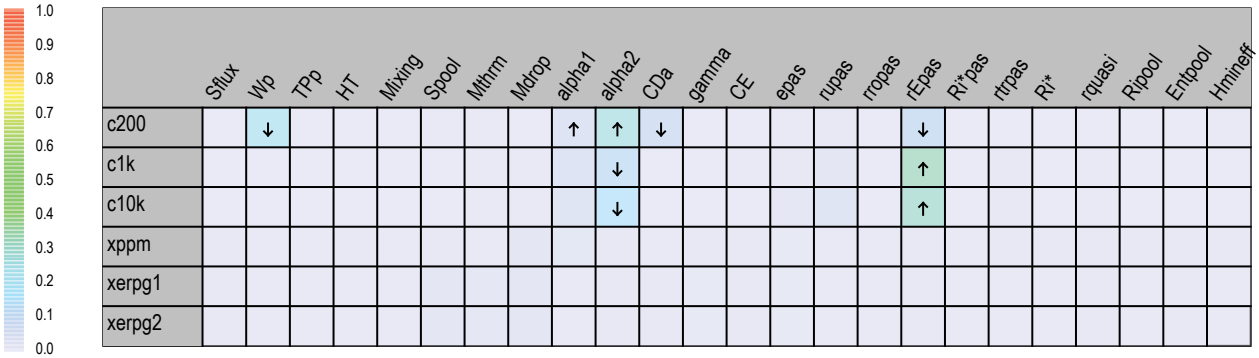
Correlation



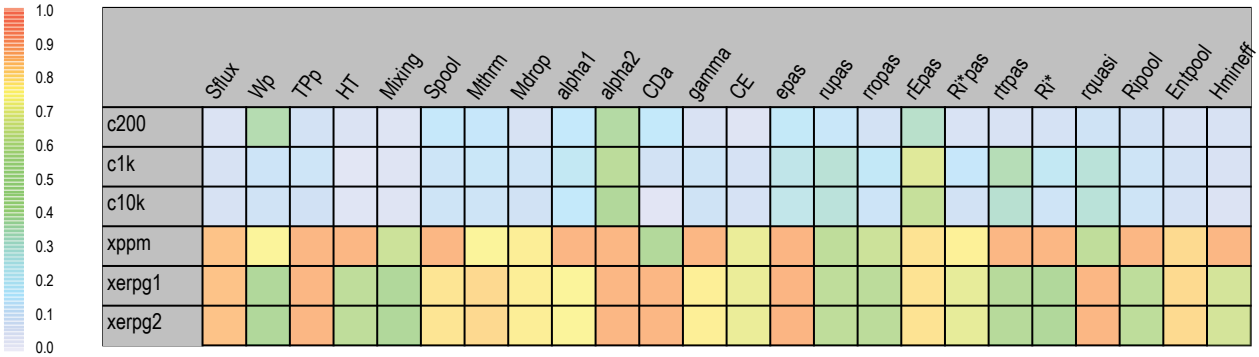
Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
c200	5549.21	879871.10	87639.22	63031.53	86.58	35	0	0
c1k	3230.51	630513.00	43287.54	34829.97	79.73	35	0	0
c10k	1928.19	457105.80	20640.31	18233.93	75.37	35	0	0
xppm	0.00	372.87	10.67	6.39	124.57	35	7	0
xerpg1	0.00	103.48	0.70	0.00	526.25	36	18284	0
xerpg2	0.00	68.28	0.49	0.00	607.94	35	19040	0

Scenario N2-4 (Nitrogen, low release rate, horizontal elevated release F3)

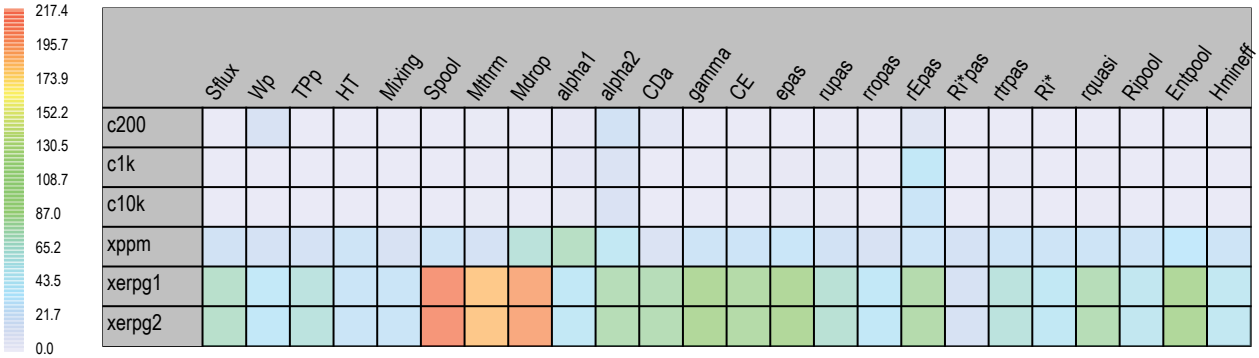
First order indices



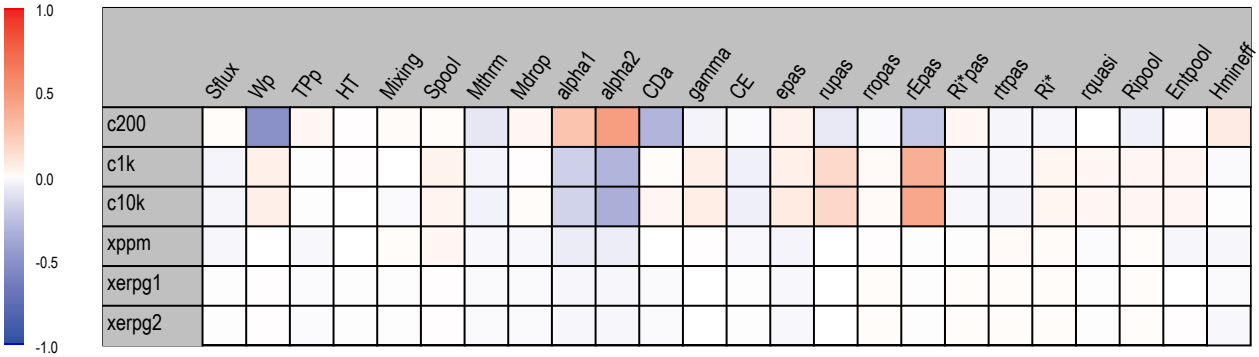
Total indices



Influence (CVSi)



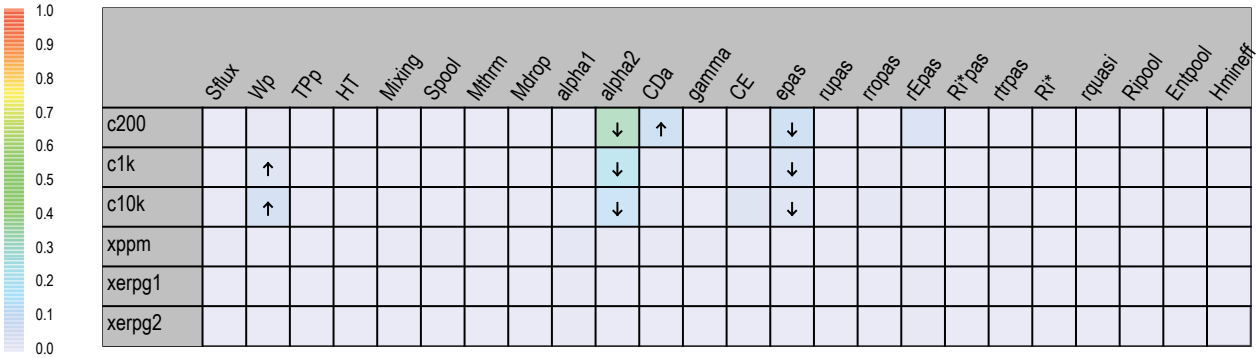
Correlation



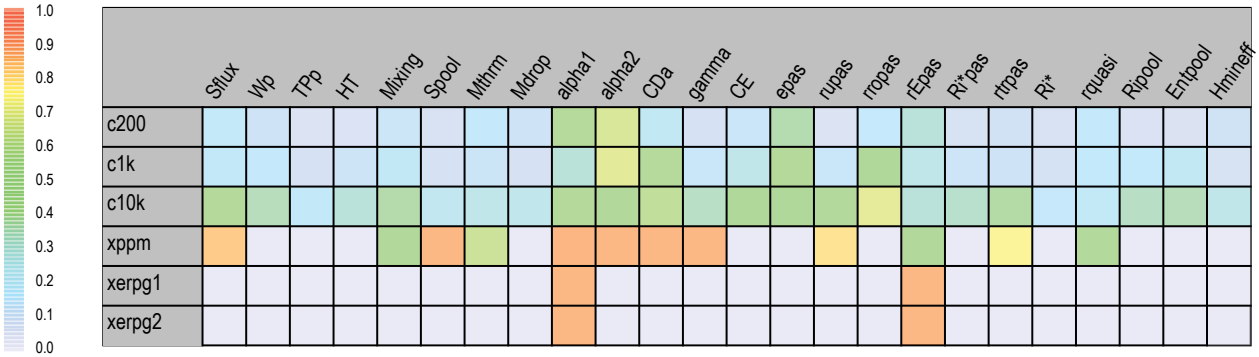
Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
c200	0.00	3045.93	938.99	788.69	83.87	353	453	0
c1k	0.00	364969.00	9619.09	5207.48	120.89	351	2	0
c10k	0.00	177540.50	6217.88	4033.61	98.93	351	187	0
xppm	0.00	116.79	0.08	0.00	2570.37	351	19606	0
xerpg1	0.00	40.00	0.0	0.00	8100.23	351	19638	0
xerpg2	0.00	37.47	0.0	0.00	8128.75	351	19638	0

Scenario N2-5 (Nitrogen, low release rate, vertical release near ground D5)

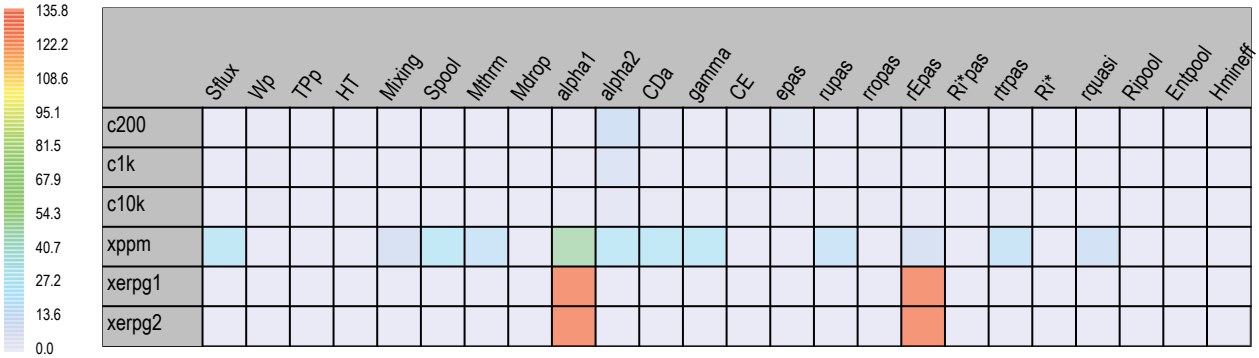
First order indices



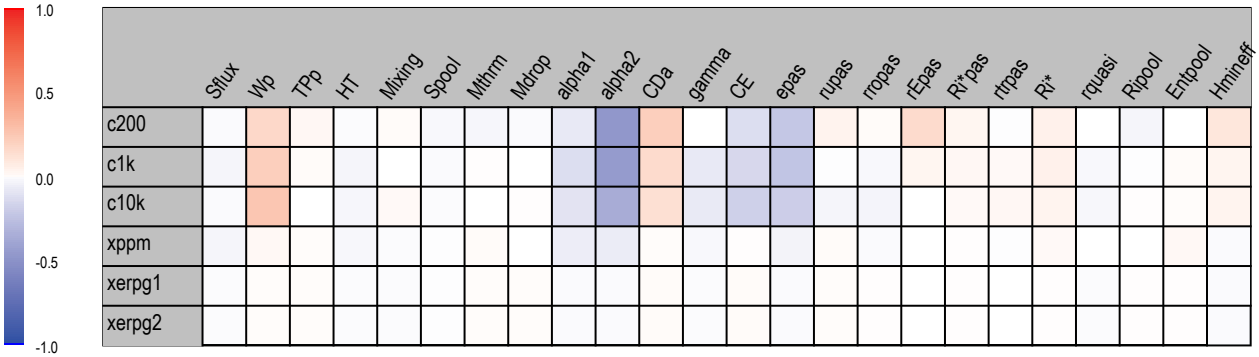
Total indices



Influence (CVSi)



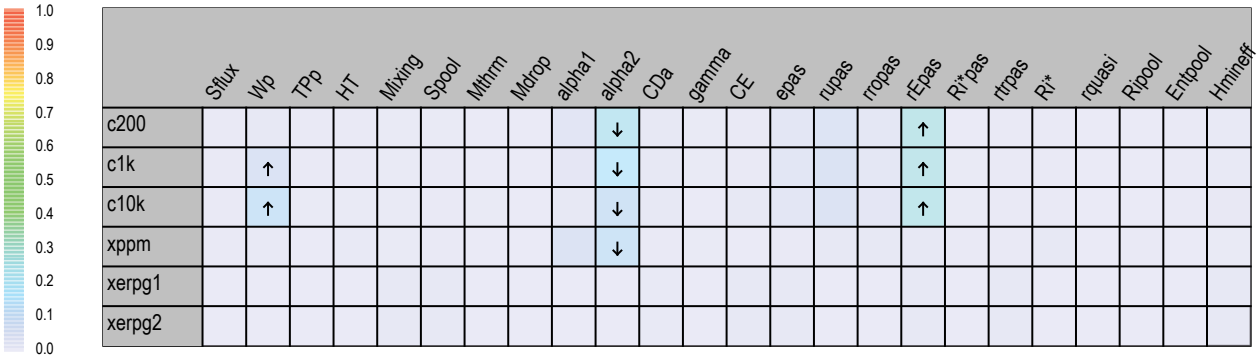
Correlation



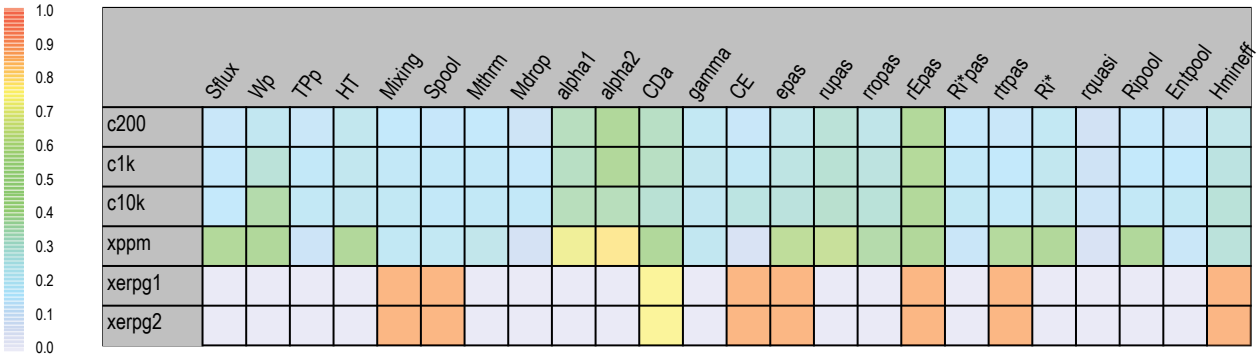
Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
c200	0.00	307988.70	28920.47	26842.40	38.81	1	5	0
c1k	4553.63	131072.50	11509.78	10686.18	33.52	1	0	0
c10k	0.00	38900.94	4106.33	3909.22	24.74	1	1	0
xppm	0.00	47.19	0.05	0.00	2550.16	1	19950	0
xerpg1	0.00	35.55	0.00	0.00	14138.95	1	19990	0
xerpg2	0.00	34.09	0.00	0.00	14138.95	1	19990	0

Scenario N2-7 (Nitrogen, low release rate, vertical release near ground F3)

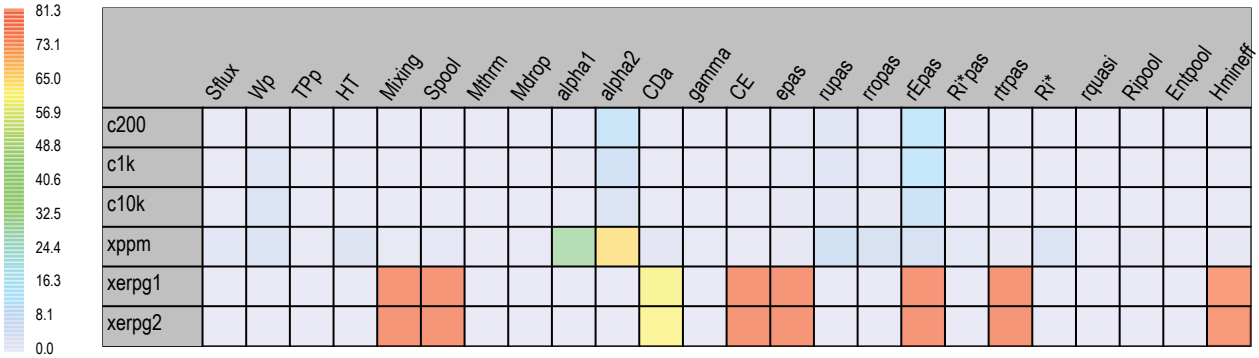
First order indices



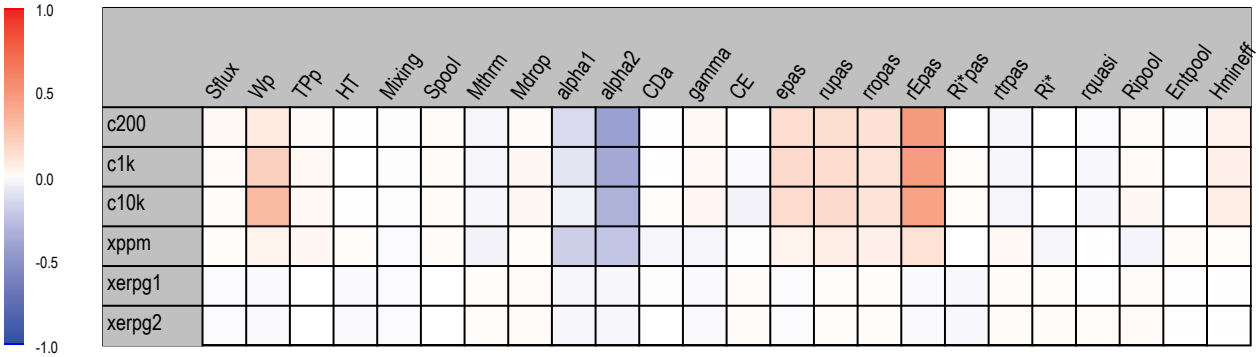
Total indices



Influence (CVSi)



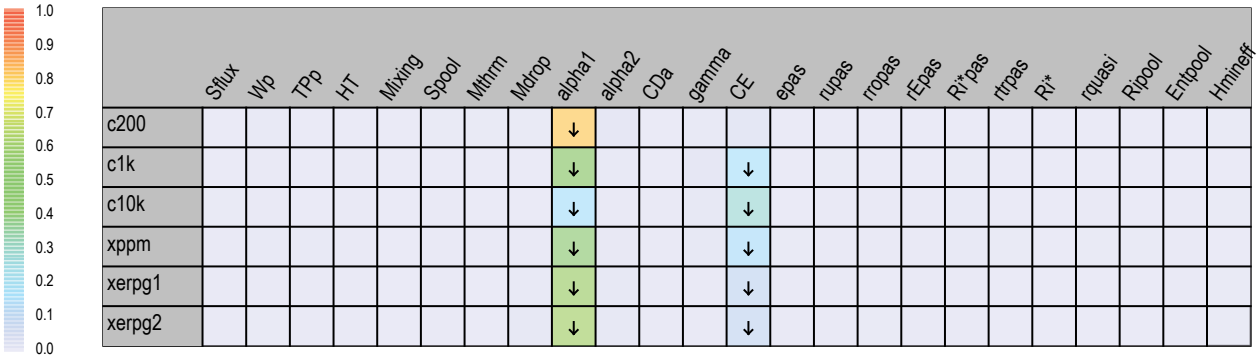
Correlation



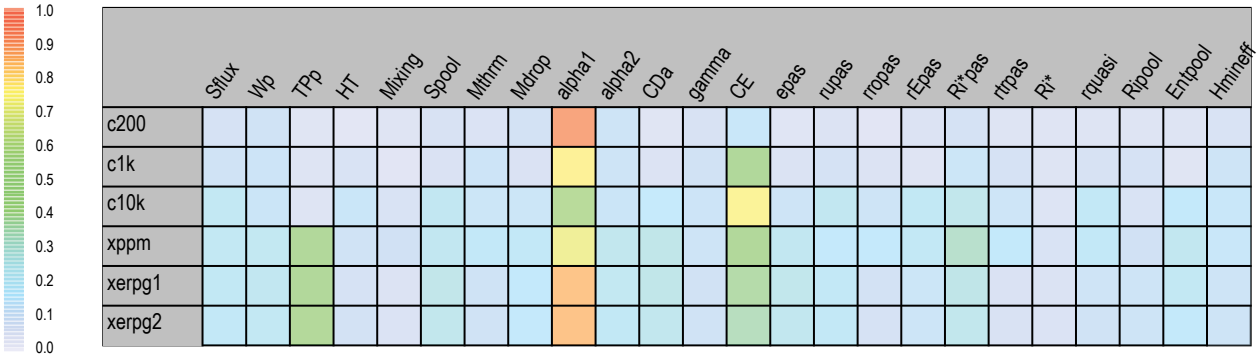
Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
c200	8404.93	483507.70	57820.00	54824.21	52.22	7	0	0
c1k	4292.06	217460.00	34994.08	34086.81	49.15	7	0	0
c10k	2401.03	65644.75	18191.75	17699.19	42.13	7	0	0
xppm	0.00	67.05	0.72	0.00	557.04	7	19229	0
xerpg1	0.00	22.08	0.00	0.00	8326.32	7	19982	0
xerpg2	0.00	19.07	0.00	0.00	8461.36	7	19982	0

Scenario N2-9 (Nitrogen, high release rate, horizontal release near ground D5)

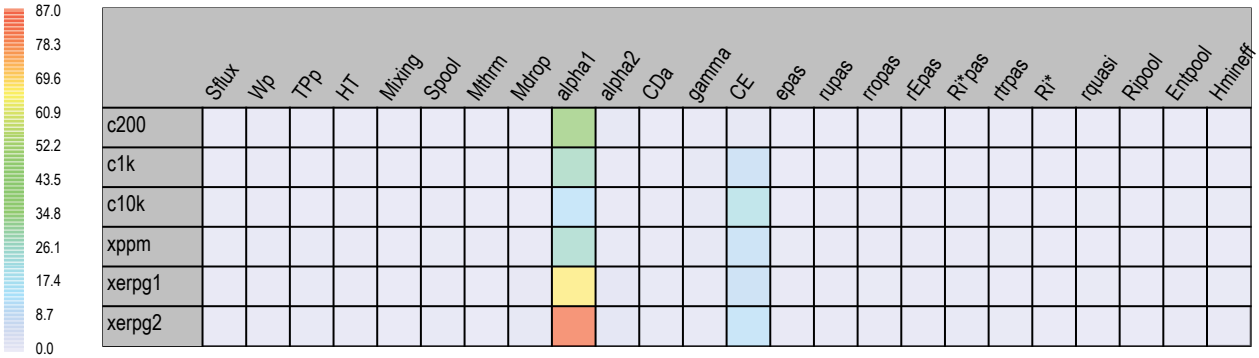
First order indices



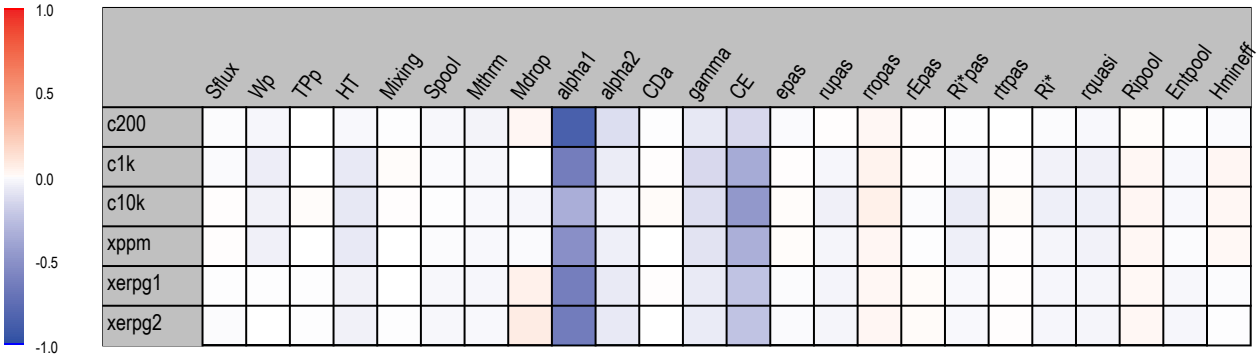
Total indices



Influence (CVSi)



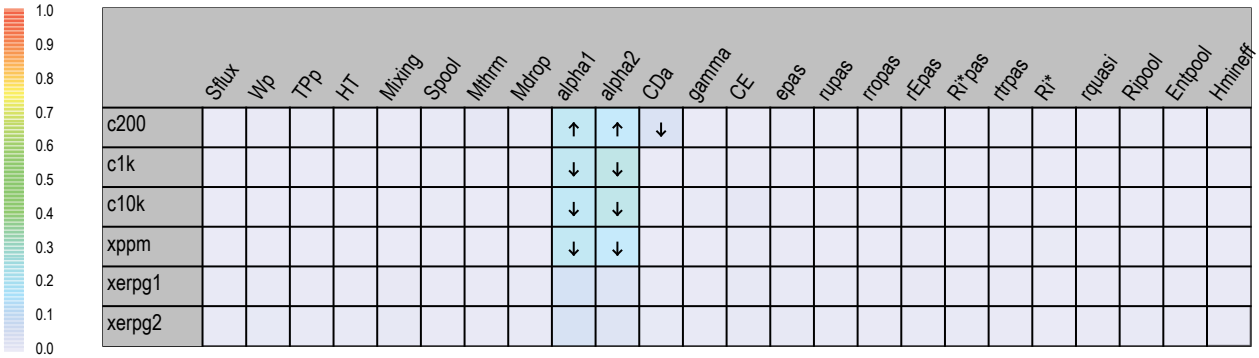
Correlation



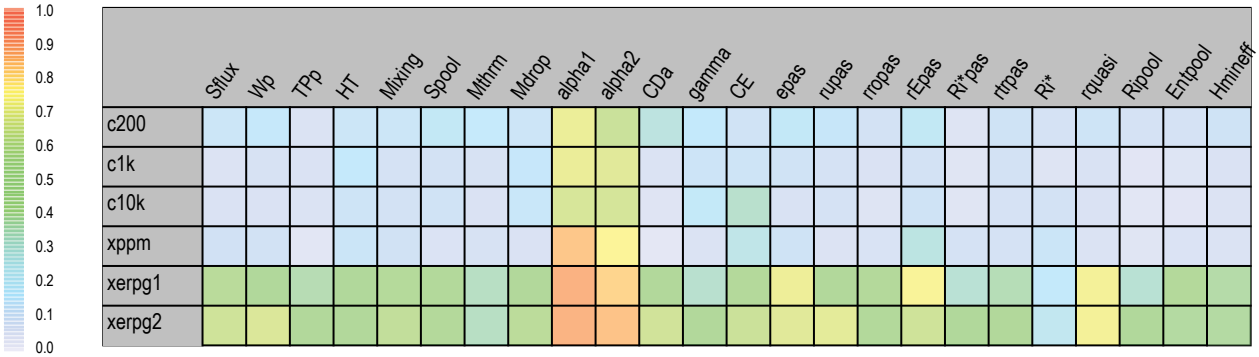
Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
c200	0.00	956778.10	345652.78	296503.10	46.96	9	2	0
c1k	1623.16	879168.60	166129.95	138272.70	58.63	9	0	0
c10k	2918.32	797281.60	70510.31	56726.77	78.37	9	0	0
xppm	0.28	1752.52	53.93	48.37	66.57	9	0	0
xerpg1	0.00	722.06	14.69	10.61	113.10	9	2759	0
xerpg2	0.00	622.95	10.86	7.96	142.38	9	8050	0

Scenario N2-10 (Nitrogen, high release rate, horizontal elevated release D5)

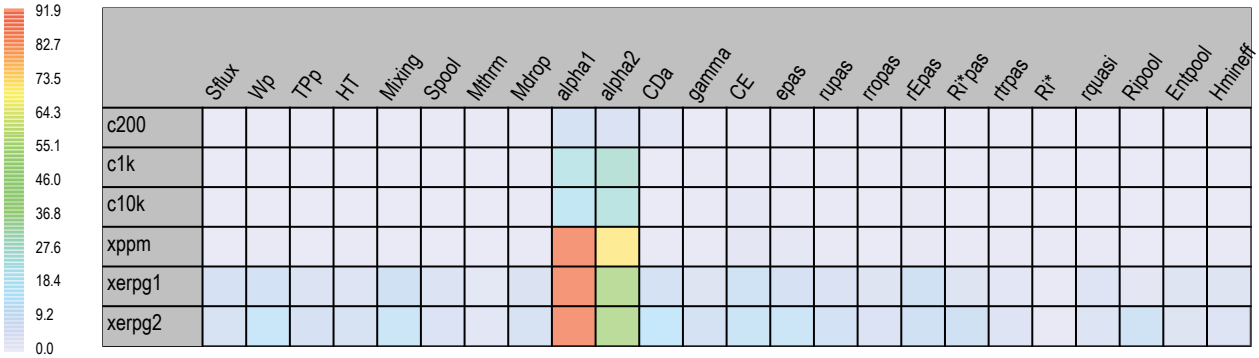
First order indices



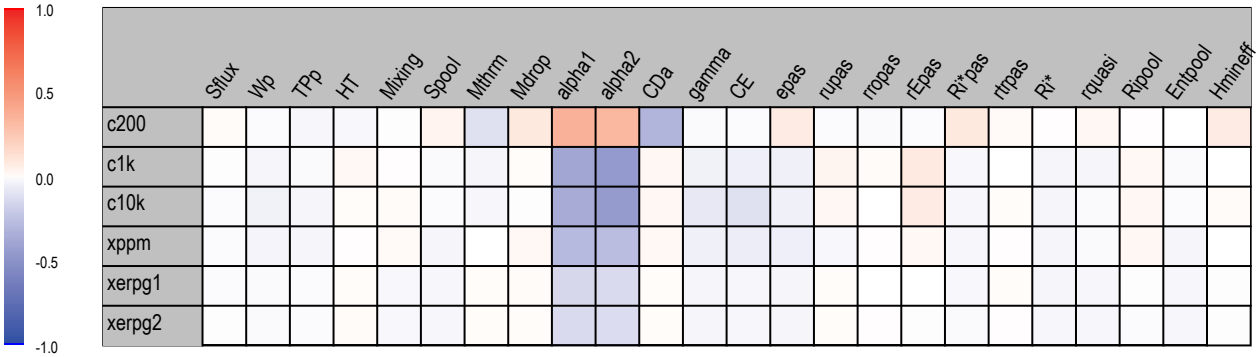
Total indices



Influence (CVSi)



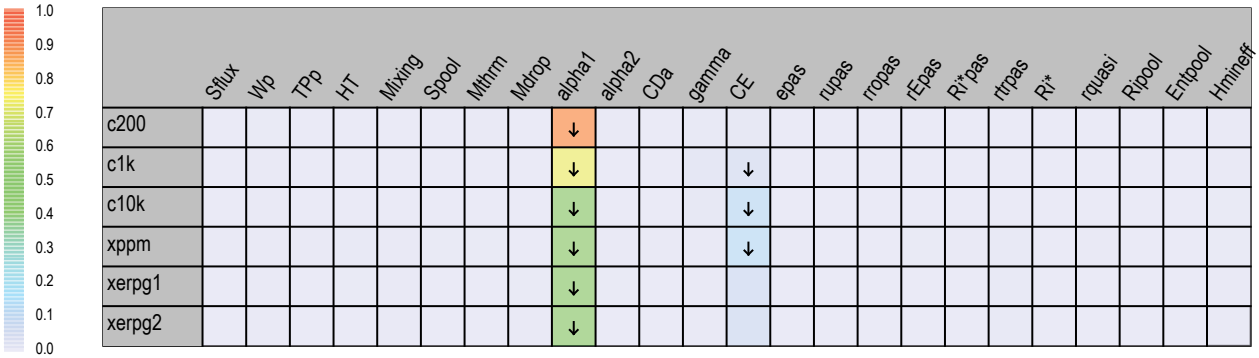
Correlation



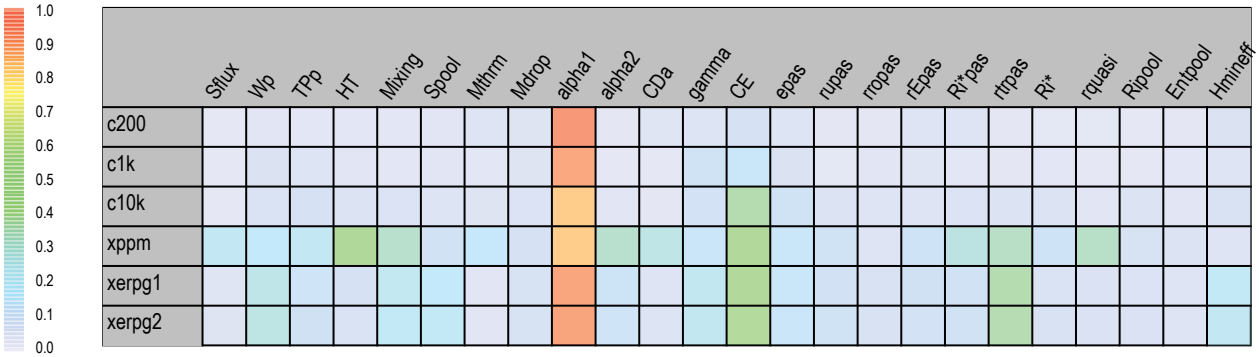
Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
c200	0.00	52865.39	23708.03	26388.14	39.89	443	417	0
c1k	13334.45	830160.40	52129.38	36978.40	107.45	442	0	0
c10k	0.00	615152.00	29204.58	22557.95	99.96	442	15	0
xppm	0.00	967.36	4.74	0.00	465.14	442	18253	0
xerpg1	0.00	221.33	0.54	0.00	1052.43	442	19345	0
xerpg2	0.00	126.03	0.40	0.00	1164.82	442	19390	0

Scenario N2-11 (Nitrogen, high release rate, horizontal release near ground F3)

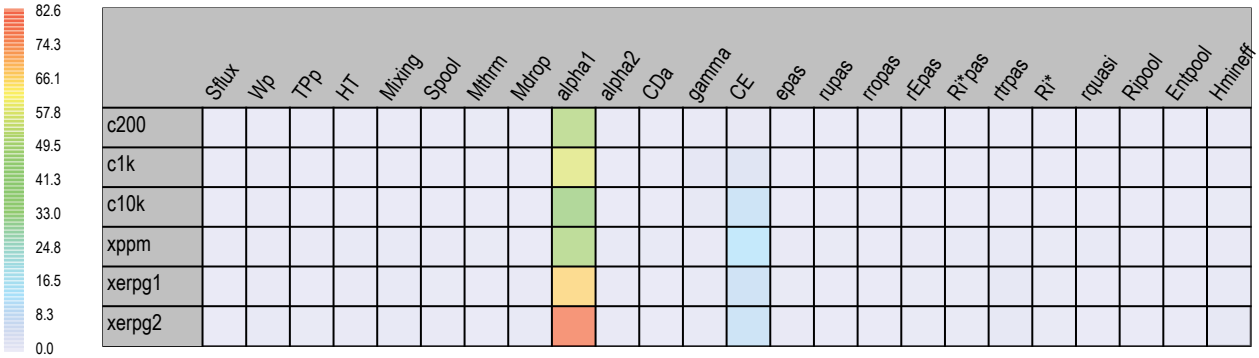
First order indices



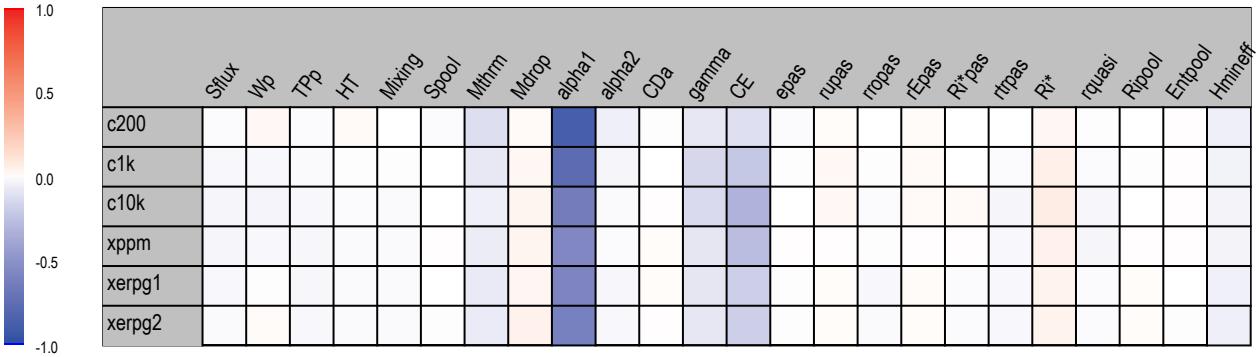
Total indices



Influence (CVSi)



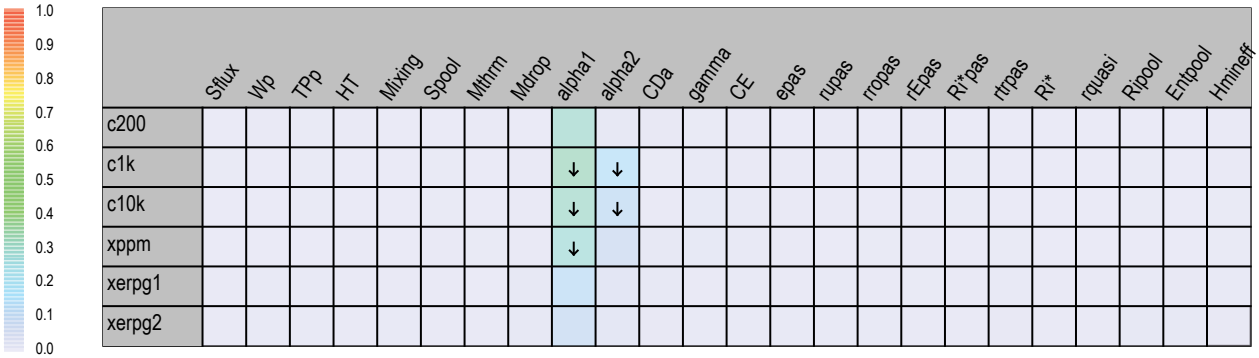
Correlation



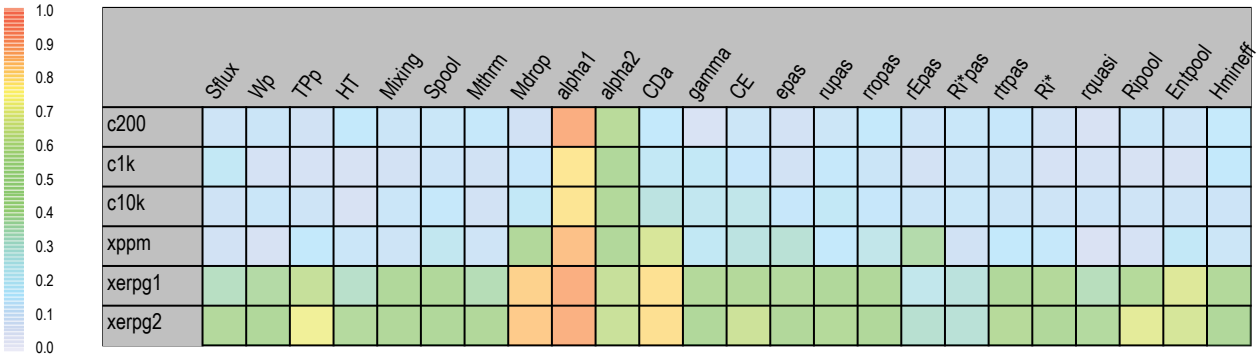
Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
c200	0.00	963888.00	333289.28	266162.30	57.06	6	1	0
c1k	8341.80	928740.70	176344.42	117790.20	79.87	6	0	0
c10k	5018.67	884756.40	96194.80	65461.18	88.85	6	0	0
xppm	0.07	2451.21	63.80	40.17	114.22	6	0	0
xerpg1	0.00	759.34	17.38	9.91	138.41	6	577	0
xerpg2	0.00	662.84	13.48	8.08	161.47	6	5779	0

Scenario N2-12 (Nitrogen, high release rate, horizontal elevated release F3)

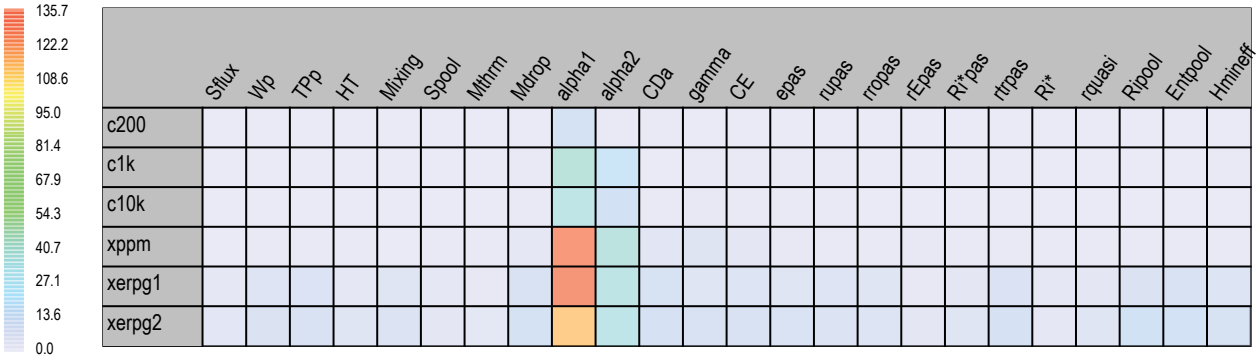
First order indices



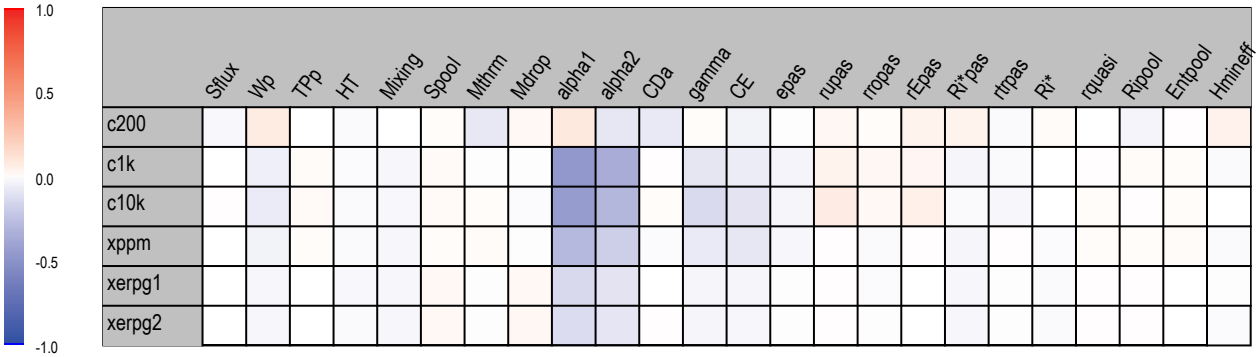
Total indices



Influence (CVSi)



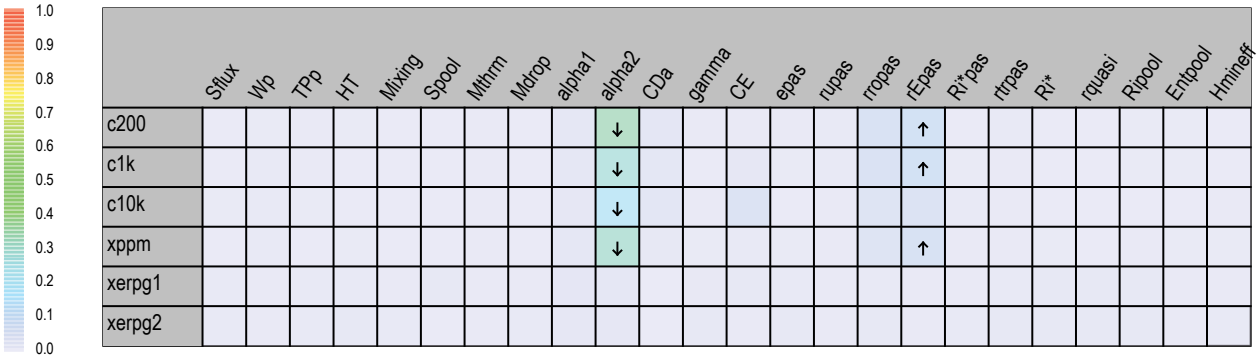
Correlation



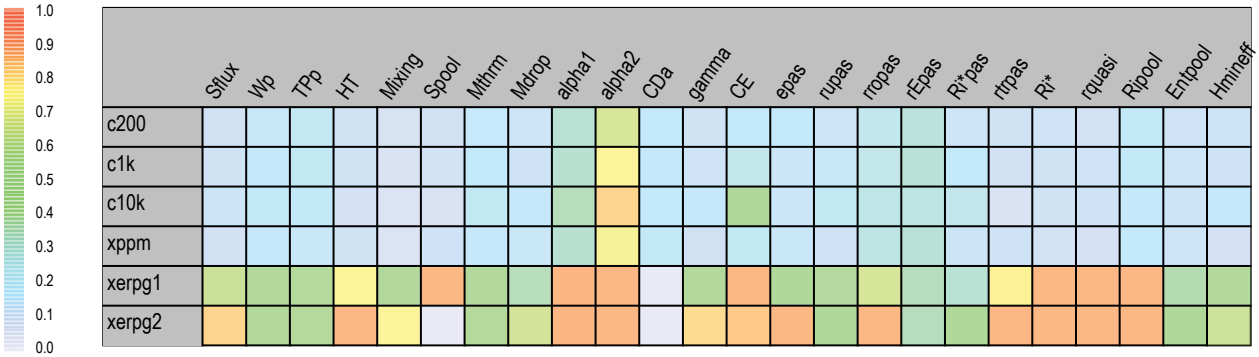
Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
c200	0.00	114199.50	47464.81	49268.88	40.22	167	676	0
c1k	0.00	1000000.00	57834.83	39192.79	122.36	166	3	0
c10k	0.00	751287.90	38764.33	27624.48	117.76	166	3	0
xppm	0.00	2769.80	10.01	0.00	484.66	166	17435	0
xerpg1	0.00	1317.73	1.24	0.00	1118.99	166	19404	0
xerpg2	0.00	1118.81	0.91	0.00	1240.54	166	19504	0

Scenario N2-13 (Nitrogen, high release rate, vertical release near ground D5)

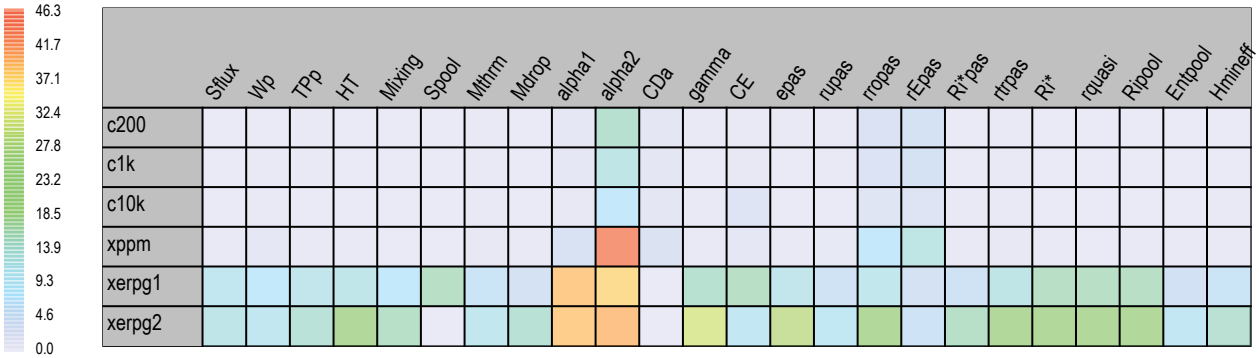
First order indices



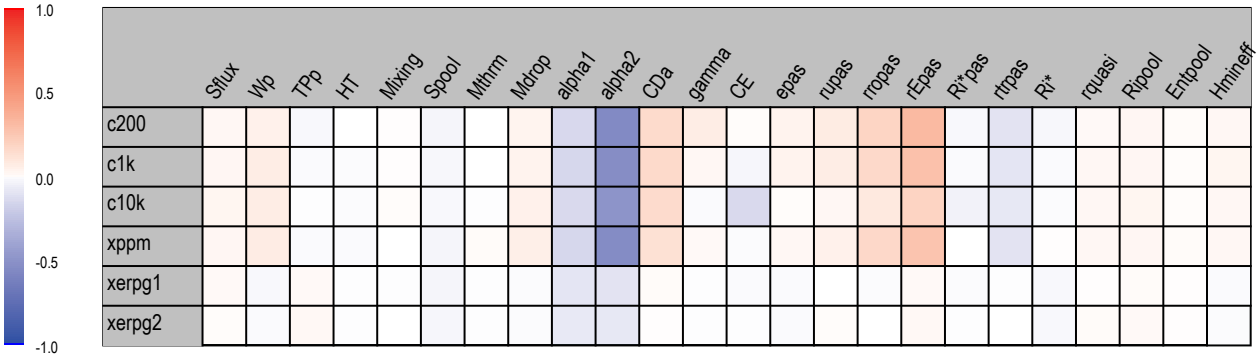
Total indices



Influence (CVSi)



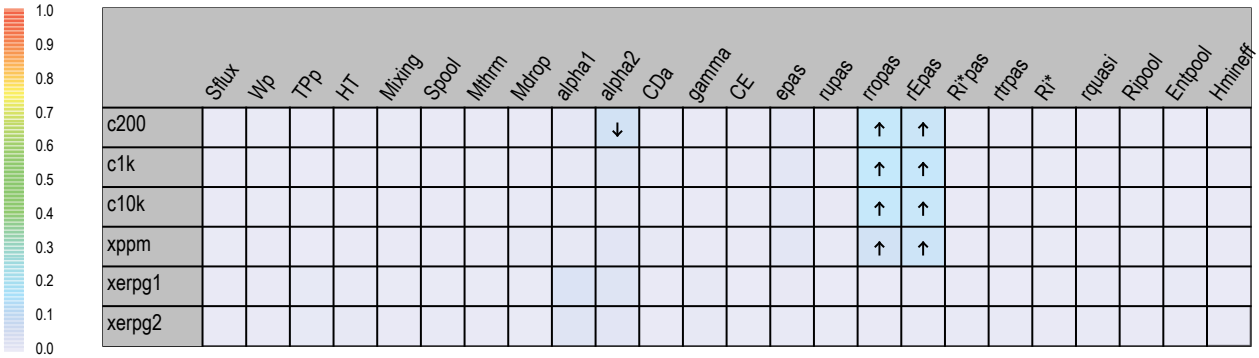
Correlation



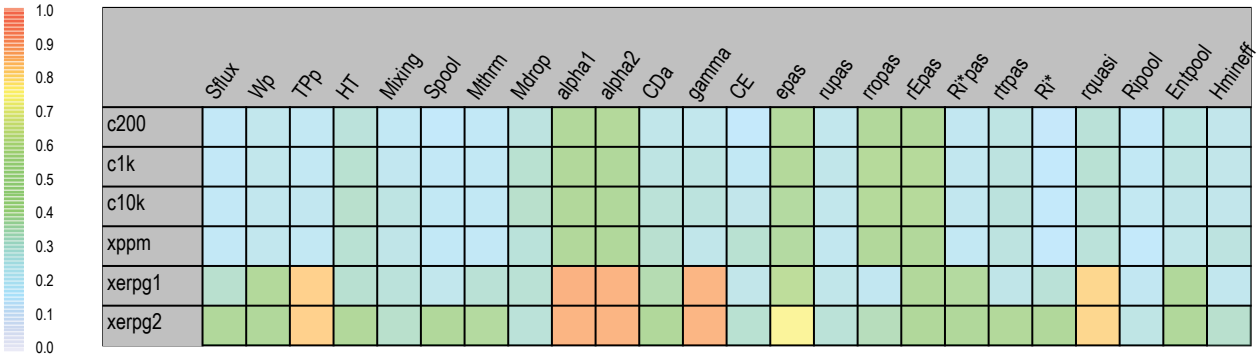
Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
c200	38091.34	662837.70	128711.59	118502.90	44.03	56	0	0
c1k	12825.38	607380.20	76544.37	72031.61	43.98	56	0	0
c10k	10676.44	501876.90	38685.82	36323.13	40.33	56	0	0
xppm	0.00	330.97	11.48	0.00	159.40	56	12903	0
xerpg1	0.00	121.70	0.12	0.00	1593.55	56	19834	0
xerpg2	0.00	100.82	0.06	0.00	2107.97	56	19873	0

Scenario N2-15 (Nitrogen, high release rate, vertical release near ground F3)

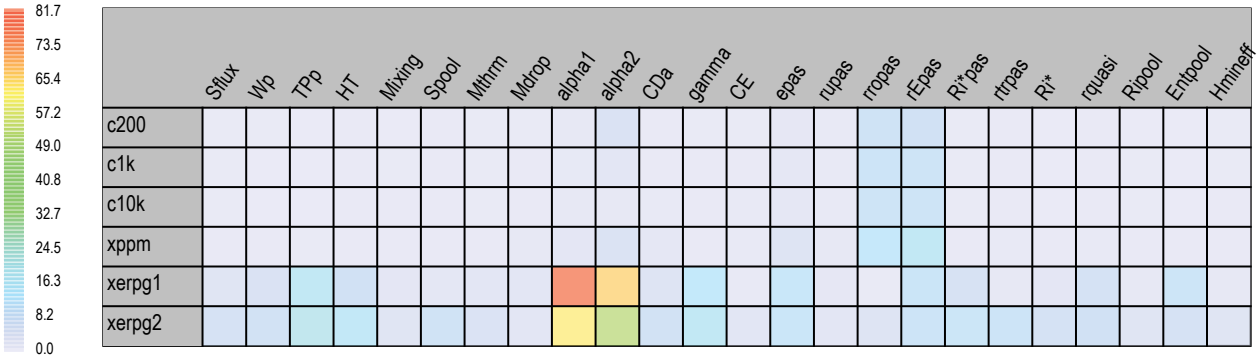
First order indices



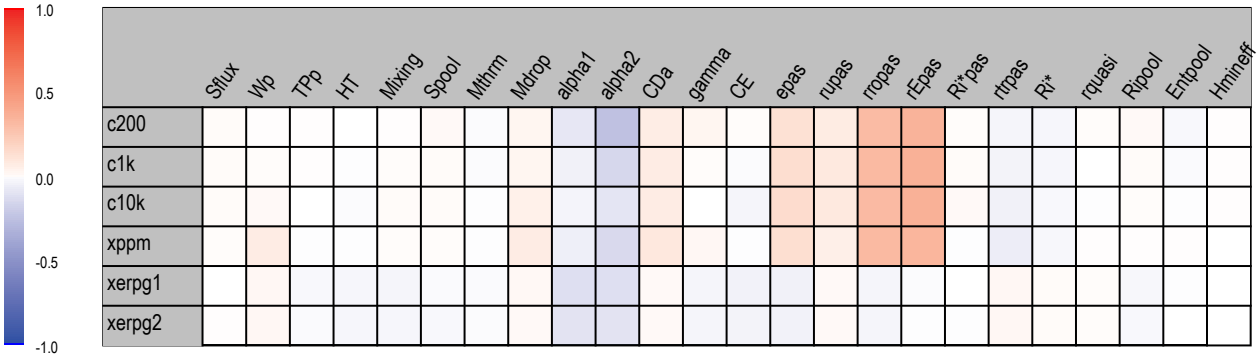
Total indices



Influence (CVSi)



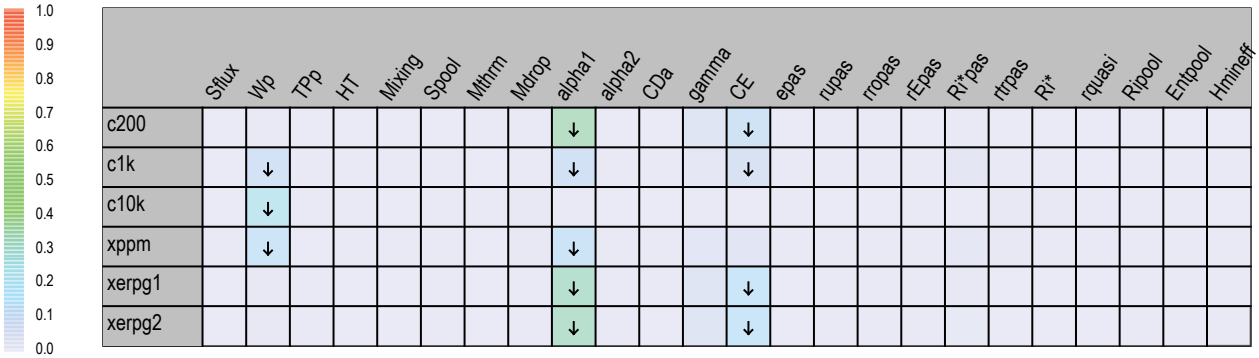
Correlation



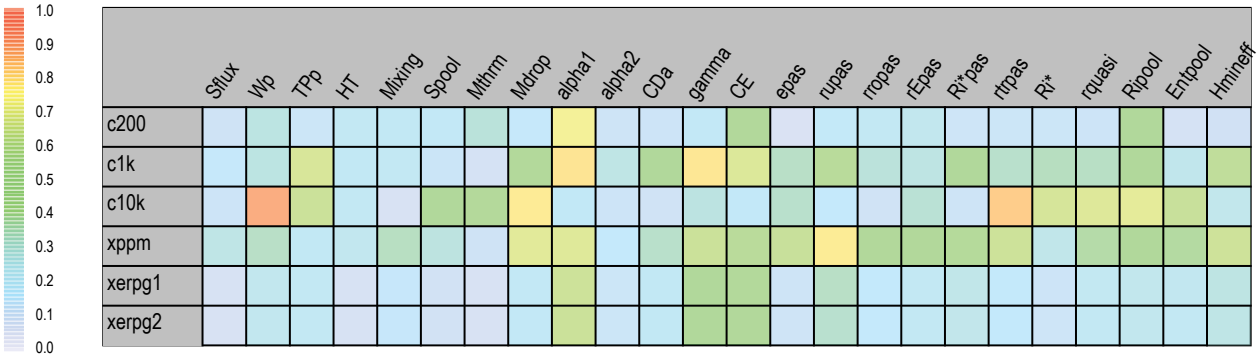
Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
c200	27923.54	765512.30	147826.17	134394.50	60.16	93	0	0
c1k	17806.00	654094.80	114604.84	97629.53	64.88	93	0	0
c10k	10828.46	600114.60	82421.69	69982.18	64.92	93	0	0
xppm	0.00	931.98	39.78	15.94	129.40	93	8367	0
xerpg1	0.00	186.24	0.30	0.00	1330.37	93	19673	0
xerpg2	0.00	162.60	0.20	0.00	1536.61	93	19732	0

Scenario NH3-1 (Ammonia, low release rate, horizontal release near ground D5)

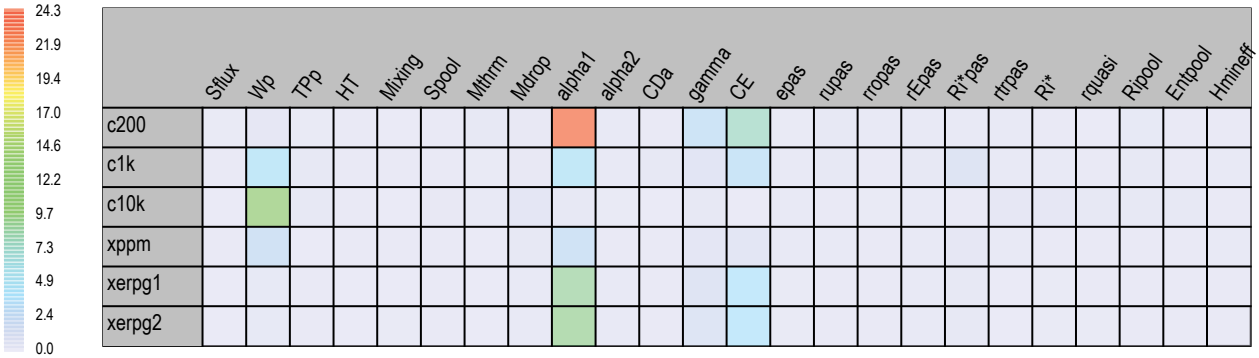
First order indices



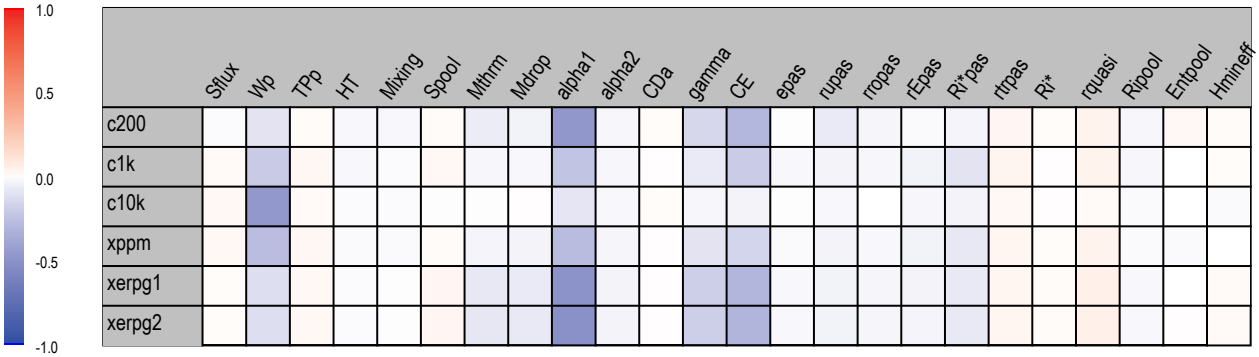
Total indices



Influence (CVSi)



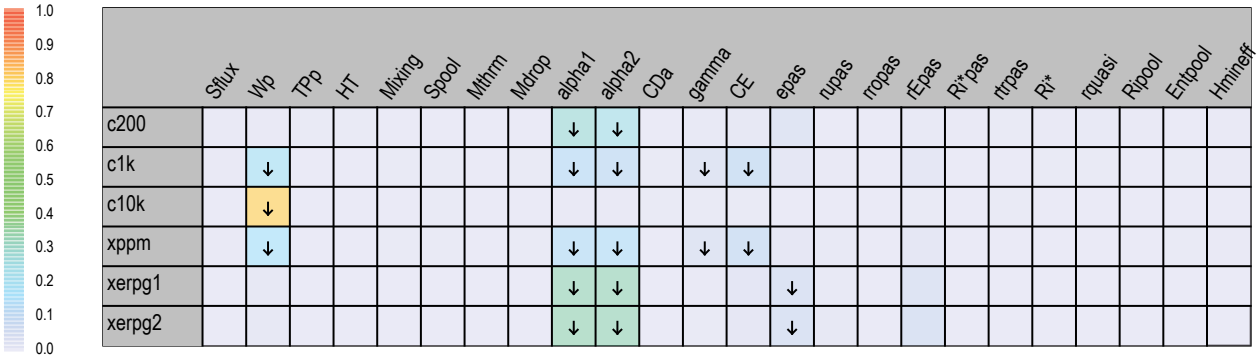
Correlation



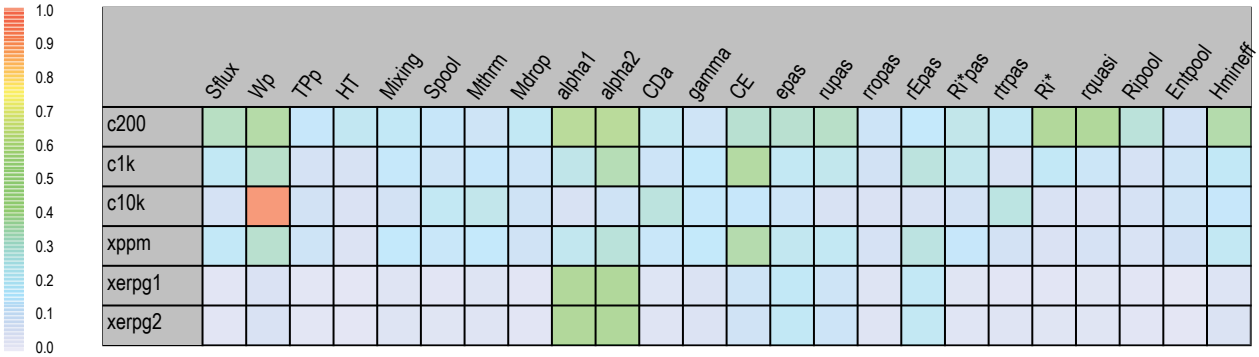
Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
c200	114.53	151280.00	6306.47	5124.70	72.53	3	0	0
c1k	22.89	7604.30	416.47	397.63	45.83	3	0	0
c10k	0.66	378.77	10.42	9.90	51.58	3	0	0
xppm	29.35	11058.00	1083.85	1073.90	20.50	3	0	0
xerpg1	0.95	2257.20	277.18	264.45	27.84	3	0	0
xerpg2	0.86	2095.10	265.85	253.36	28.29	3	0	0

Scenario NH3-2 (Ammonia, low release rate, horizontal elevated release D5)

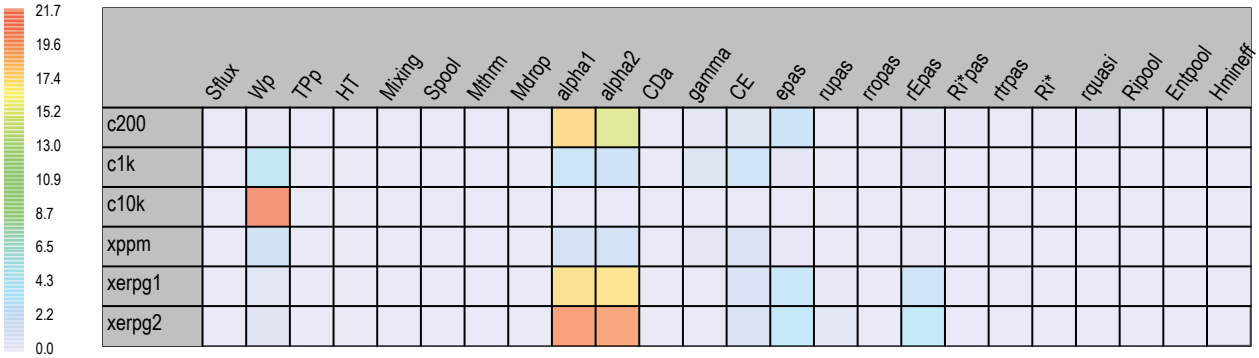
First order indices



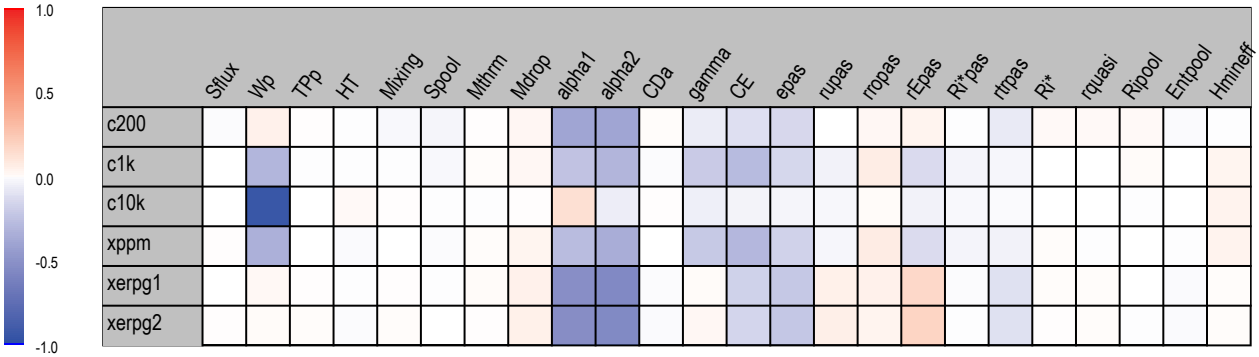
Total indices



Influence (CVSi)



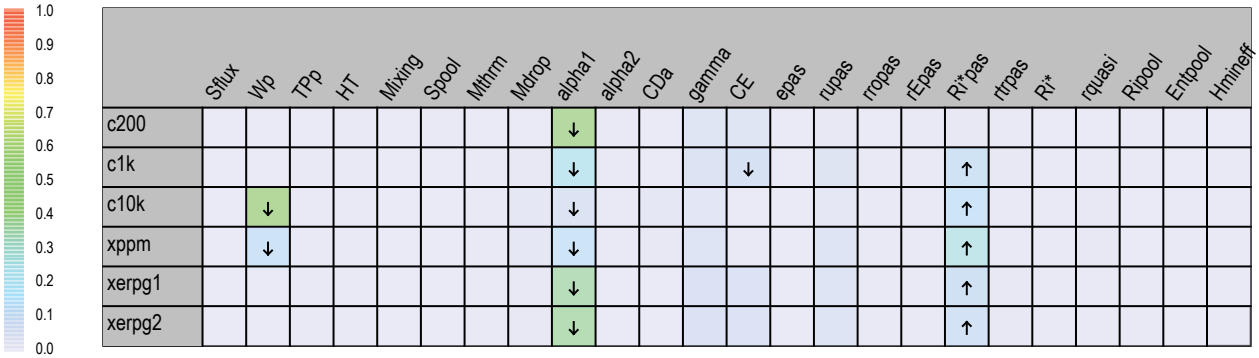
Correlation



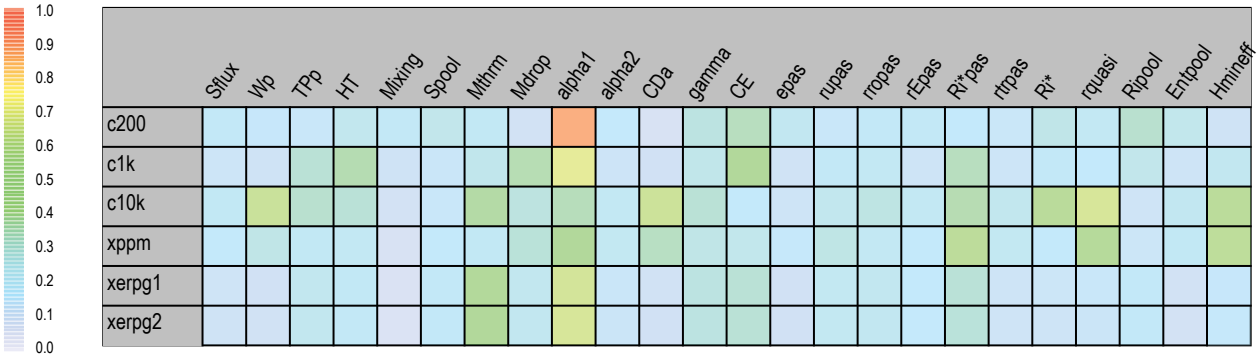
Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
c200	1066.15	71107.00	2827.04	2438.90	66.48	4	0	0
c1k	157.38	2250.90	315.40	306.52	24.04	4	0	0
c10k	6.43	50.15	9.73	11.46	27.19	4	0	0
xppm	553.72	3122.20	915.63	906.02	14.25	4	0	0
xerpg1	0.00	754.10	141.17	136.90	54.31	4	1300	0
xerpg2	0.00	721.58	126.56	125.12	63.00	4	2706	0

Scenario NH3-3 (Ammonia, low release rate, horizontal release near ground F3)

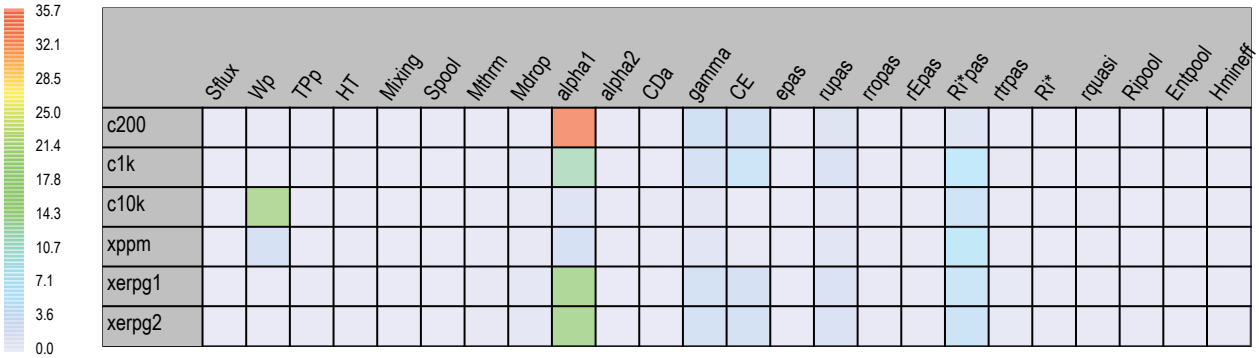
First order indices



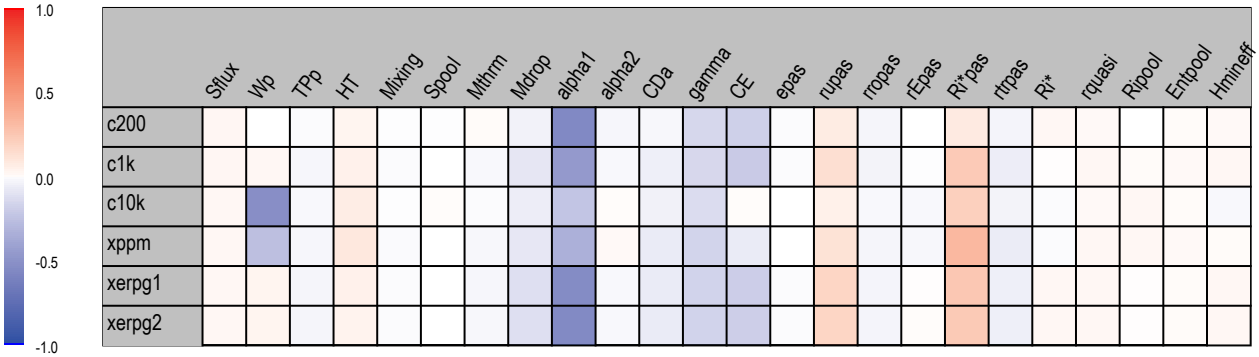
Total indices



Influence (CVSi)



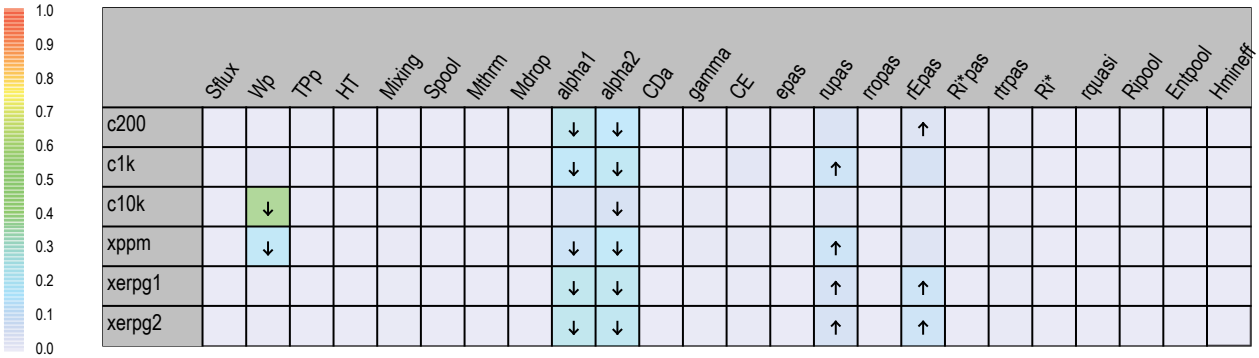
Correlation



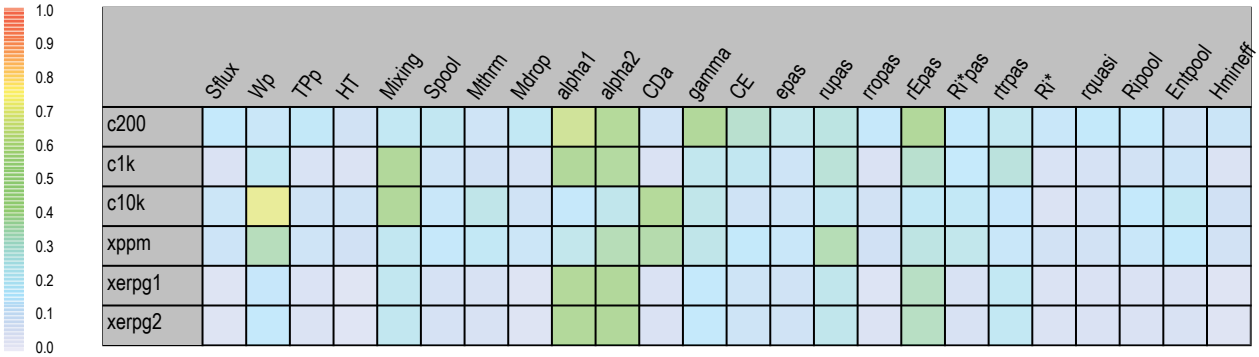
Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
c200	2.85	189080.00	11289.89	8563.05	91.21	8	0	0
c1k	6.71	43162.00	2204.11	2077.00	54.02	8	0	0
c10k	0.82	1463.70	113.79	109.99	31.74	8	0	0
xppm	16.91	36587.00	4149.57	4278.45	25.12	8	0	0
xerpg1	1.57	8215.30	634.18	614.90	46.67	8	0	0
xerpg2	1.45	8099.90	595.29	572.92	47.98	8	0	0

Scenario NH3-4 (Ammonia, low release rate, horizontal elevated release F3)

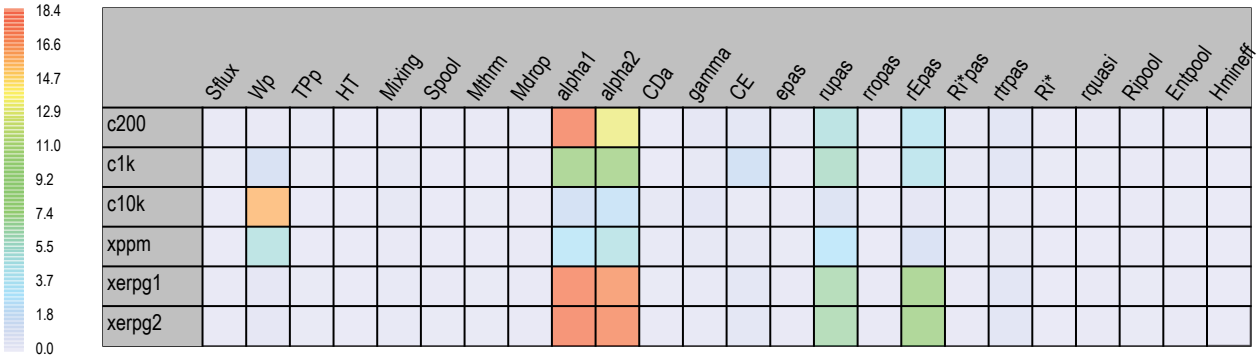
First order indices



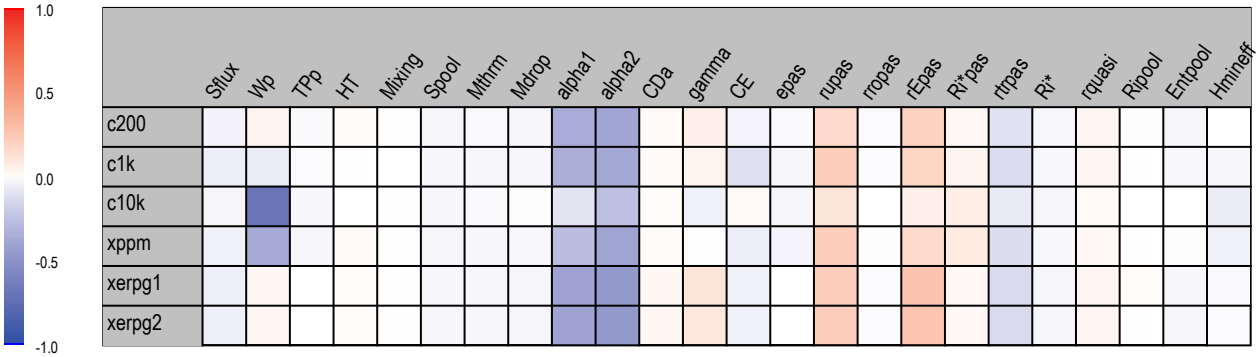
Total indices



Influence (CVSi)



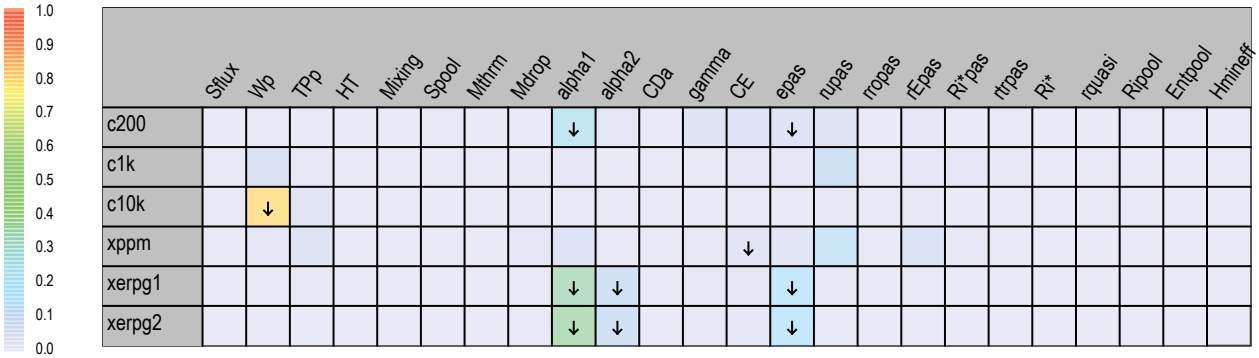
Correlation



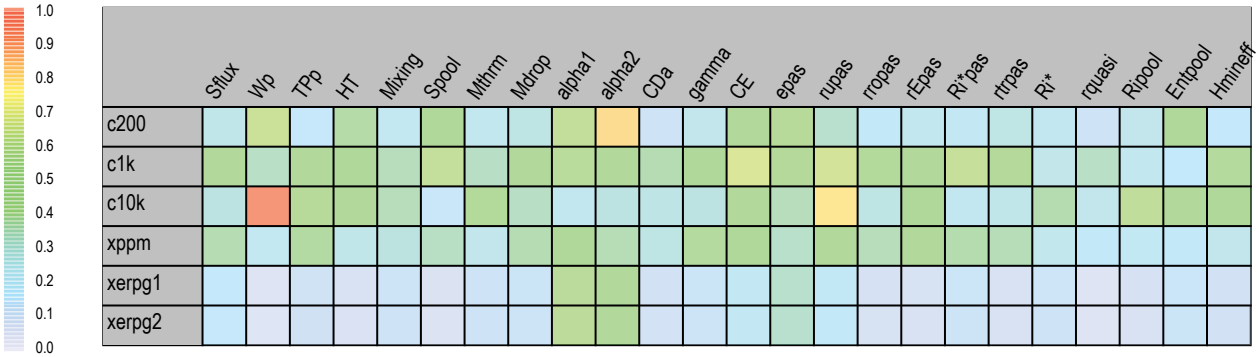
Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
c200	1049.70	127060.00	4480.33	3601.50	83.73	6	0	0
c1k	207.51	35888.00	1291.23	1173.50	52.59	6	0	0
c10k	7.14	980.98	91.79	90.51	30.72	6	0	0
xppm	633.82	23787.00	3207.10	3185.65	26.91	6	0	0
xerpg1	39.36	5569.80	287.98	223.58	77.71	6	0	0
xerpg2	37.51	5382.60	263.83	195.99	80.09	6	0	0

Scenario NH3-18 (Ammonia, low release rate, horizontal elevated release A3)

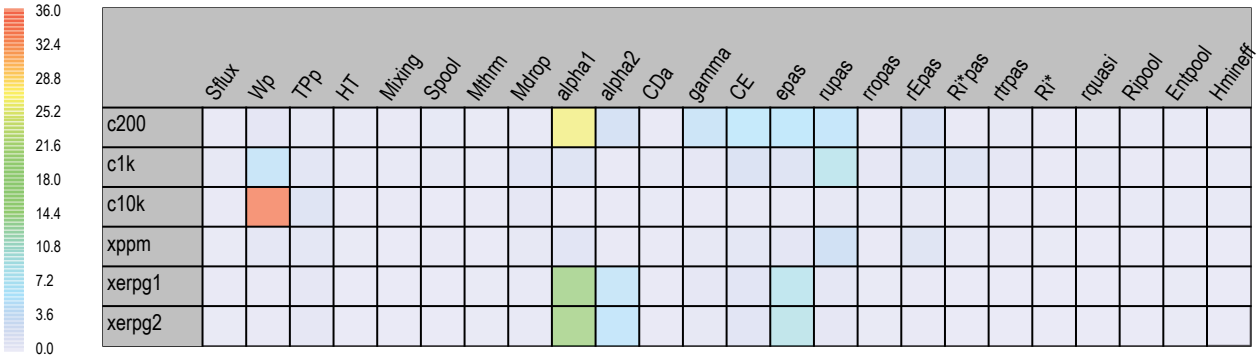
First order indices



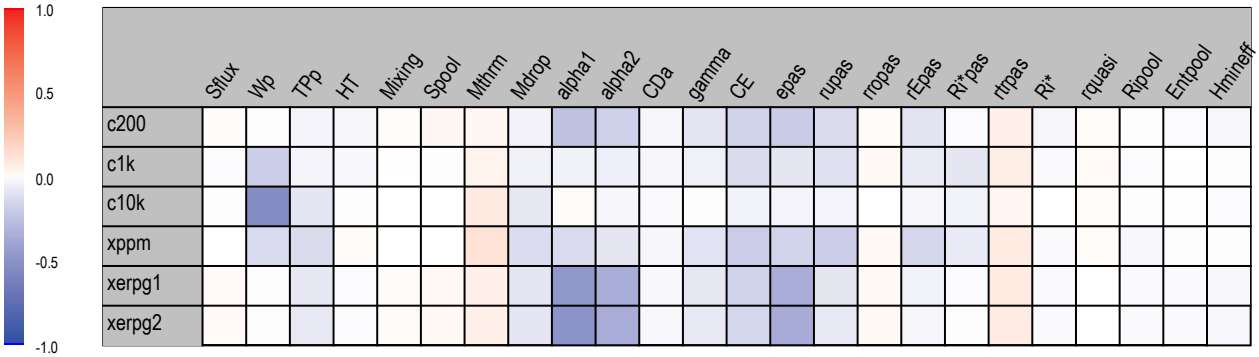
Total indices



Influence (CVSi)



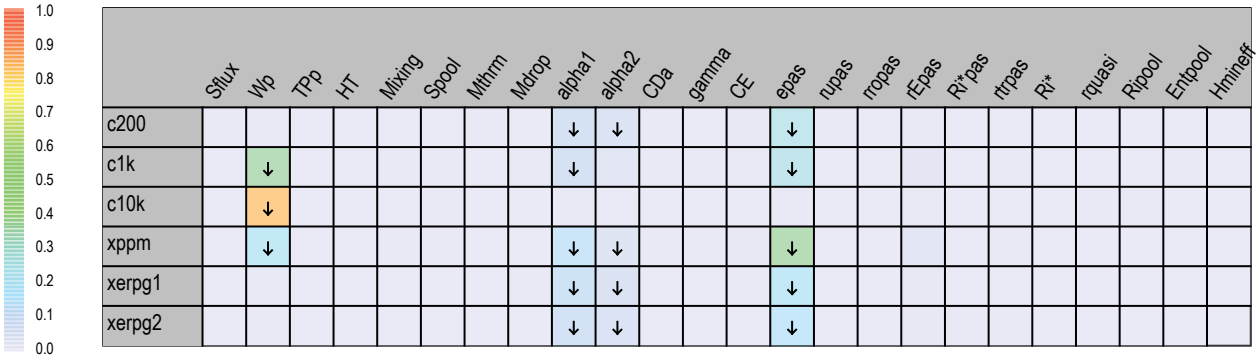
Correlation



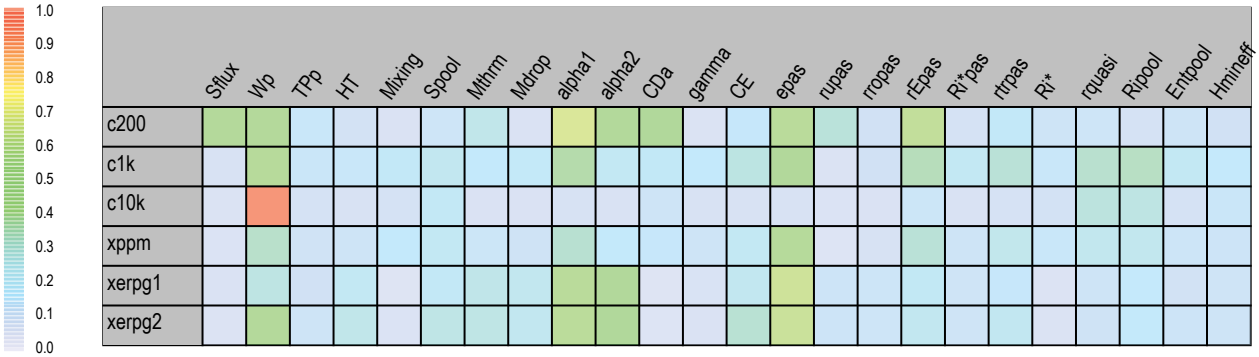
Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
c200	545.77	73203.91	1442.53	1057.95	121.19	918	0	0
c1k	36.89	2526.14	61.33	58.97	84.63	918	0	0
c10k	0.83	27.84	1.22	1.50	45.49	918	0	0
xppm	266.40	2512.34	392.50	368.66	27.29	918	0	0
xerpg1	26.48	849.61	94.34	80.91	52.90	918	0	0
xerpg2	24.15	818.40	88.42	75.42	55.60	918	0	0

Scenario NH3-17 (Ammonia, low release rate, horizontal elevated release D9)

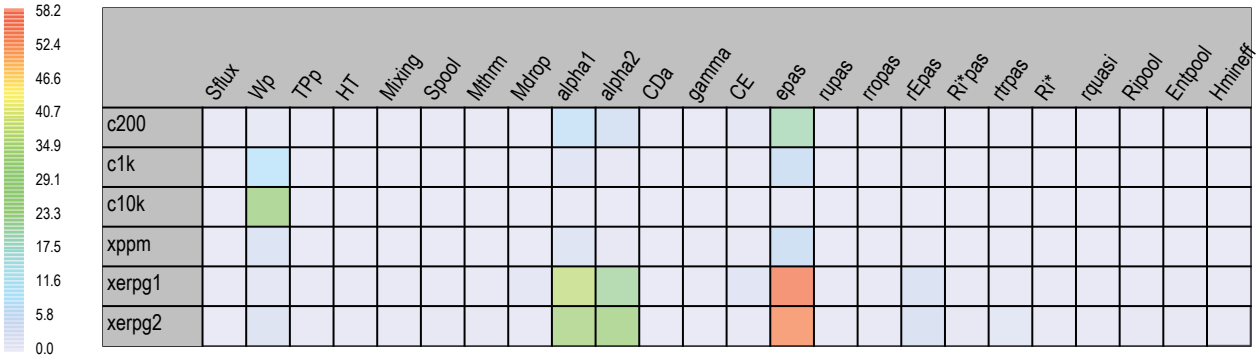
First order indices



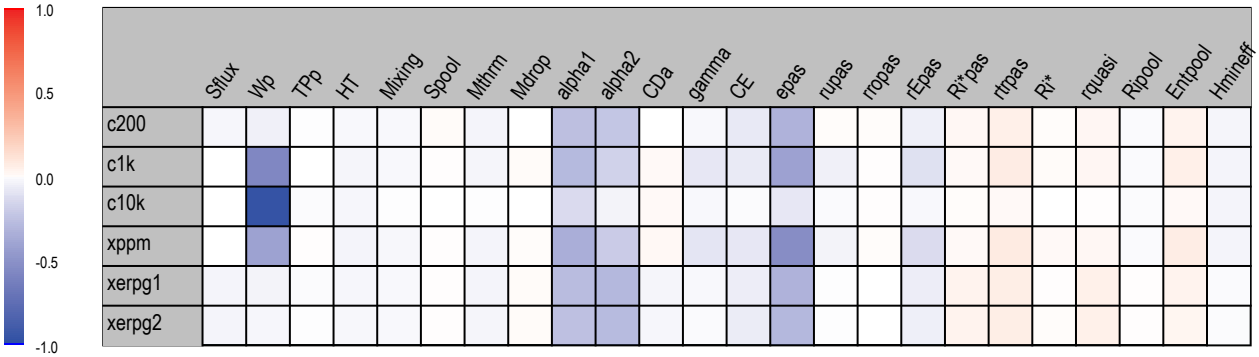
Total indices



Influence (CVSi)



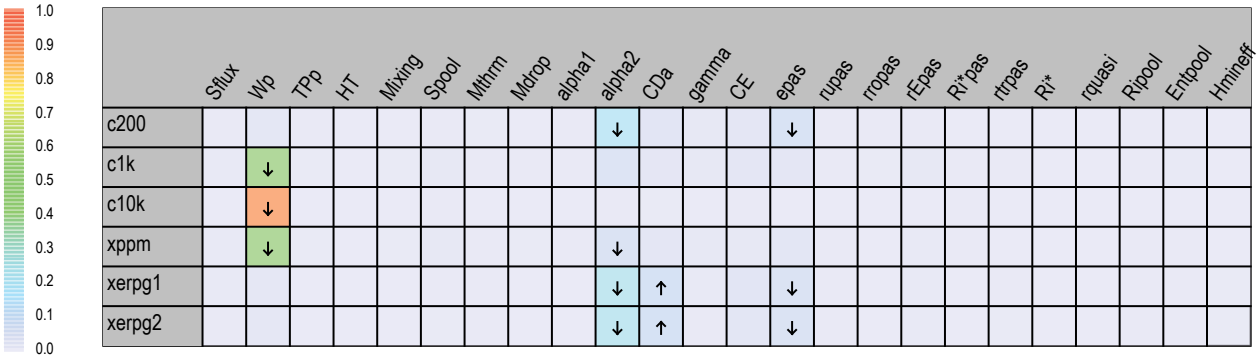
Correlation



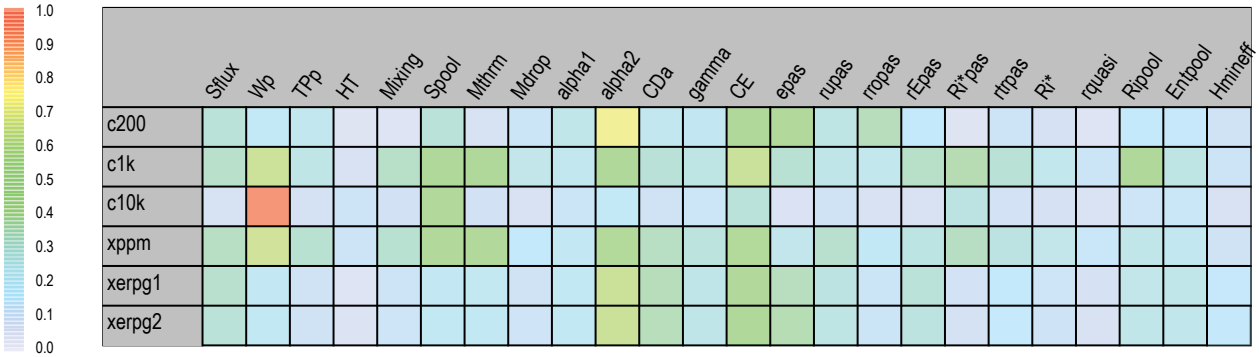
Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
c200	743.08	101791.20	1689.40	1427.41	82.82	5	0	0
c1k	94.18	691.18	148.68	149.38	24.14	5	0	0
c10k	2.96	25.62	4.60	5.54	30.14	5	0	0
xppm	388.70	1677.61	566.15	559.29	16.21	5	0	0
xerpg1	0.00	547.01	18.22	0.00	331.82	5	18200	0
xerpg2	0.00	527.27	14.92	0.00	371.15	5	18542	0

Scenario NH3-5 (Ammonia, low release rate, vertical release near ground D5)

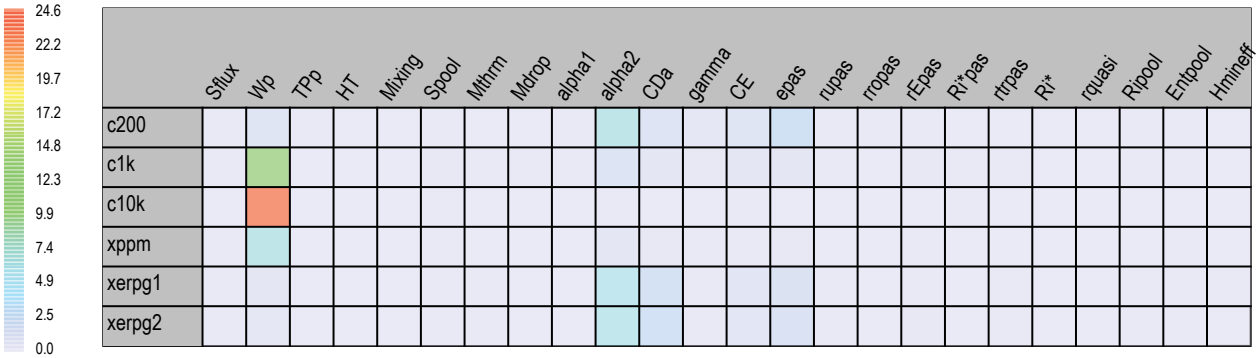
First order indices



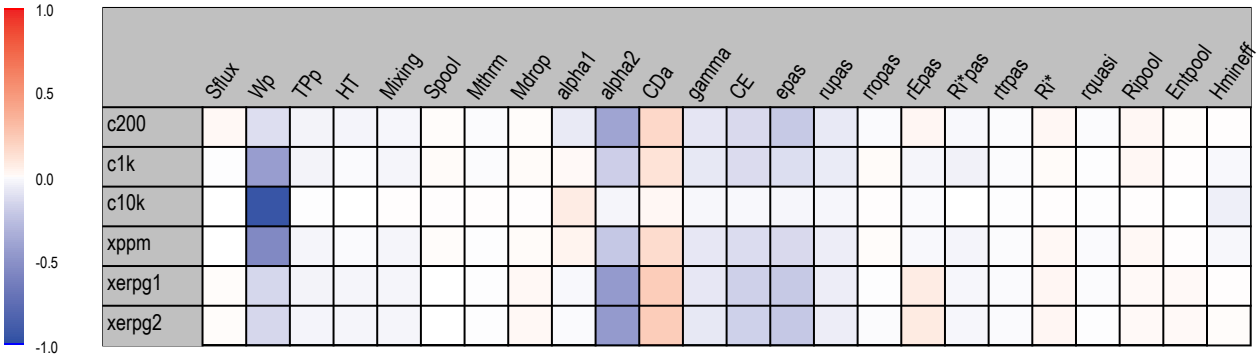
Total indices



Influence (CVSi)



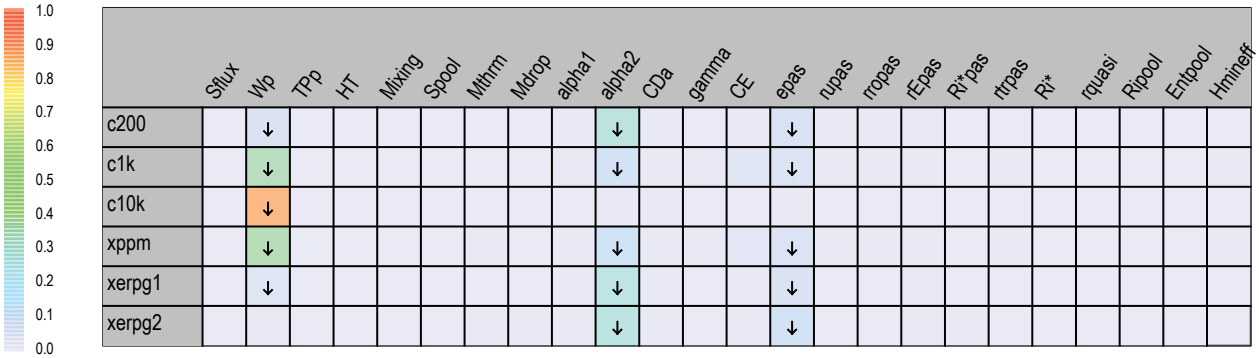
Correlation



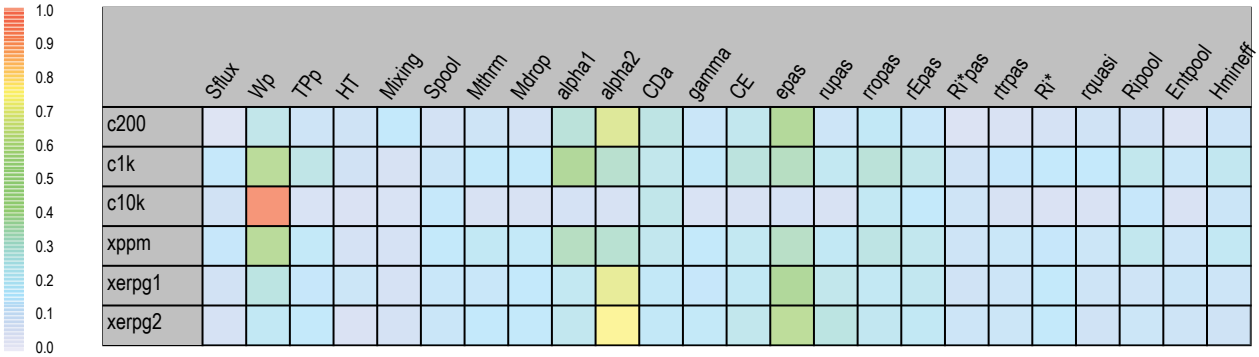
Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
c200	0.00	33195.22	2957.90	2778.54	34.24	9	3	0
c1k	190.17	2993.87	319.84	326.10	24.59	9	0	0
c10k	5.78	73.62	9.79	11.96	27.57	9	0	0
xppm	661.03	3553.69	930.07	944.32	12.29	9	0	0
xerpg1	0.00	917.56	172.06	166.17	25.63	9	35	0
xerpg2	0.00	873.71	161.49	156.00	26.78	9	52	0

Scenario NH3-6 (Ammonia, low release rate, vertical elevated release D5)

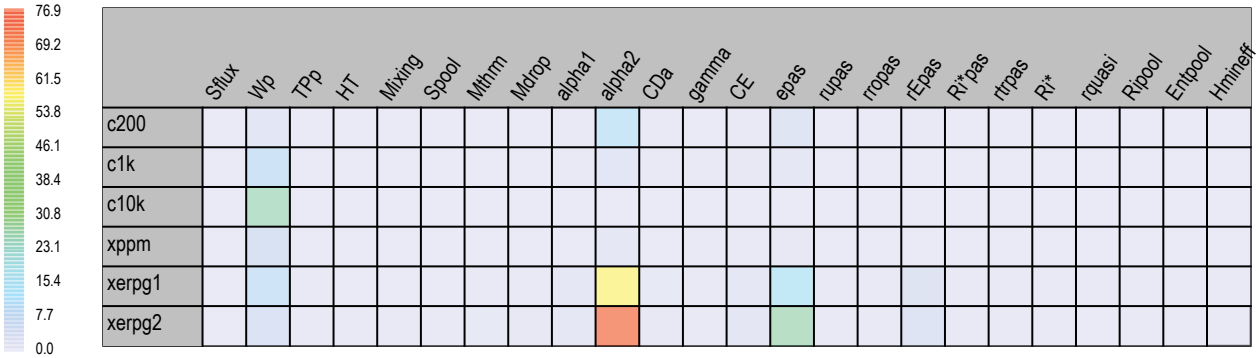
First order indices



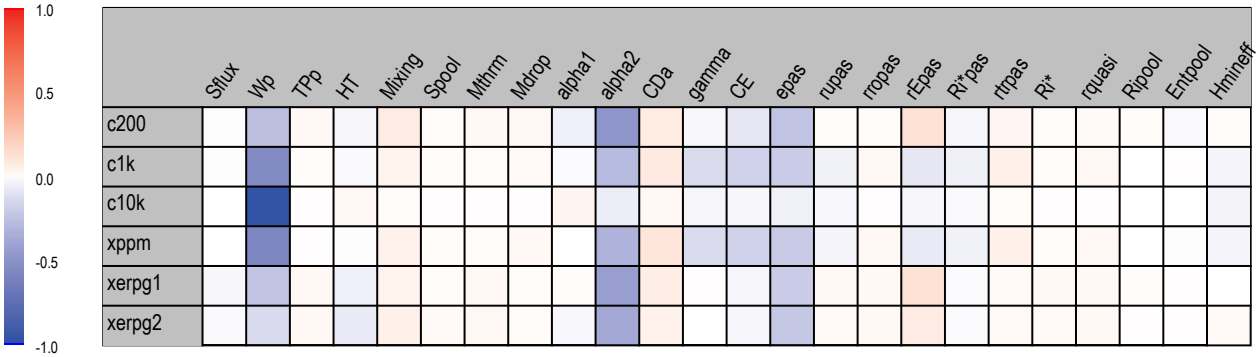
Total indices



Influence (CVSi)



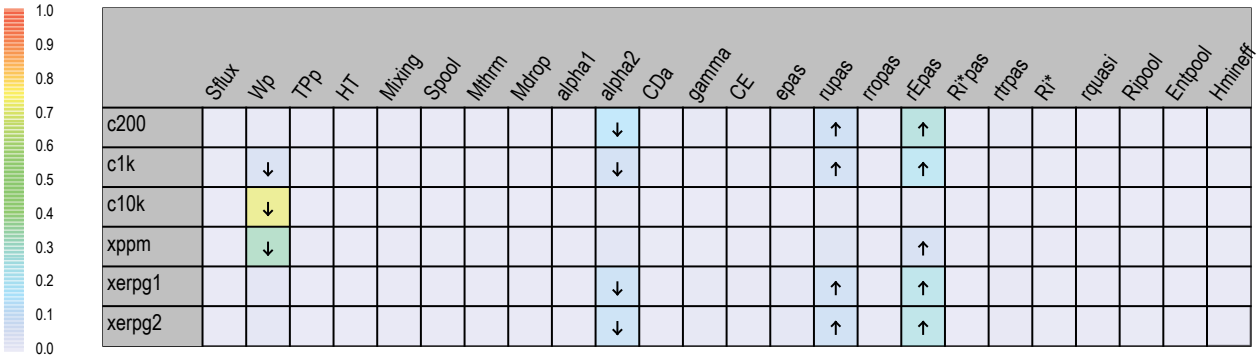
Correlation



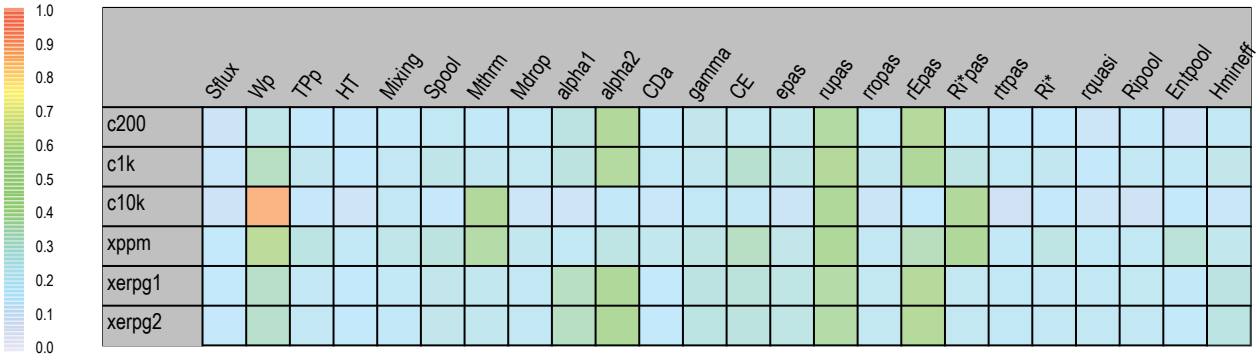
Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
c200	0.00	14979.67	2072.05	1907.98	38.92	9	3	0
c1k	154.02	1598.13	277.53	283.17	25.49	9	0	0
c10k	5.67	48.39	9.37	10.99	28.73	9	0	0
xppm	536.37	2900.69	835.45	850.63	16.36	9	0	0
xerpg1	0.00	651.74	34.38	0.00	218.79	9	16126	0
xerpg2	0.00	639.77	22.78	0.00	285.82	9	17537	0

Scenario NH3-7 (Ammonia, low release rate, vertical release near ground F3)

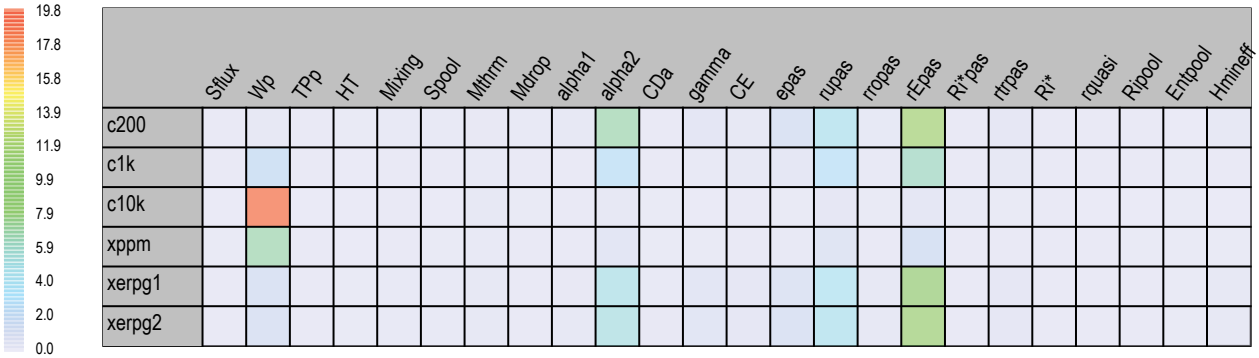
First order indices



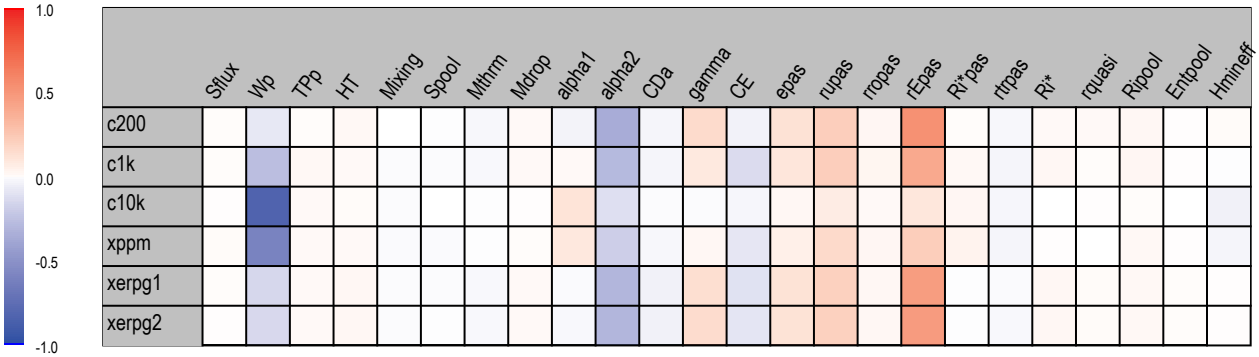
Total indices



Influence (CVSi)



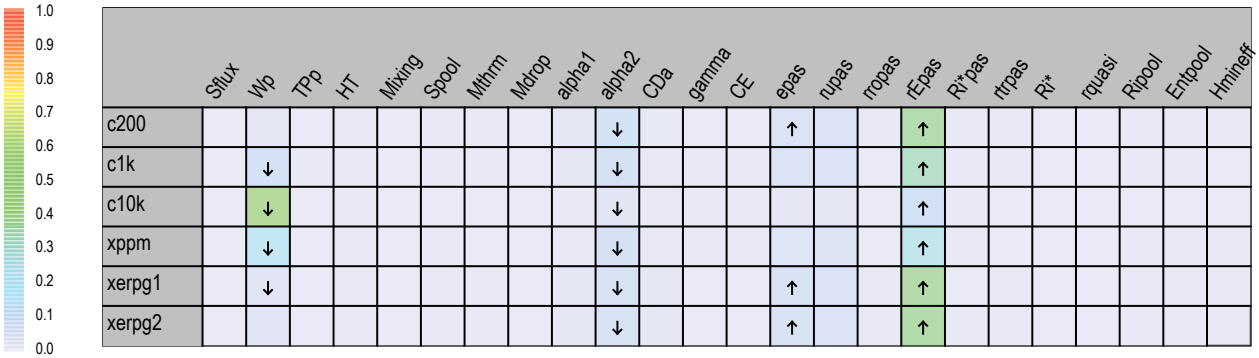
Correlation



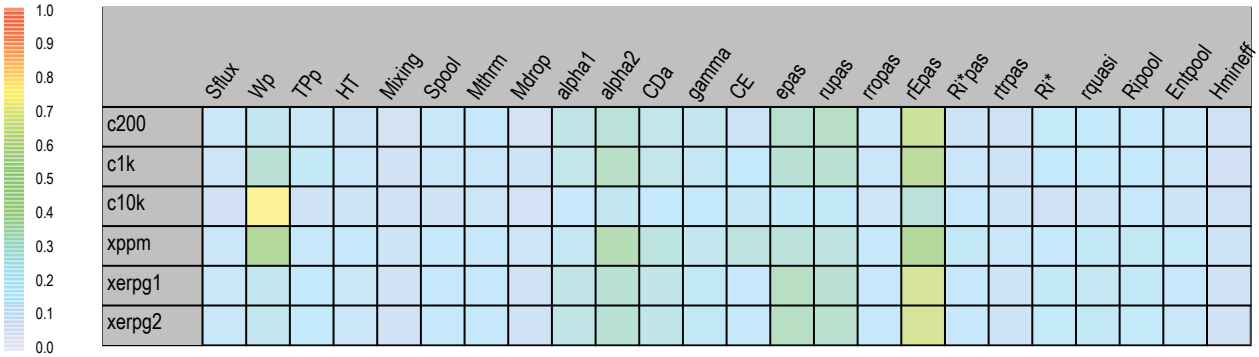
Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
c200	0.00	30898.22	7111.76	7345.90	43.03	18	3	0
c1k	244.97	7697.09	1755.63	1813.88	30.77	18	0	0
c10k	7.14	631.31	103.40	94.00	27.59	18	0	0
xppm	762.07	14979.71	3783.66	3705.18	20.77	18	0	0
xerpg1	0.00	3204.49	490.42	546.12	44.24	18	4	0
xerpg2	0.00	3020.49	455.67	509.57	45.49	18	9	0

Scenario NH3-8 (Ammonia, low release rate, vertical elevated release F3)

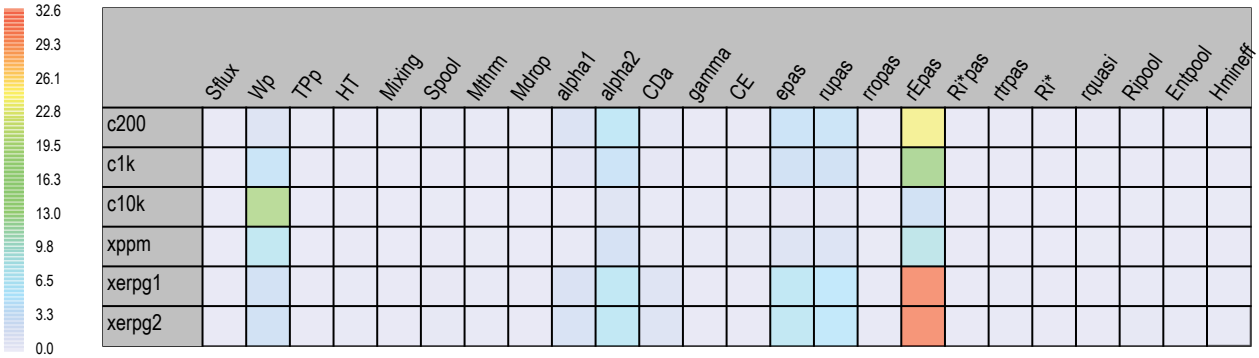
First order indices



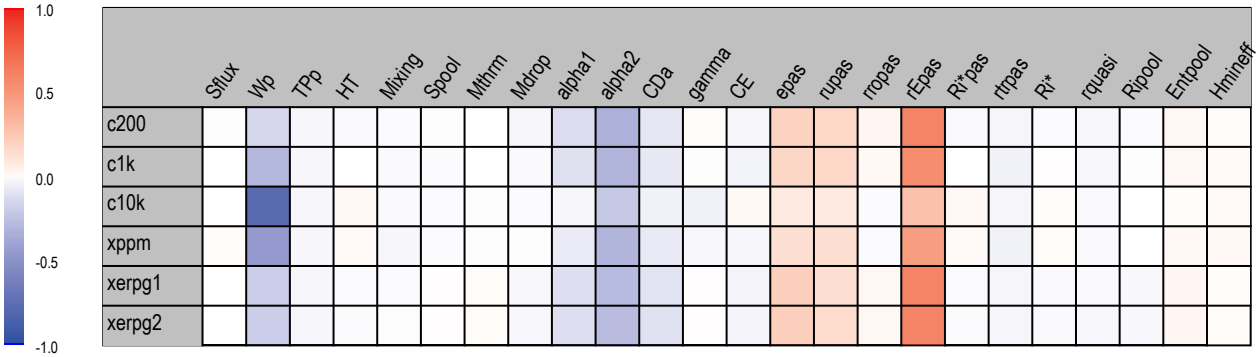
Total indices



Influence (CVSi)



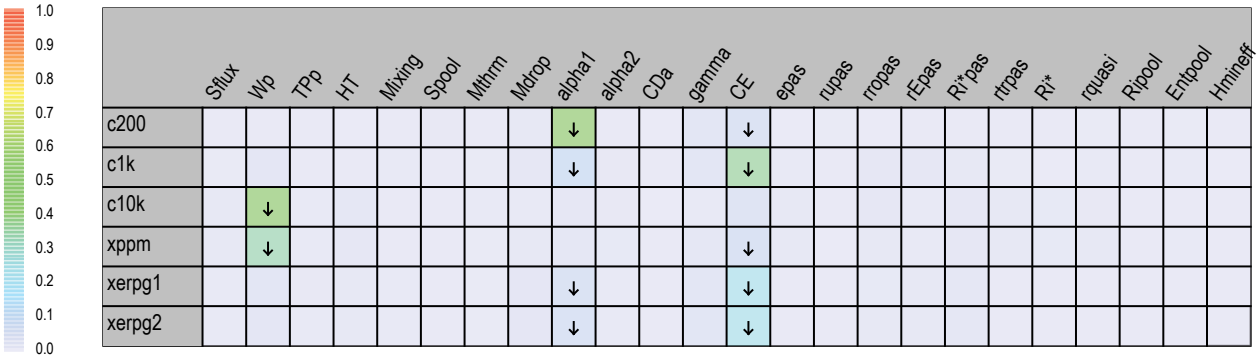
Correlation



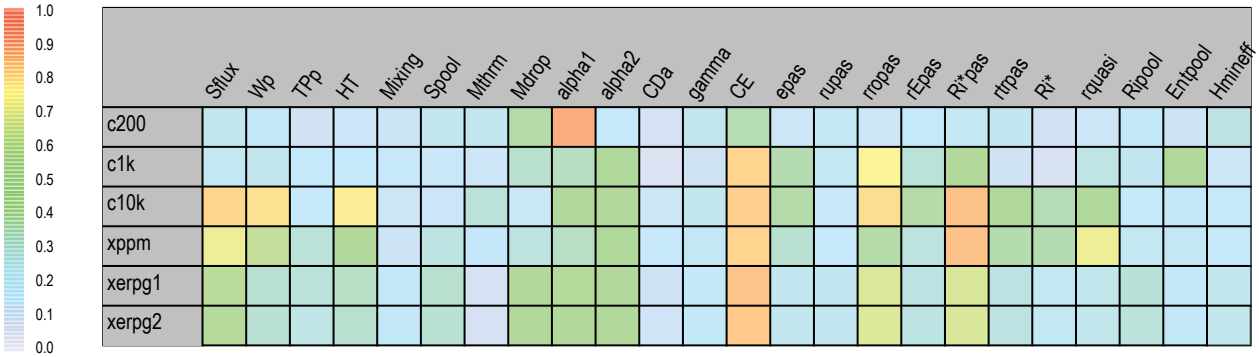
Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
c200	0.00	24989.29	5138.98	4905.81	64.79	15	8	0
c1k	0.00	6575.40	1362.57	1270.06	48.95	15	1	0
c10k	7.98	224.13	90.58	79.65	33.91	15	0	0
xppm	0.00	7372.15	3166.23	3056.83	33.38	15	1	0
xerpg1	0.00	1667.49	328.14	344.72	83.86	15	6017	0
xerpg2	0.00	1609.98	302.20	315.68	86.22	15	6480	0

Scenario NH3-9 (Ammonia, high release rate, horizontal release near ground D5)

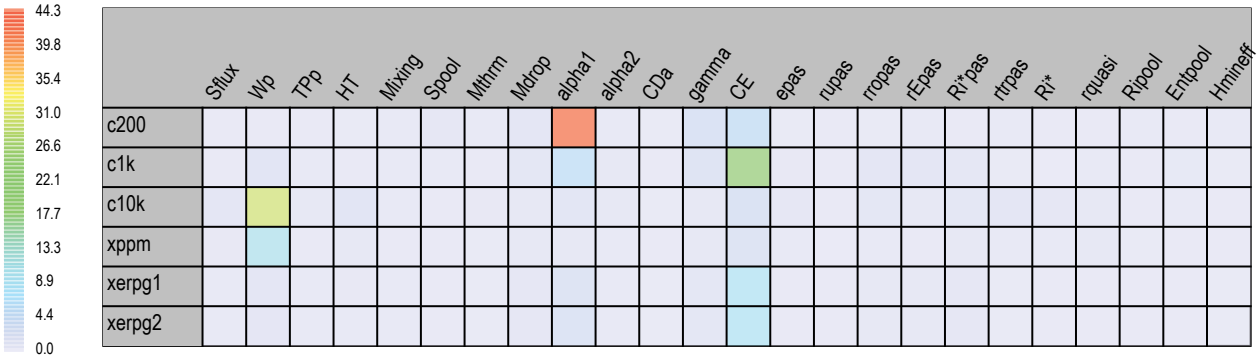
First order indices



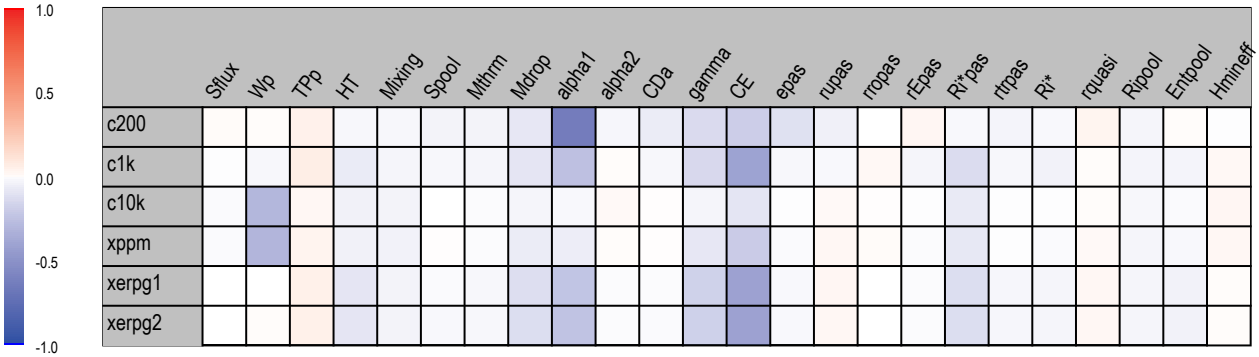
Total indices



Influence (CVSi)



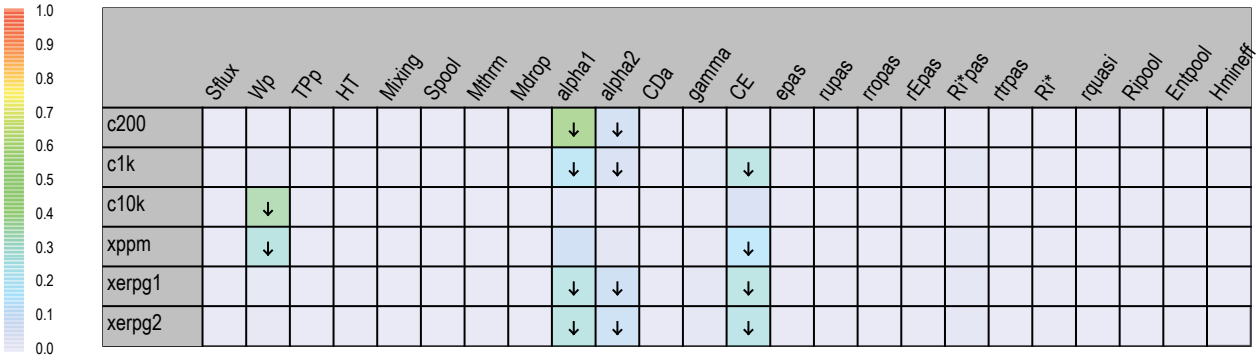
Correlation



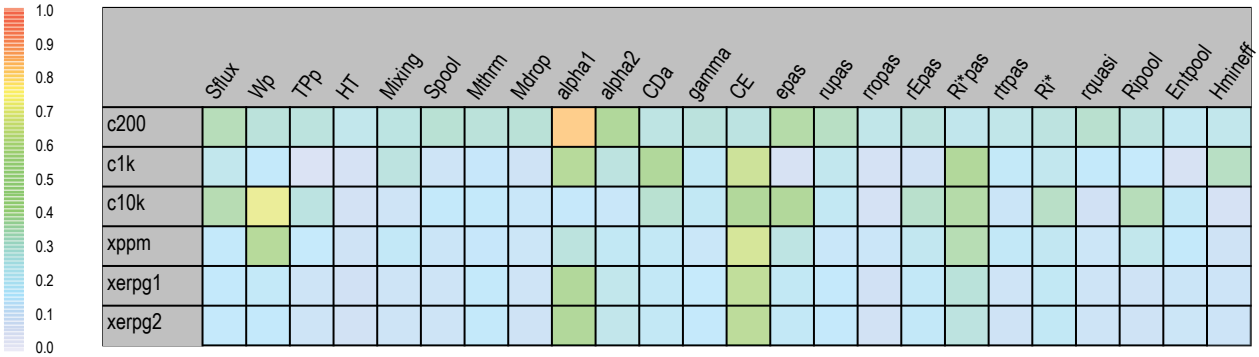
Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
c200	34.33	360620.00	32261.75	22962.00	86.32	4	0	0
c1k	6.76	79470.00	3574.95	3148.30	62.22	4	0	0
c10k	0.82	2547.30	103.32	97.11	67.22	4	0	0
xppm	38.85	50072.00	4303.85	4188.85	29.73	4	0	0
xerpg1	16.87	9387.30	996.48	949.02	36.95	4	0	0
xerpg2	15.44	9321.30	953.72	907.32	37.28	4	0	0

Scenario NH3-10 (Ammonia, high release rate, horizontal elevated release D5)

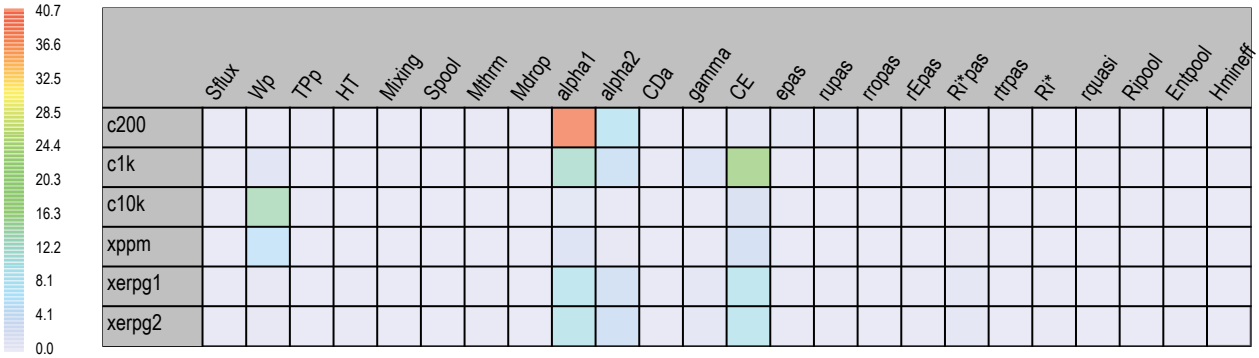
First order indices



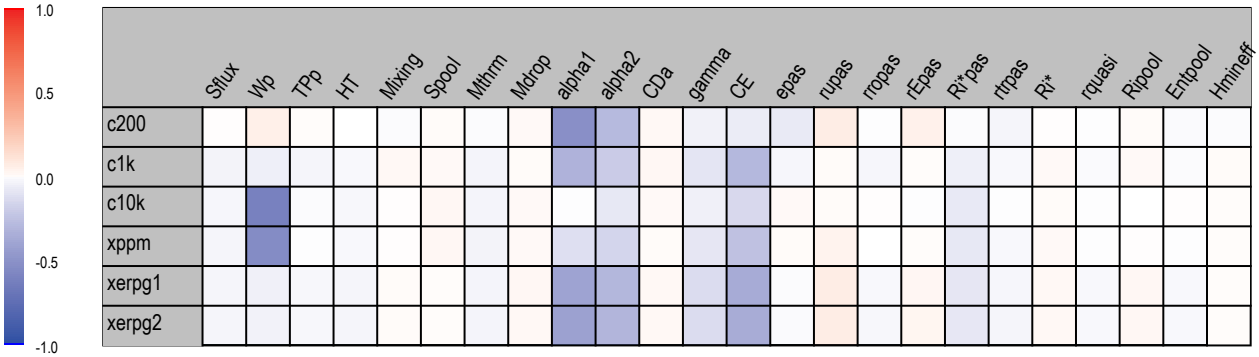
Total indices



Influence (CVSi)



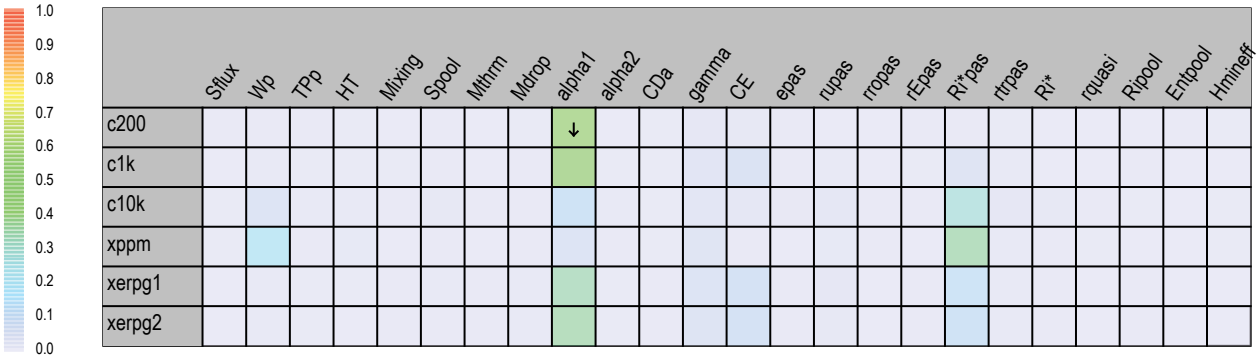
Correlation



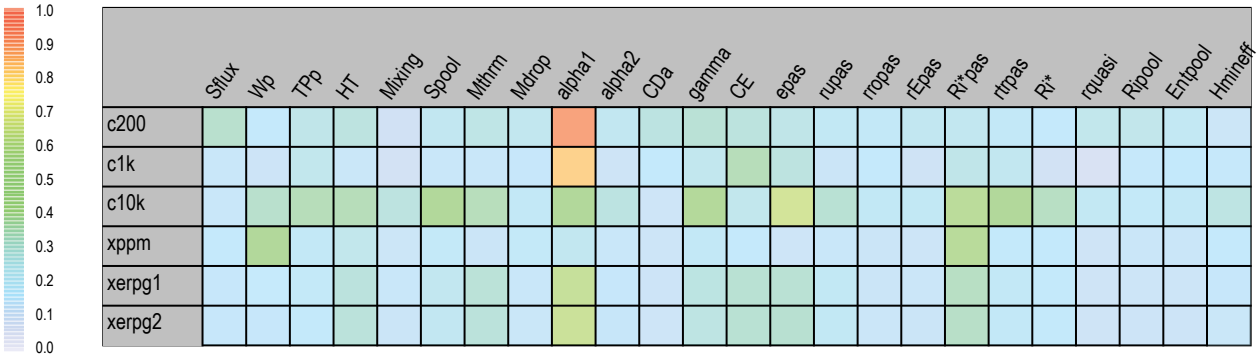
Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
c200	0.00	245040.00	15742.63	12274.00	94.91	31	2	1
c1k	775.51	90385.00	2766.40	2432.30	65.88	31	0	0
c10k	24.61	1583.60	97.33	100.75	38.00	31	0	0
xppm	1773.00	19830.00	4039.49	3993.50	20.51	31	0	0
xerpg1	246.84	6926.70	810.02	770.43	36.22	31	0	0
xerpg2	224.61	6694.50	768.43	730.11	37.10	31	0	0

Scenario NH3-11 (Ammonia, high release rate, horizontal release near ground F3)

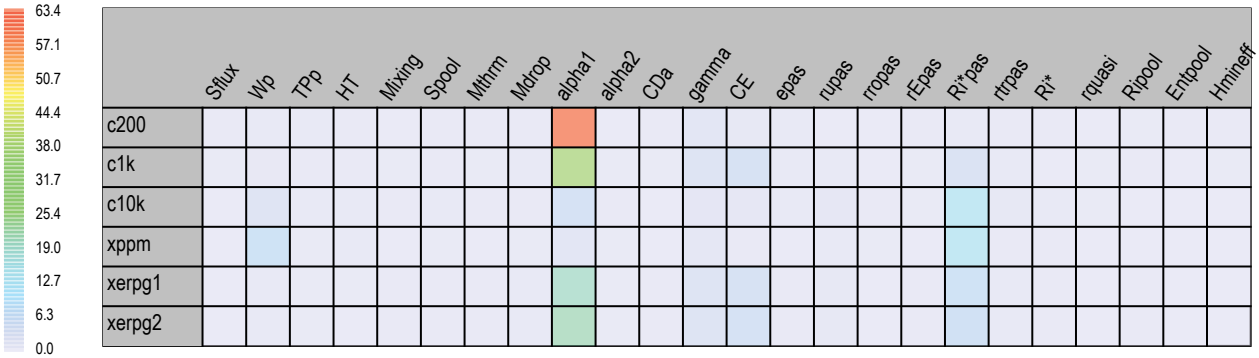
First order indices



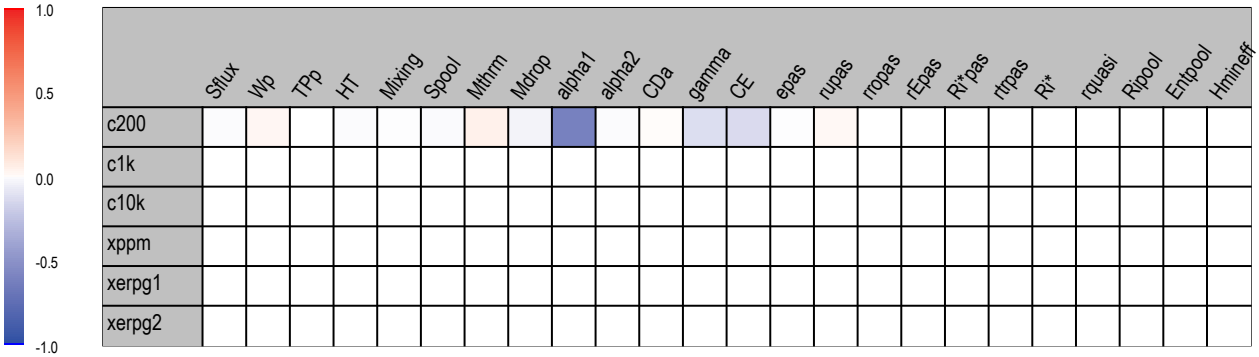
Total indices



Influence (CVSi)



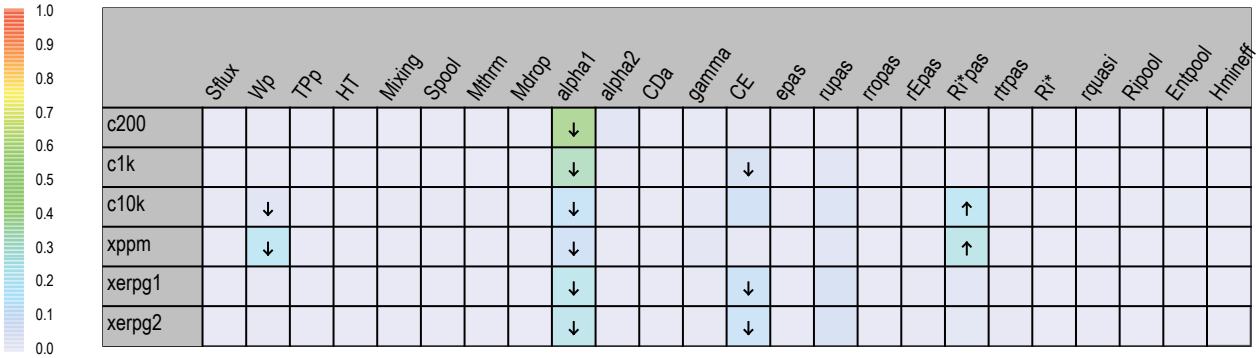
Correlation



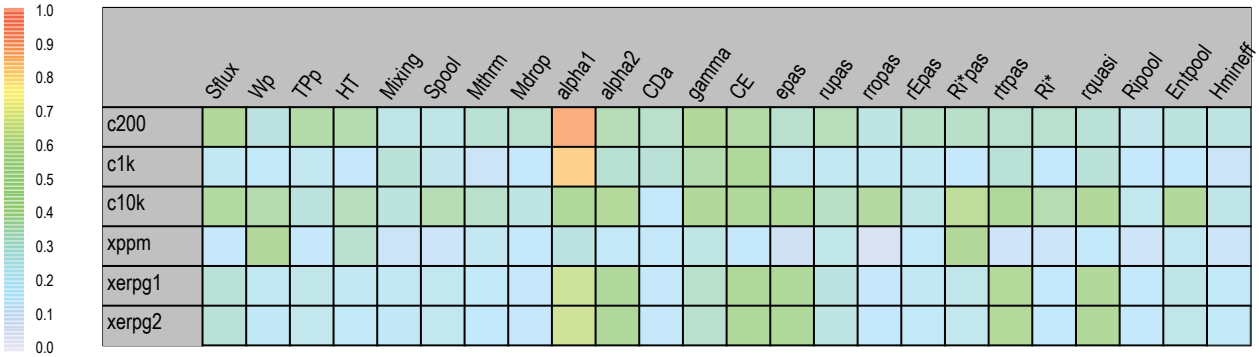
Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
c200	0.00	493300.00	32278.79	19586.00	114.30	10	1	0
c1k	0.22	131360.00	7499.89	5444.35	85.75	10	0	0
c10k	4.79	15815.00	712.09	692.83	49.21	10	0	0
xppm	128.29	50000.00	18520.39	17838.00	36.89	10	0	27
xerpg1	12.06	24791.00	2105.78	1821.45	58.71	10	0	0
xerpg2	10.86	24482.00	1963.90	1672.90	60.01	10	0	0

Scenario NH3-12 (Ammonia, high release rate, horizontal elevated release F3)

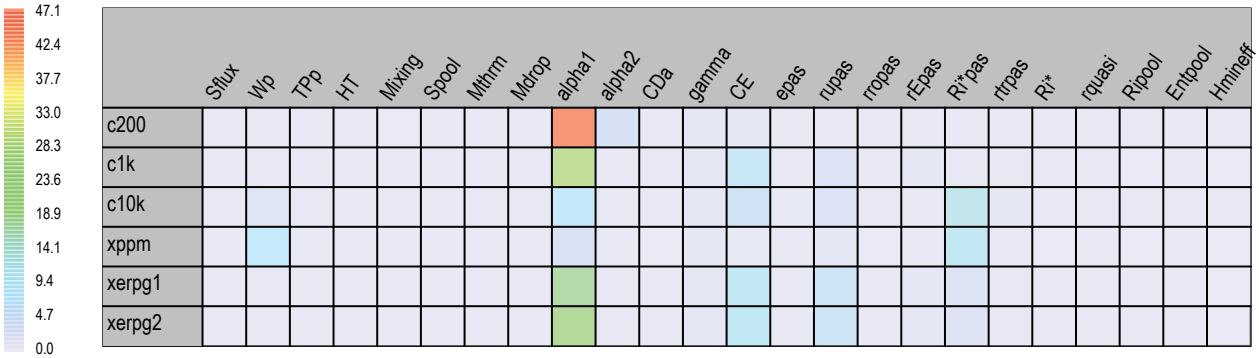
First order indices



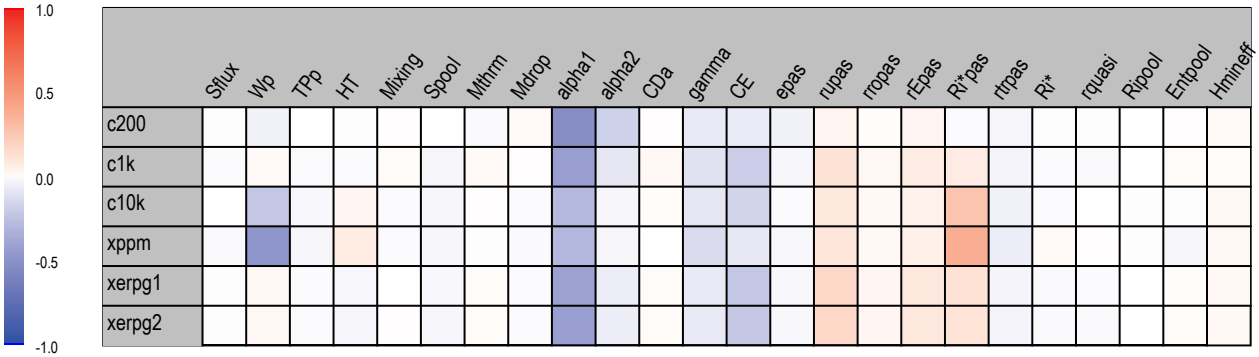
Total indices



Influence (CVSi)



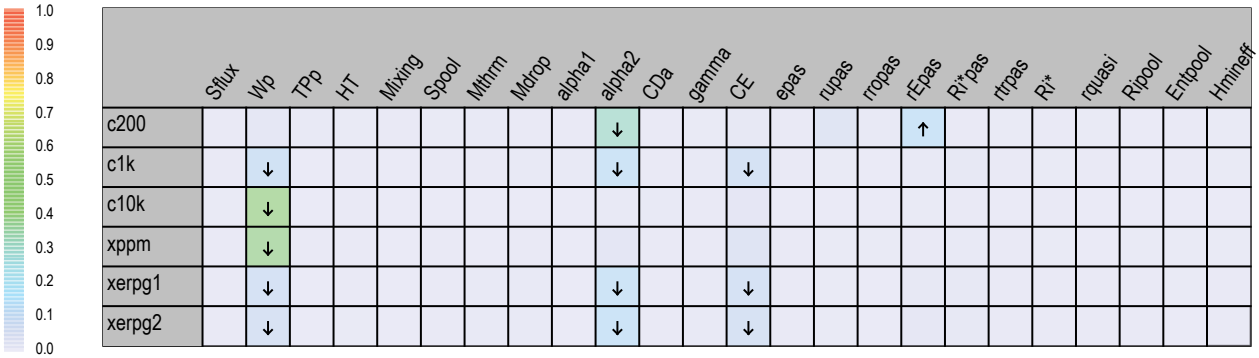
Correlation



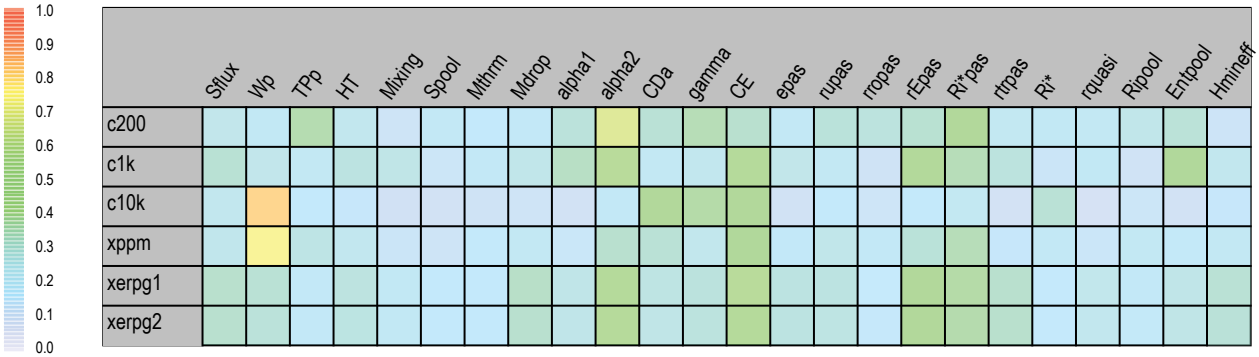
Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
c200	0.00	471840.00	17951.01	12617.00	108.96	48	6	0
c1k	720.54	105580.00	5689.08	4463.80	86.95	48	0	0
c10k	26.22	12459.00	655.72	604.89	57.40	48	0	0
xppm	1850.90	50000.00	17455.48	16202.00	38.11	48	0	25
xerpg1	199.49	42474.00	1730.23	1441.55	75.82	48	0	0
xerpg2	182.18	40541.00	1601.82	1317.10	77.84	48	0	0

Scenario NH3-13 (Ammonia, high release rate, vertical release near ground D5)

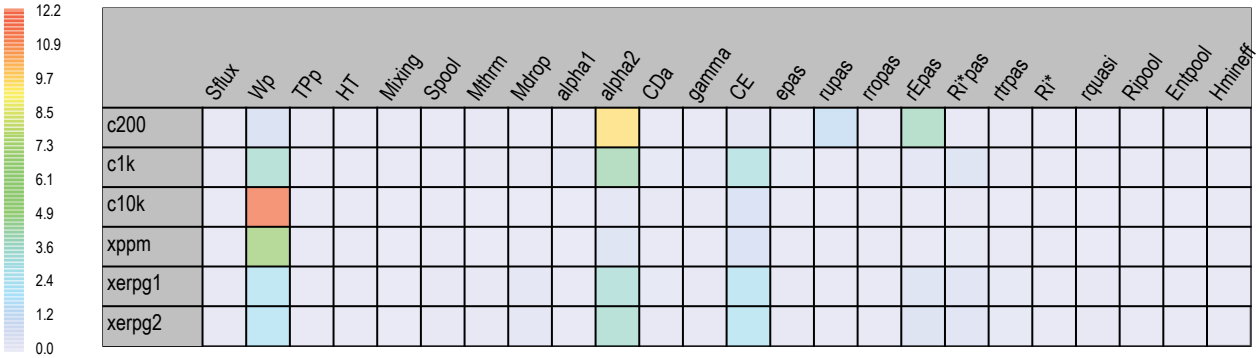
First order indices



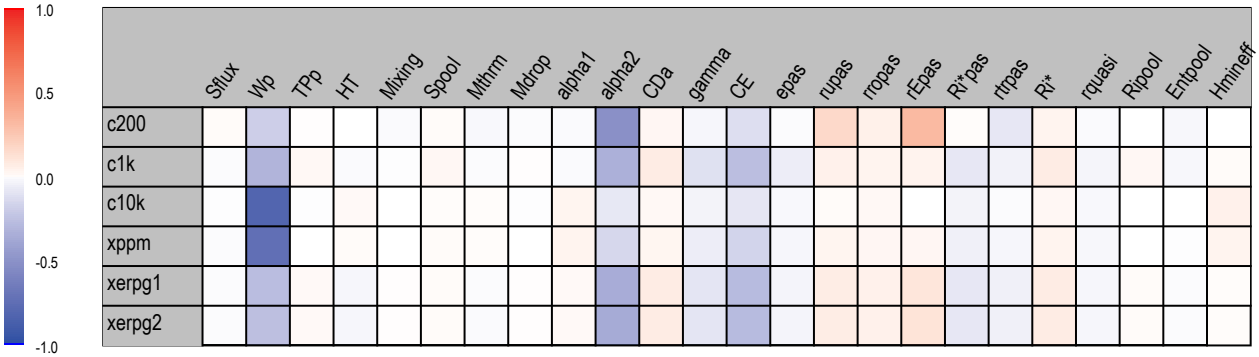
Total indices



Influence (CVSi)



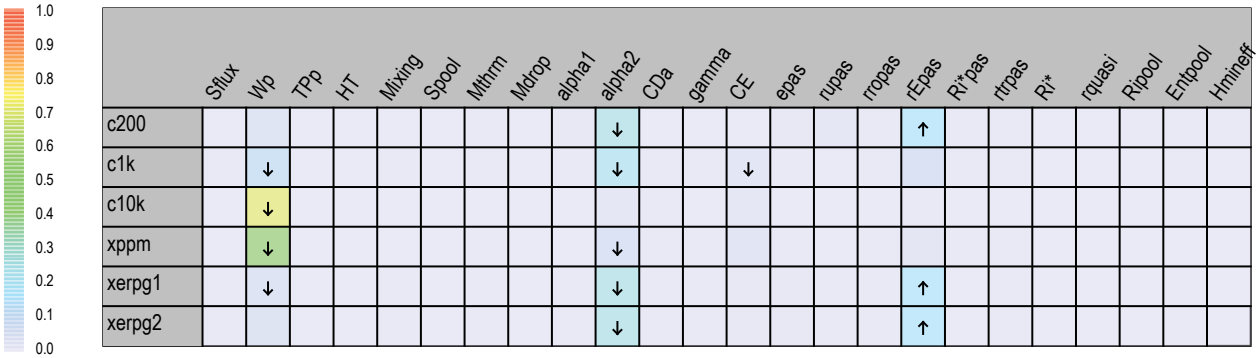
Correlation



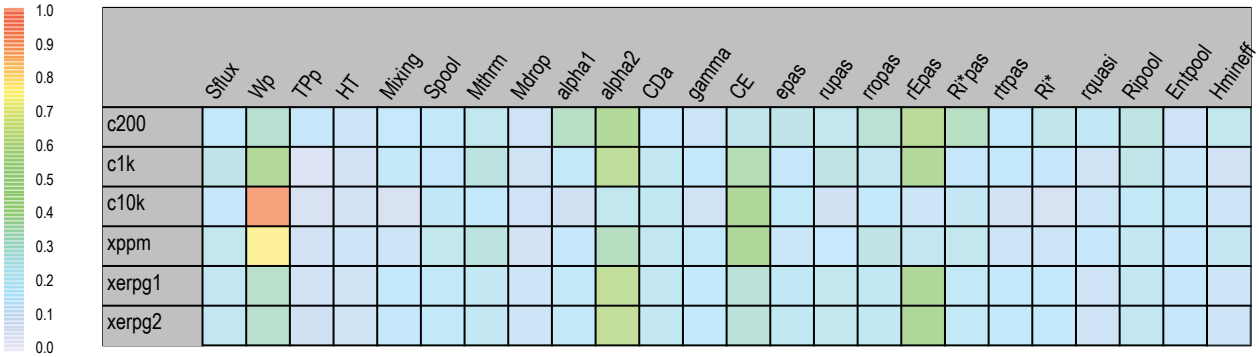
Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
c200	0.00	62533.74	12153.31	11993.94	32.17	43	34	0
c1k	834.80	23278.50	2377.42	2253.72	35.13	43	0	0
c10k	28.40	806.53	93.20	98.18	31.64	43	0	0
xppm	1903.10	15809.42	3885.12	3810.70	18.41	43	0	0
xerpg1	189.55	3815.98	738.61	728.31	29.27	43	0	0
xerpg2	176.73	3584.19	698.66	689.60	29.85	43	0	0

Scenario NH3-14 (Ammonia, high release rate, vertical elevated release D5)

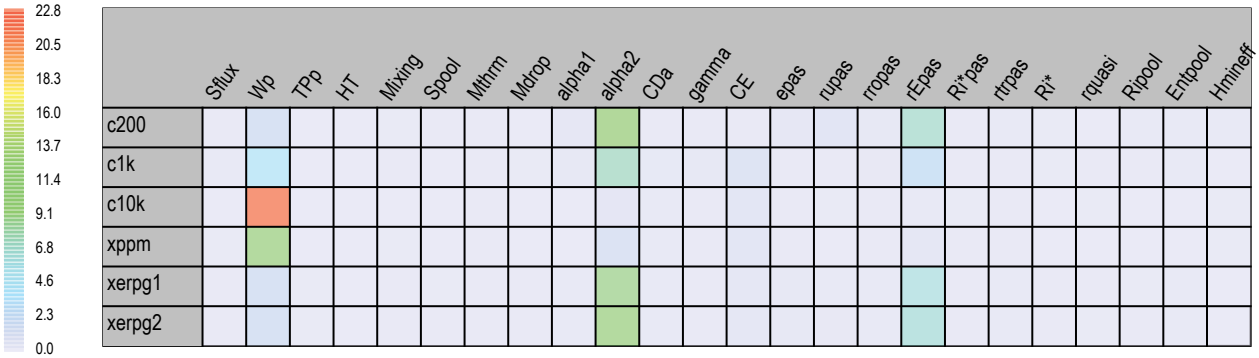
First order indices



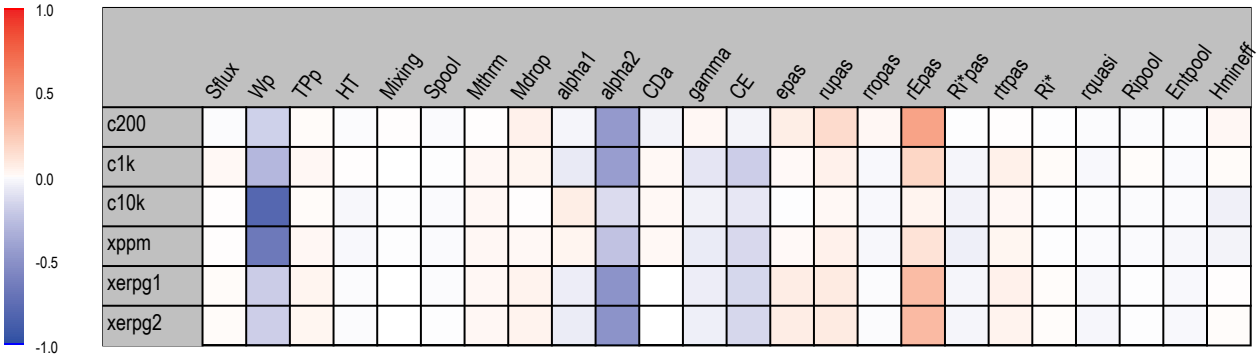
Total indices



Influence (CVSi)



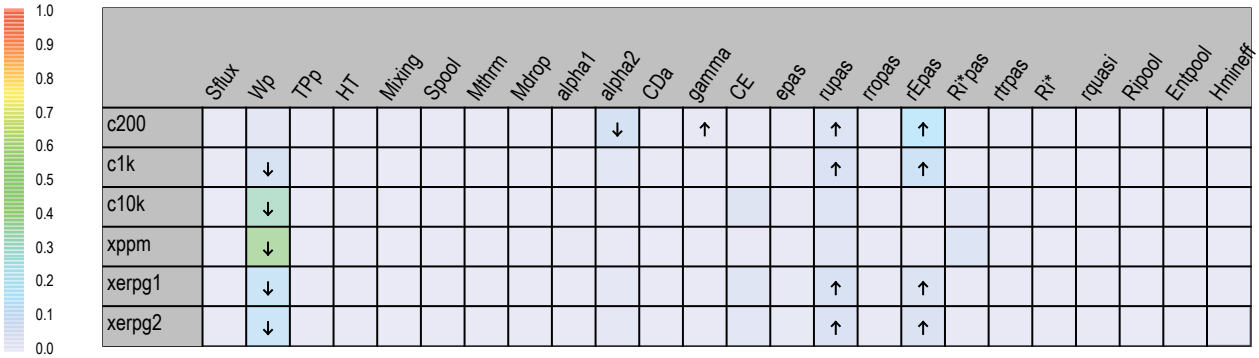
Correlation



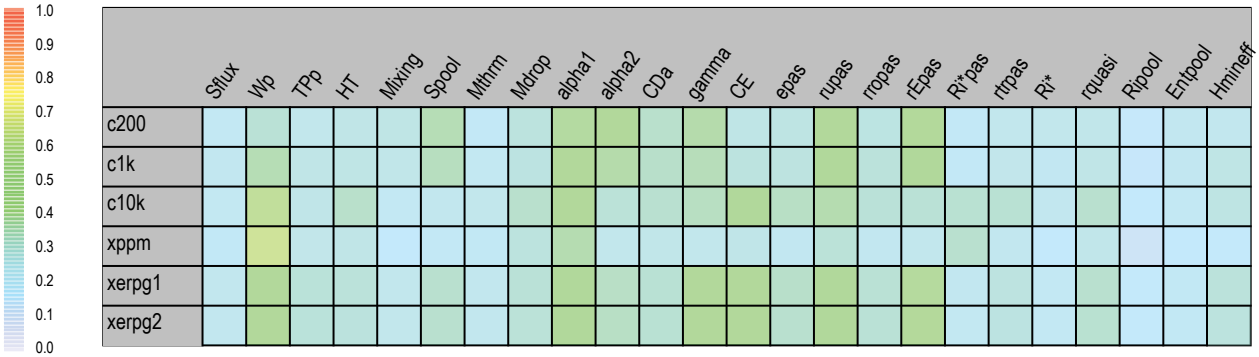
Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
c200	0.00	45634.20	9535.06	9500.45	41.25	40	35	0
c1k	564.64	16411.58	2083.72	1951.46	36.26	40	0	0
c10k	30.71	679.67	89.68	89.09	32.12	40	0	0
xppm	1462.95	14781.75	3702.69	3453.79	20.16	40	0	0
xerpg1	0.00	3295.16	628.71	638.75	36.28	40	6	0
xerpg2	0.00	3054.81	591.36	602.64	37.13	40	9	0

Scenario NH3-15 (Ammonia, high release rate, vertical release near ground F3)

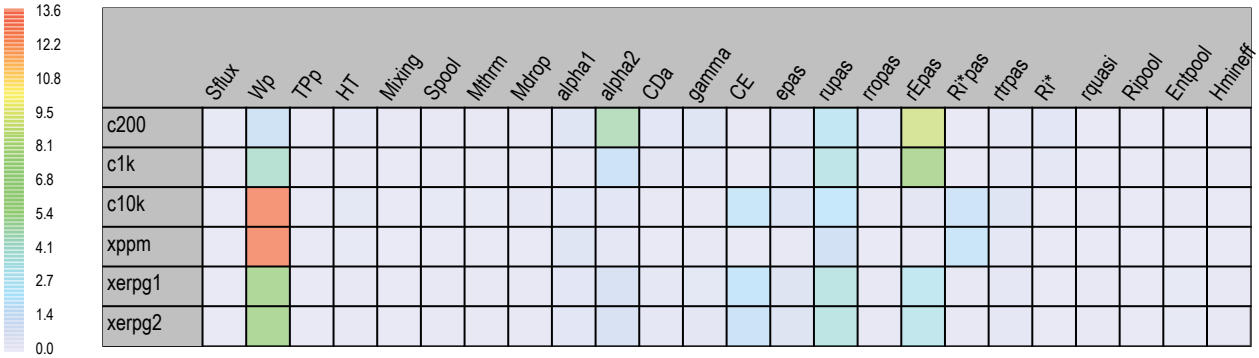
First order indices



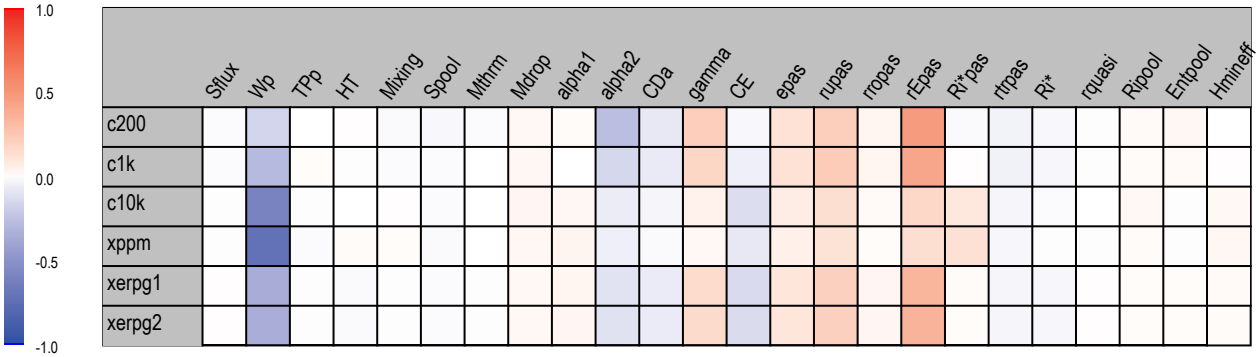
Total indices



Influence (CVSi)



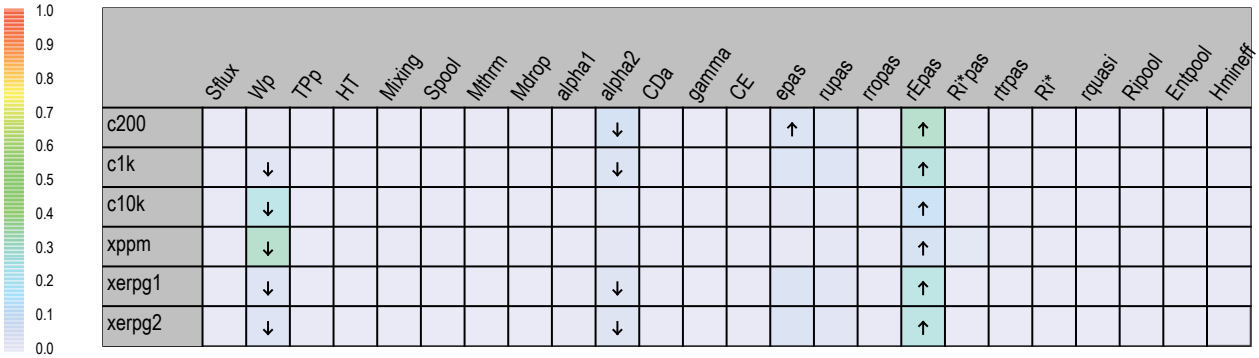
Correlation



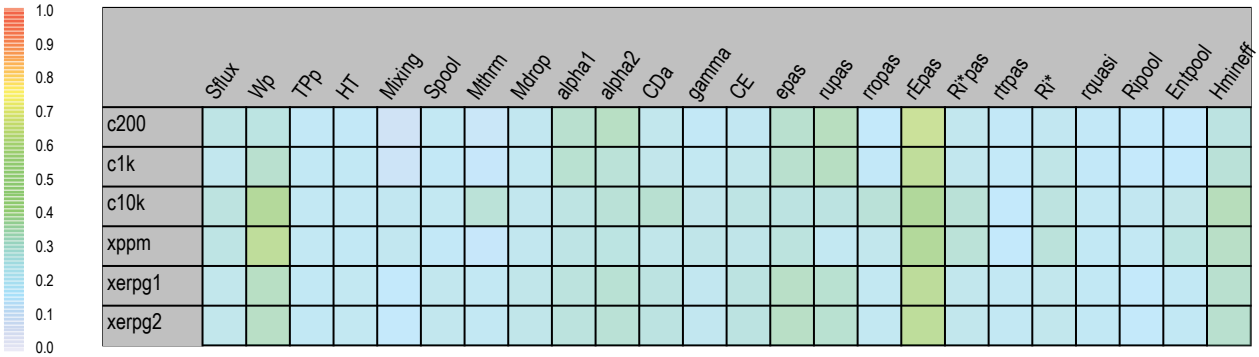
Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
c200	0.00	97348.22	19139.88	19752.18	54.92	64	72	0
c1k	0.00	38041.89	7861.39	7597.31	52.58	64	7	0
c10k	0.00	4297.34	761.46	648.89	42.44	63	1	0
xppm	0.00	50000.00	19318.09	16632.16	35.71	63	37	17
xerpg1	0.00	17187.26	2399.98	2343.78	51.18	63	50	0
xerpg2	0.00	15152.62	2239.86	2196.50	52.14	63	50	0

Scenario NH3-16 (Ammonia, high release rate, vertical elevated release F3)

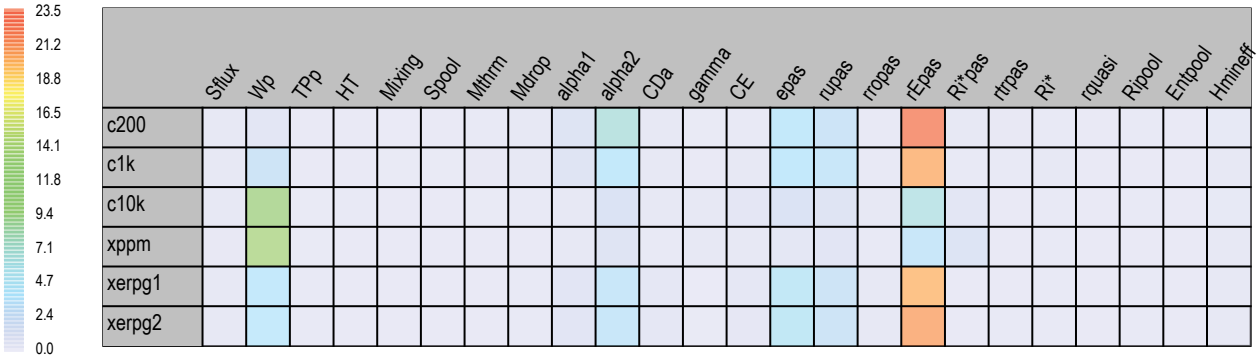
First order indices



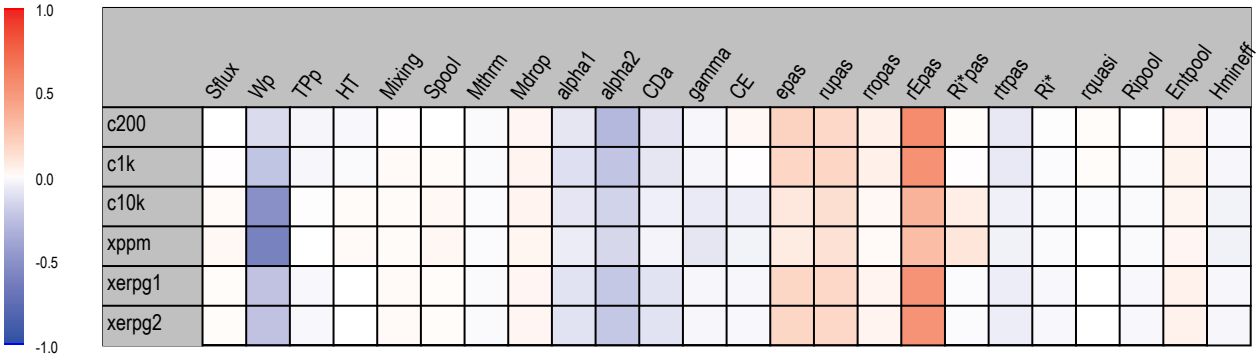
Total indices



Influence (CVSi)



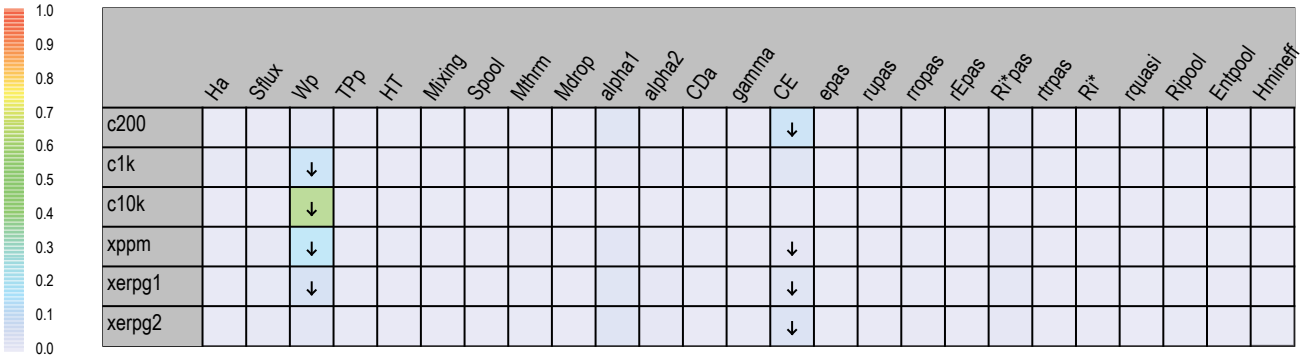
Correlation



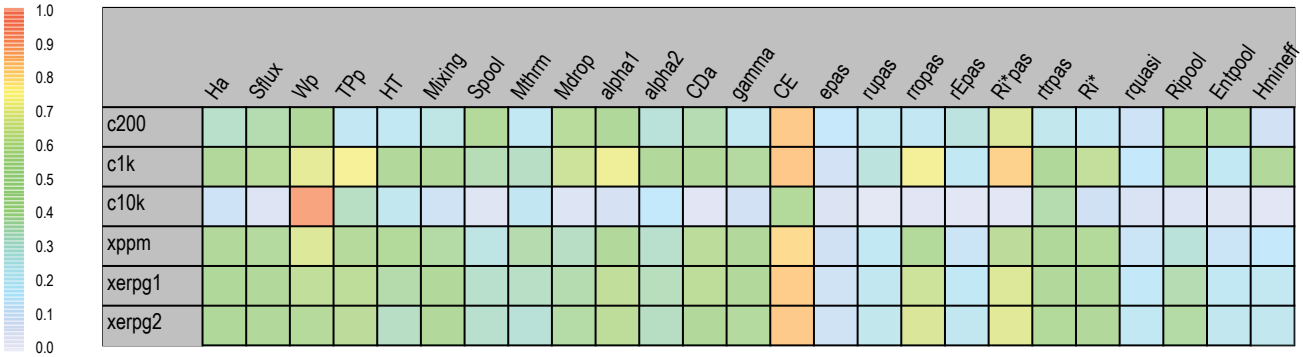
Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
c200	0.00	99702.92	15001.71	12452.55	74.10	38	113	0
c1k	0.00	36738.48	6365.47	5190.89	73.54	38	7	0
c10k	16.55	6277.32	661.58	554.25	51.52	38	0	0
xppm	0.00	50000.00	17149.39	14977.40	43.46	38	82	9
xerpg1	0.00	18491.02	1854.97	1667.35	76.87	38	117	0
xerpg2	0.00	17557.04	1728.39	1545.10	78.36	38	118	0

Scenario HF-1 (Hydrofluoric acid, low release rate, horizontal release near ground D5)

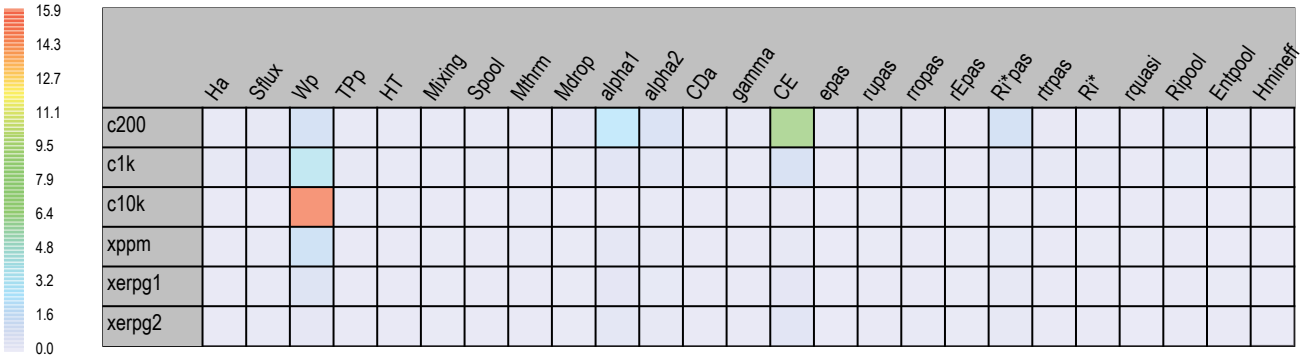
First order indices



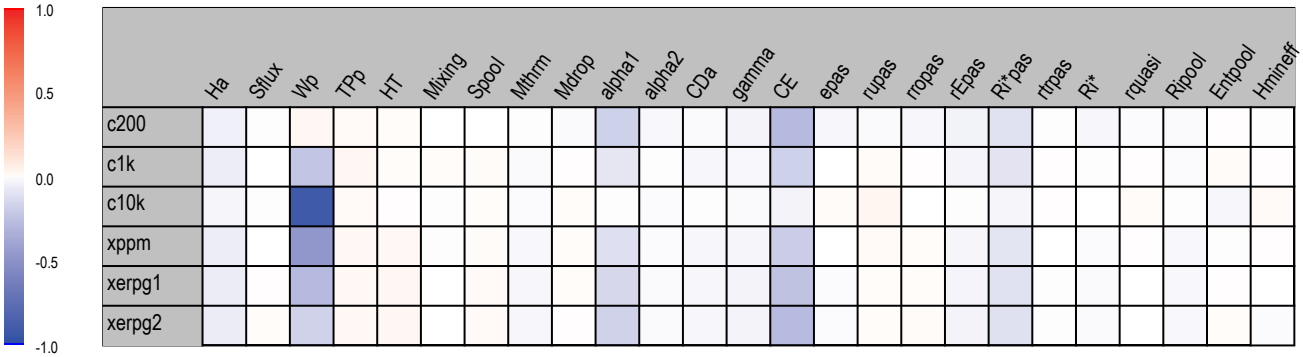
Total indices



Influence (CVSi)



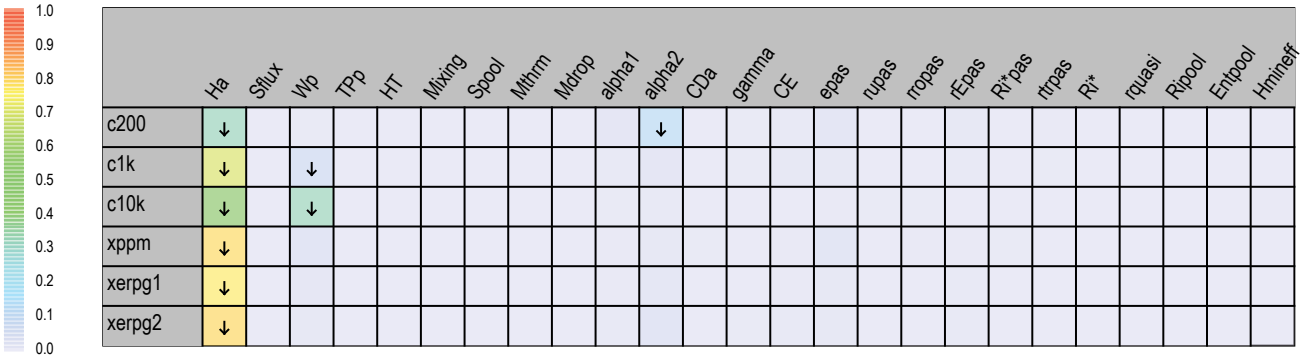
Correlation



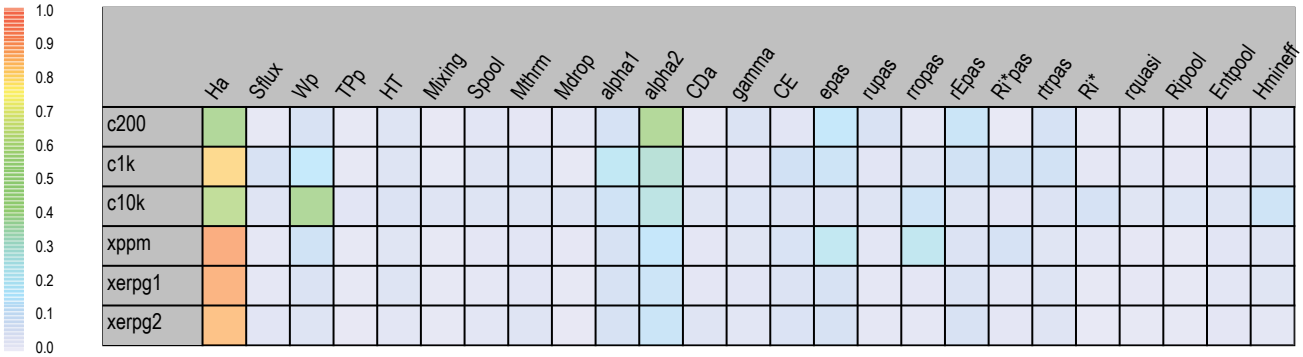
Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
c200	212.94	41408.97	2447.51	2213.83	60.37	3	0	0
c1k	0.01	1424.51	143.05	143.35	27.82	3	0	0
c10k	0.00	24.10	3.44	4.03	26.98	3	12	0
xppm	240.52	4162.04	1225.89	1246.34	9.65	3	0	0
xerpg1	207.45	3053.41	846.96	846.28	9.94	3	0	0
xerpg2	193.23	2376.79	672.04	665.83	10.39	3	0	0

Scenario HF-2 (Hydrofluoric acid, low release rate, horizontal elevated release D5)

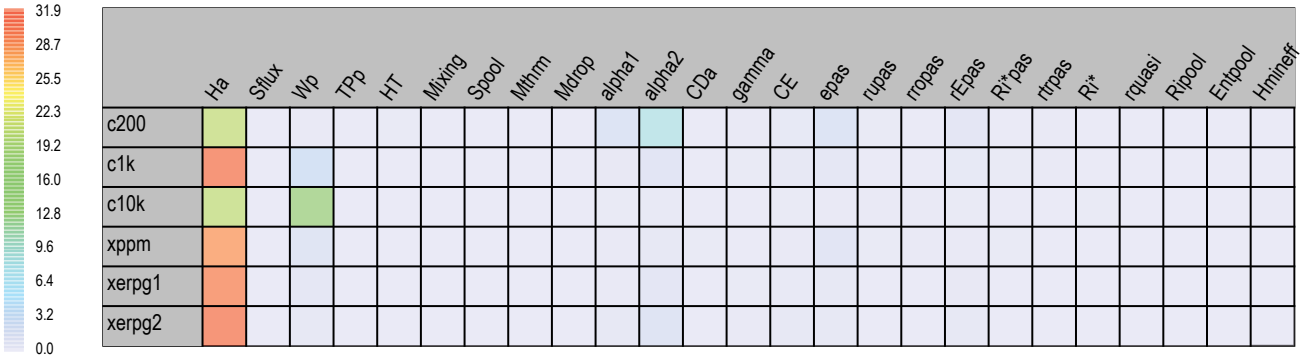
First order indices



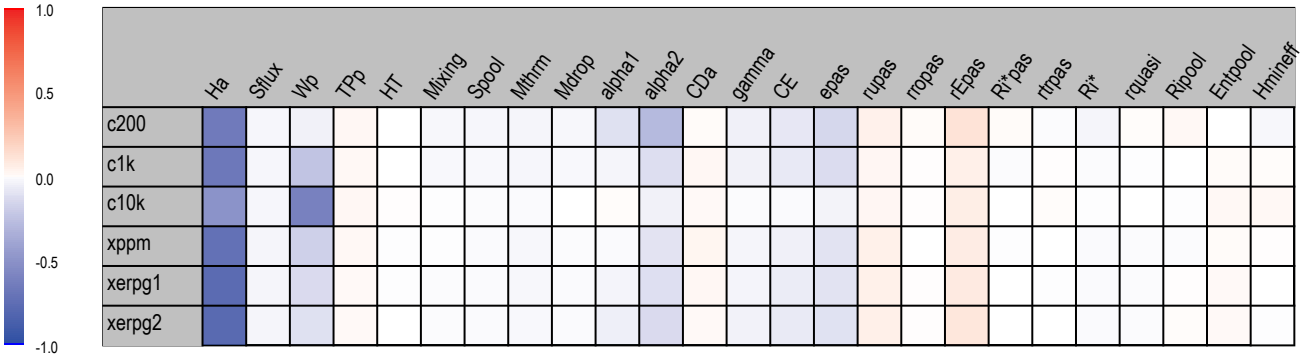
Total indices



Influence (CVSi)



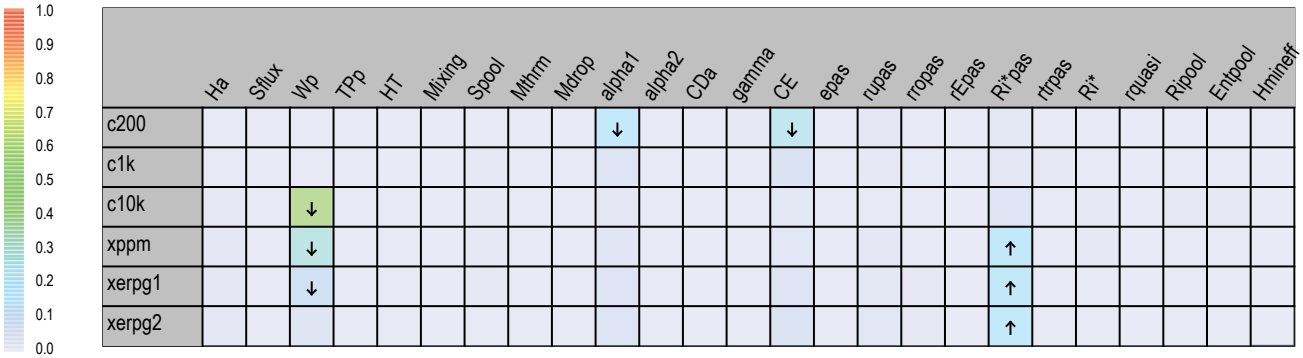
Correlation



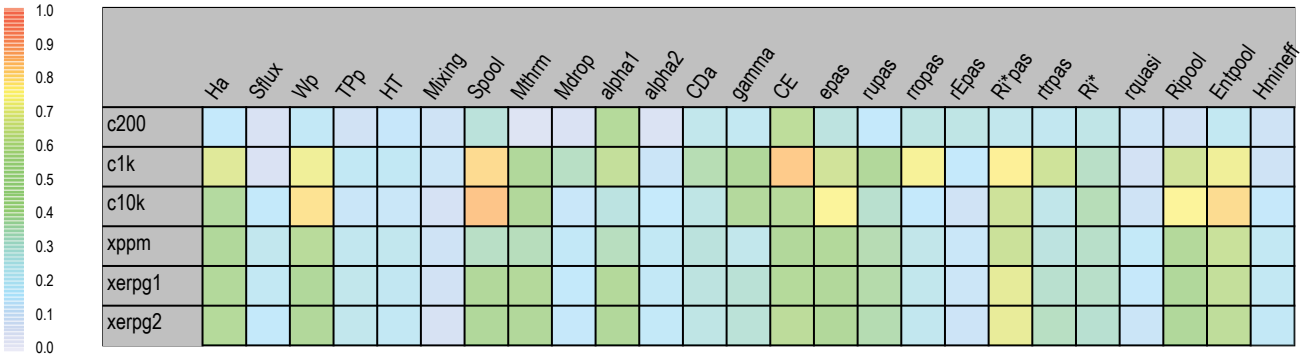
Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
c200	9.09	13873.20	867.31	847.40	66.76	1	0	0
c1k	0.00	744.27	89.30	95.45	45.09	1	52	0
c10k	0.00	23.03	2.78	2.46	44.85	11	783	0
xppm	93.98	3886.50	878.60	970.70	36.27	1	0	0
xerpg1	0.00	2425.06	566.03	630.72	38.72	1	13	0
xerpg2	0.00	1861.18	427.38	473.64	40.35	1	55	0

Scenario HF-3 (Hydrofluoric acid, low release rate, horizontal release near ground F3)

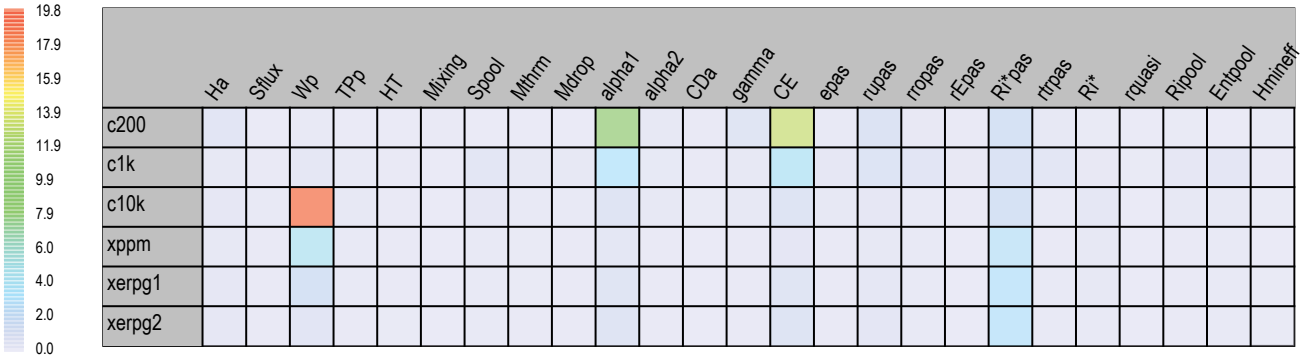
First order indices



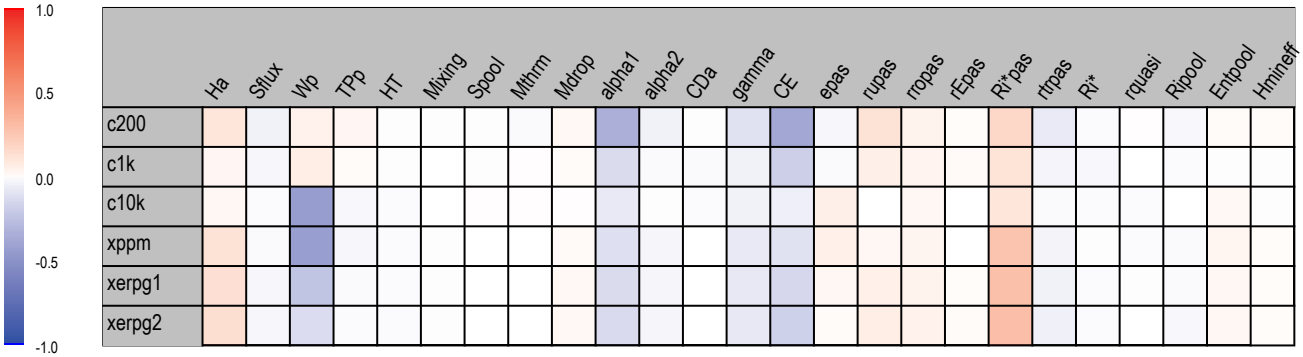
Total indices



Influence (CVSi)



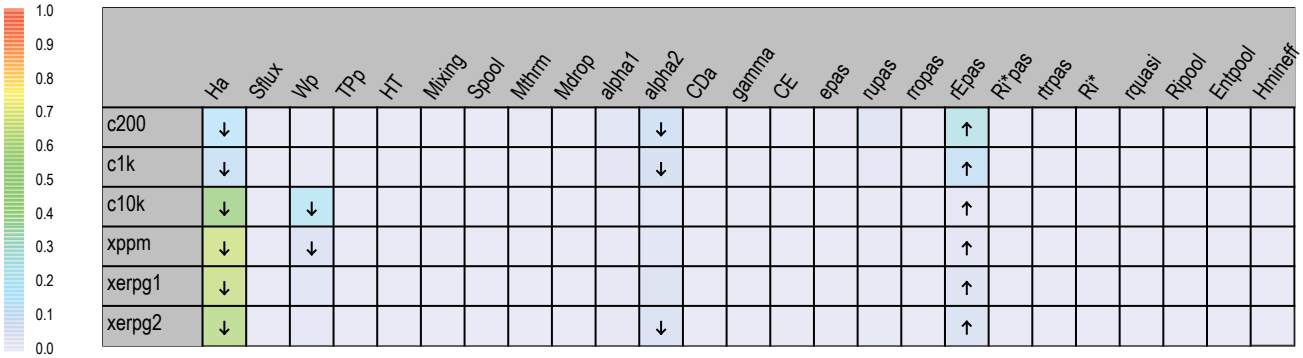
Correlation



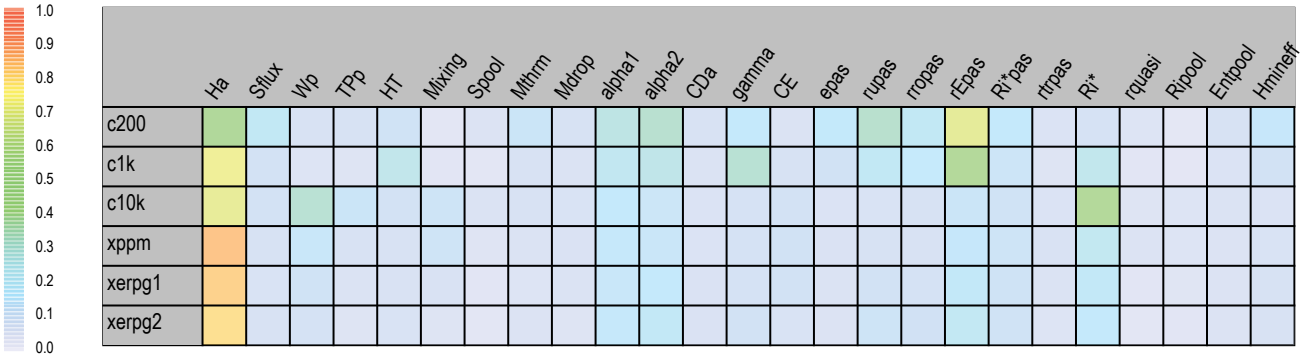
Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
c200	1119.50	114558.00	10416.65	9411.57	59.52	0	0	0
c1k	99.58	49052.85	1309.23	1276.31	63.41	0	0	0
c10k	2.68	1264.82	45.23	43.16	33.72	0	0	0
xppm	996.98	33888.55	5691.18	5812.06	15.54	0	0	0
xerpg1	631.82	22770.69	3667.70	3775.31	16.42	0	0	0
xerpg2	480.91	17734.31	2783.12	2854.78	17.58	0	0	0

Scenario HF-4 (Hydrofluoric acid, low release rate, horizontal elevated release F3)

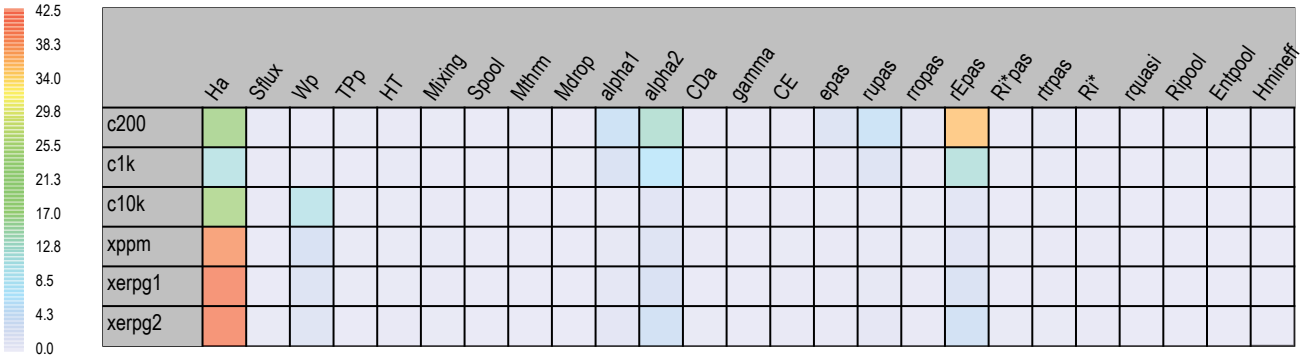
First order indices



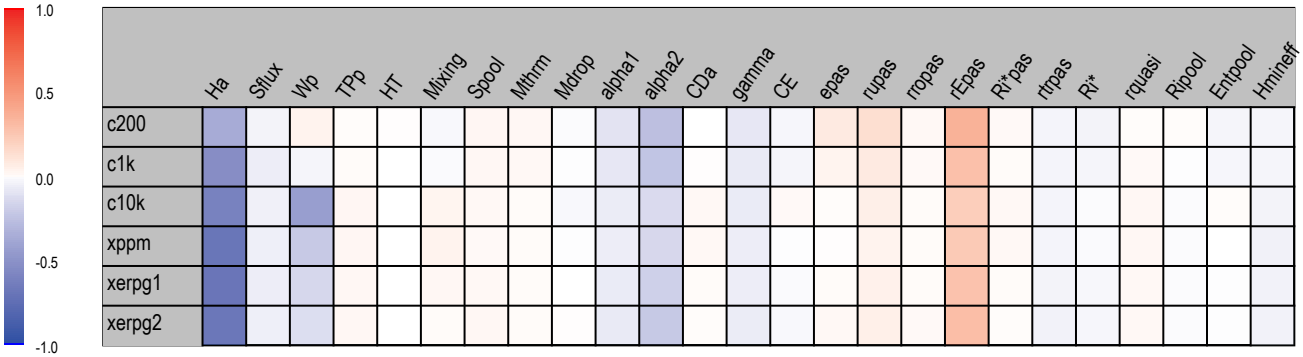
Total indices



Influence (CVSi)



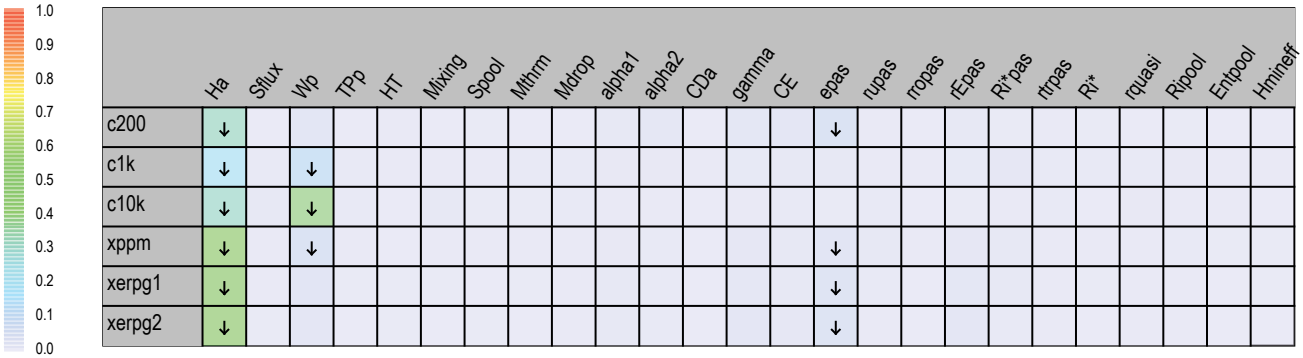
Correlation



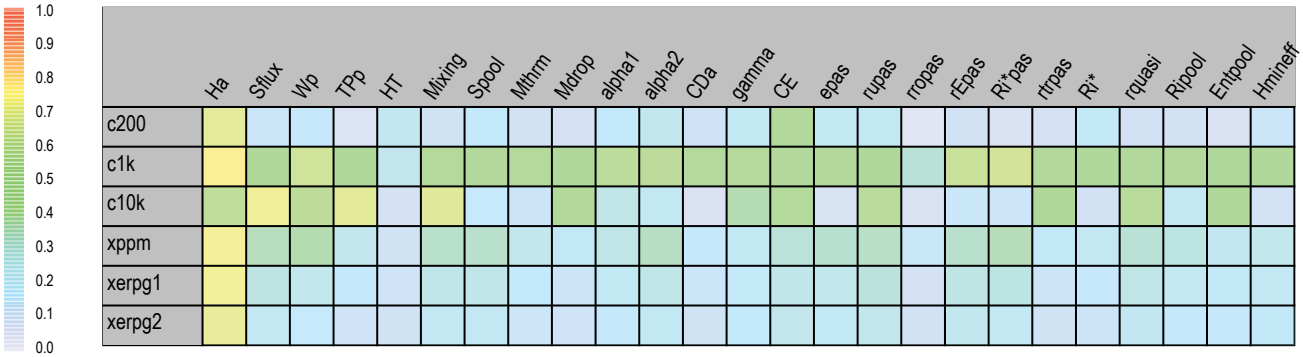
Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
c200	0.00	47538.76	2296.46	1249.97	145.12	6	1306	0
c1k	0.00	22559.10	456.93	441.44	96.14	5	2151	0
c10k	0.00	407.73	27.48	27.47	53.60	3	884	0
xppm	0.00	33440.52	3271.22	3738.37	58.95	3	19	0
xerpg1	0.00	19565.65	1915.01	2203.43	64.67	3	98	0
xerpg2	0.00	13814.75	1351.62	1543.03	69.01	3	195	0

Scenario HF-18 (Hydrofluoric acid, low release rate, horizontal elevated release A3)

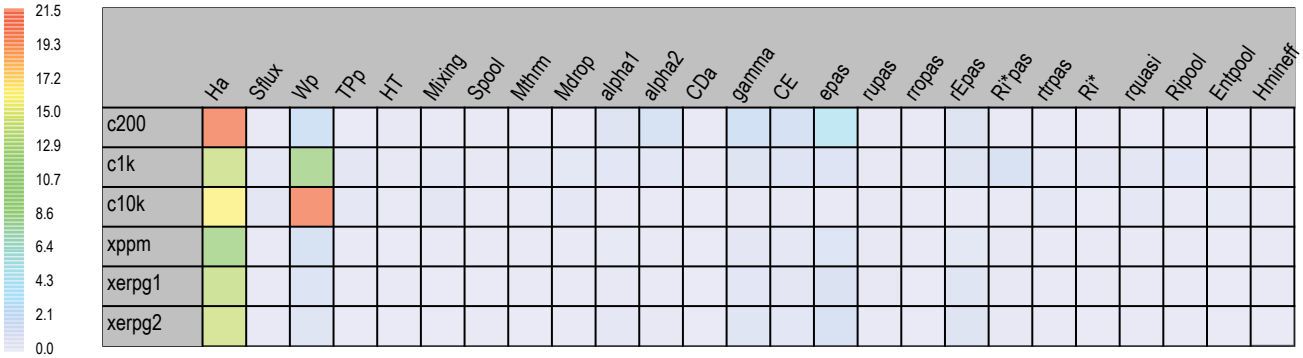
First order indices



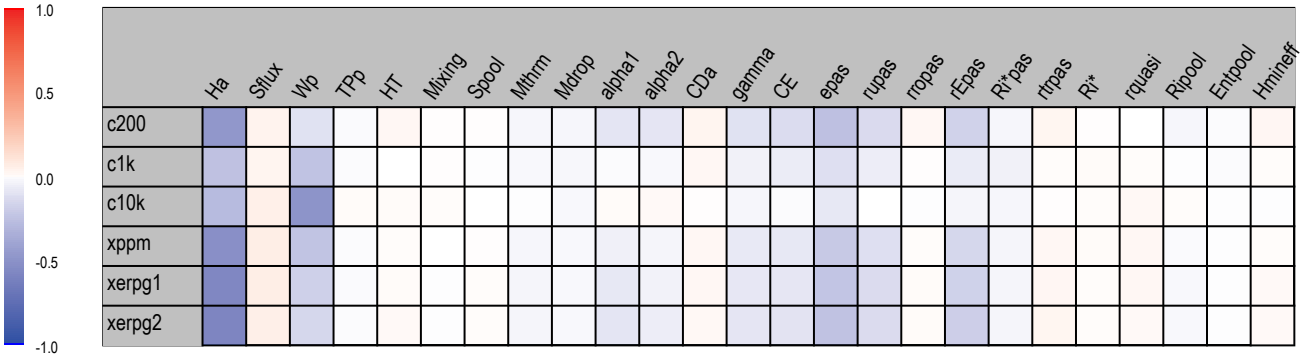
Total indices



Influence (CVSi)



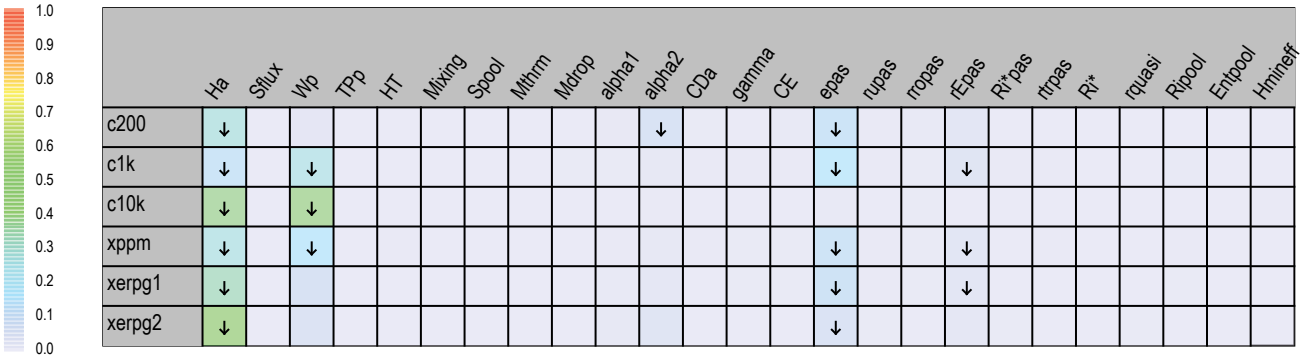
Correlation



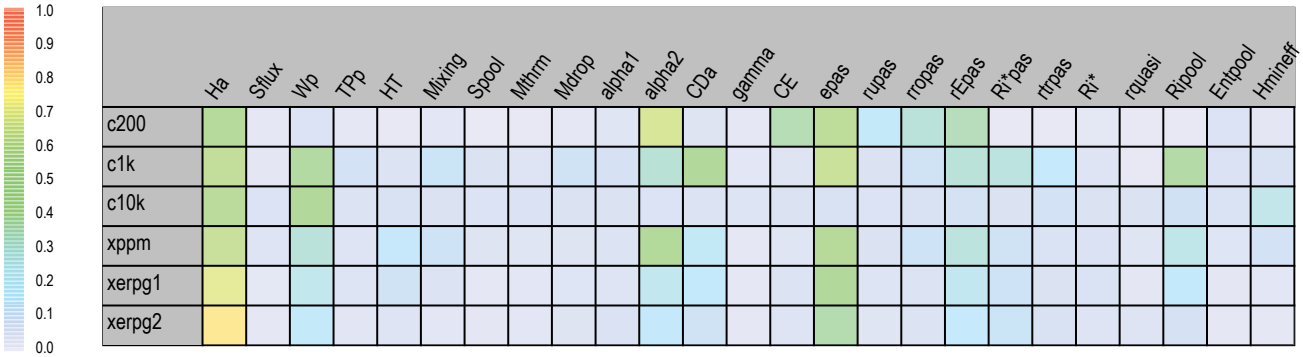
Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
c200	0.00	4771.58	319.76	272.27	70.04	0	3	0
c1k	0.00	551.59	16.61	15.53	79.19	0	5	0
c10k	0.00	8.60	0.36	0.29	56.30	0	1491	0
xppm	0.00	2479.00	363.72	360.48	28.51	0	3	0
xerpg1	0.00	1777.47	254.34	249.70	30.90	0	3	0
xerpg2	0.00	1436.21	202.70	195.12	32.73	0	3	0

Scenario HF-17 (Hydrofluoric acid, low release rate, horizontal elevated release D9)

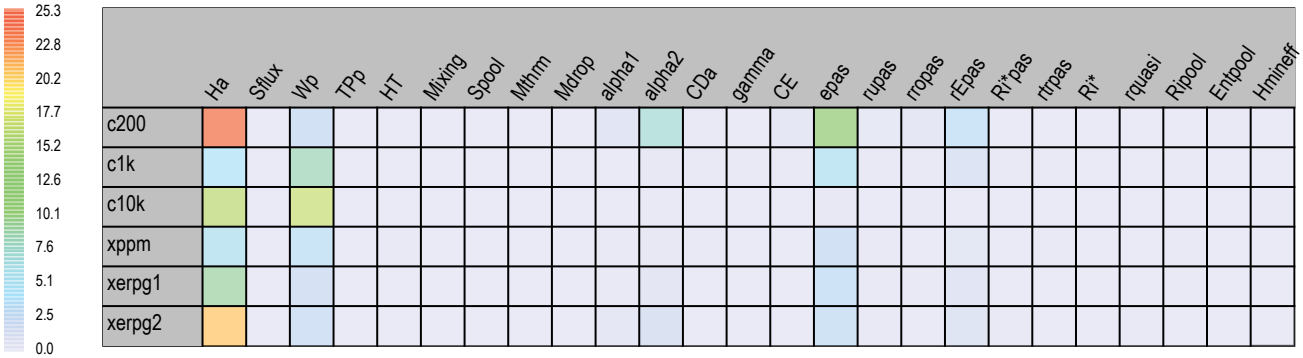
First order indices



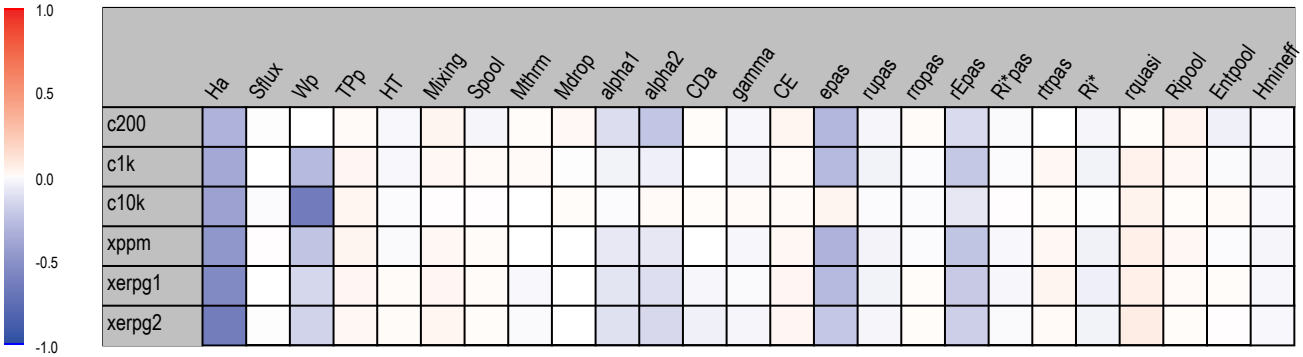
Total indices



Influence (CVSi)



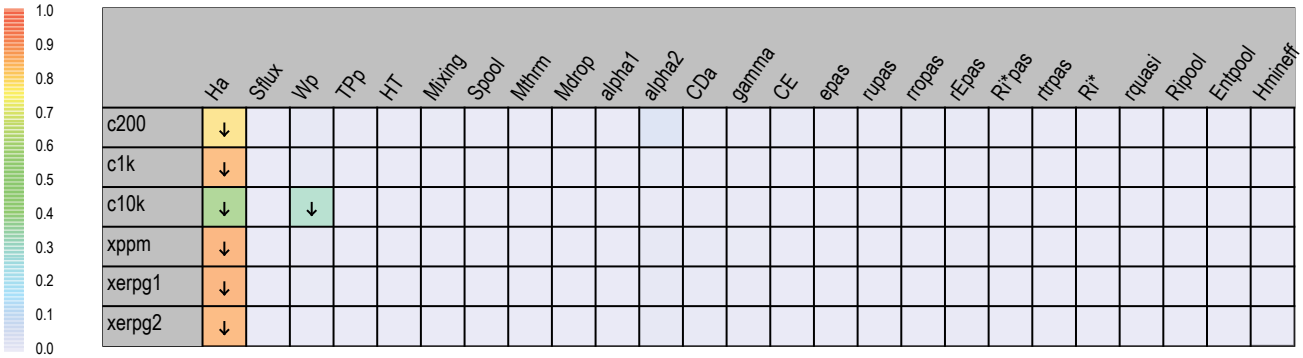
Correlation



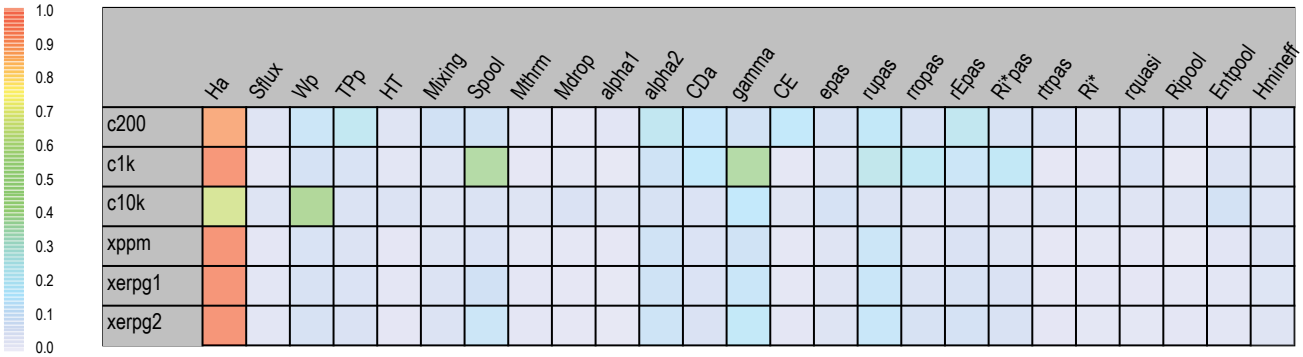
Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
c200	2.07	11326.85	517.90	419.08	97.38	0	0	0
c1k	0.00	485.43	46.06	46.44	34.17	0	0	0
c10k	0.00	7.86	1.34	1.16	43.50	8	378	0
xppm	0.00	2146.07	597.94	596.40	21.36	0	90	0
xerpg1	0.00	1622.39	385.36	382.23	27.76	0	314	0
xerpg2	0.00	1451.03	273.17	282.44	43.08	0	1683	0

Scenario HF-5 (Hydrofluoric acid, low release rate, vertical release near ground D5)

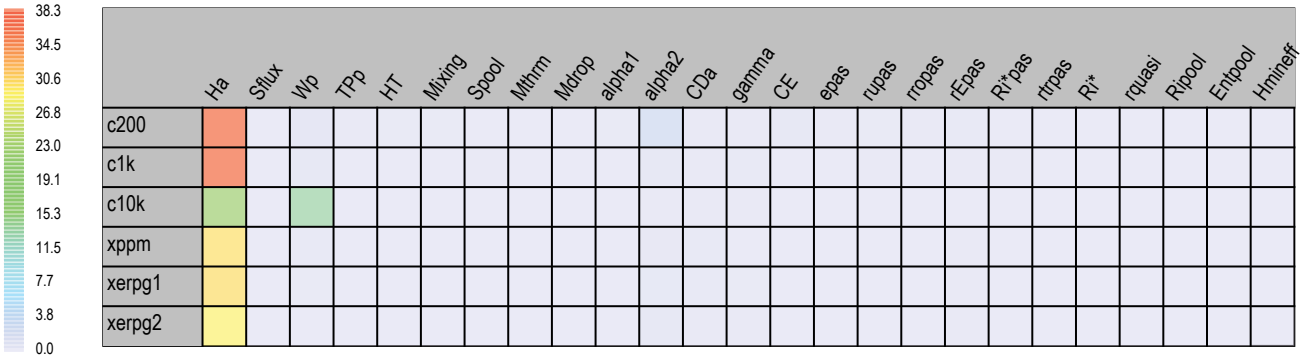
First order indices



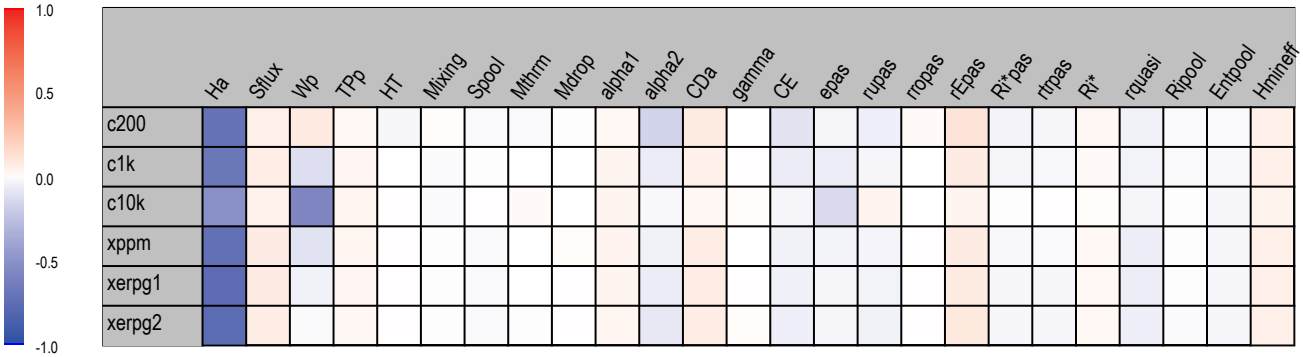
Total indices



Influence (CVSi)



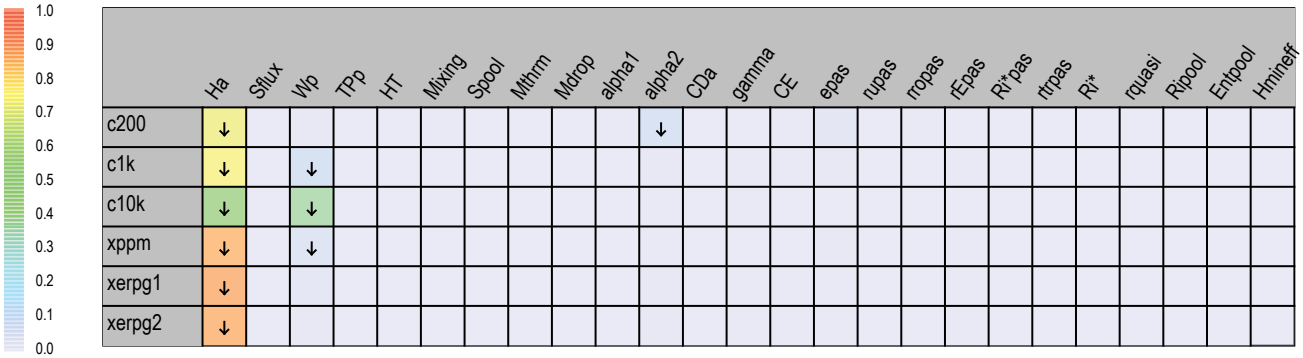
Correlation



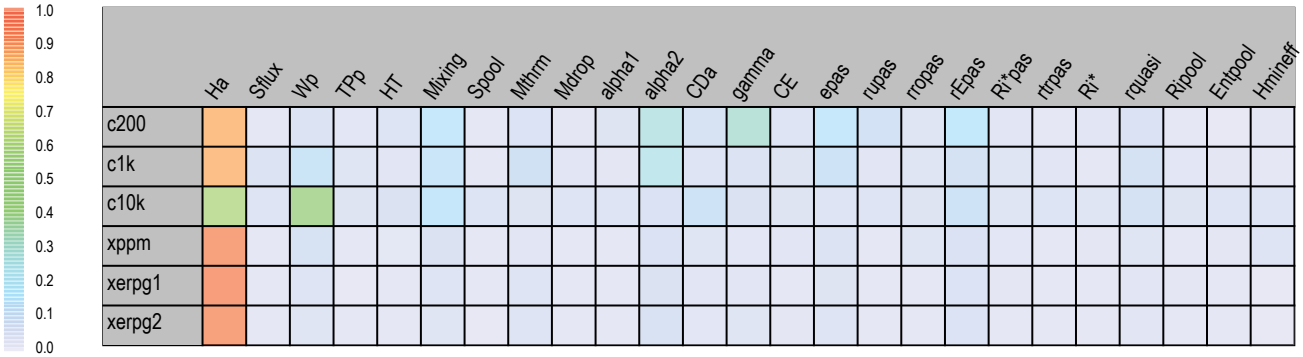
Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
c200	42.03	14438.03	1524.20	1813.04	48.72	6	0	0
c1k	0.00	1568.80	108.54	123.39	43.63	7	44	0
c10k	0.00	17.02	2.94	2.54	42.90	7	809	0
xppm	158.39	4262.59	996.27	1126.88	34.15	6	0	0
xerpg1	142.29	3279.91	674.53	784.25	34.39	6	0	0
xerpg2	132.22	2781.09	530.60	623.52	33.68	6	0	0

Scenario HF-6 (Hydrofluoric acid, low release rate, vertical elevated release D5)

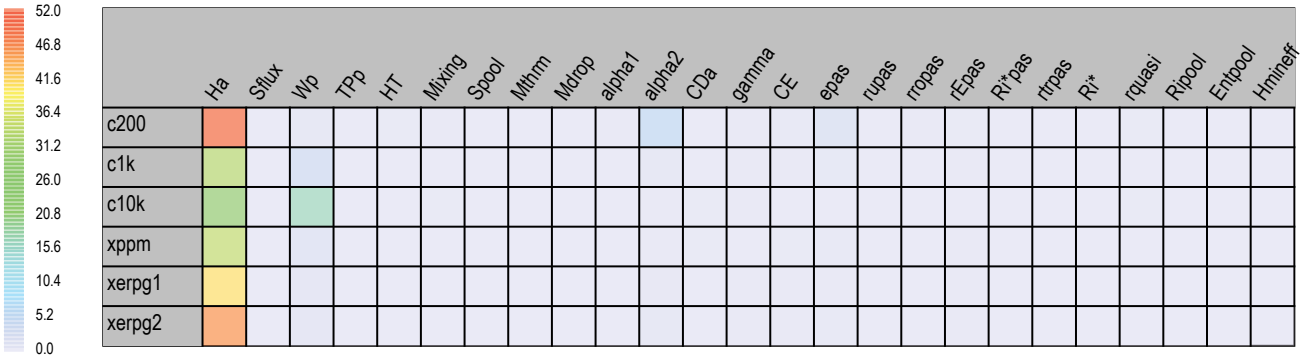
First order indices



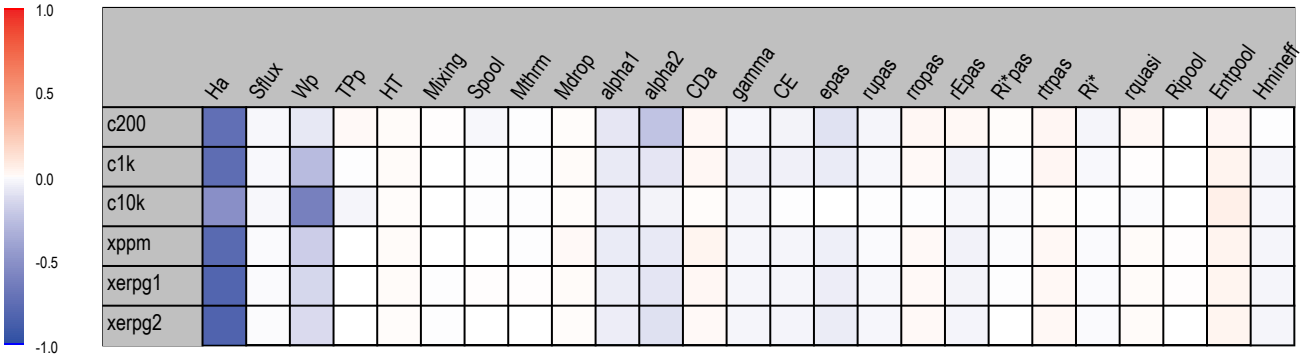
Total indices



Influence (CVSi)



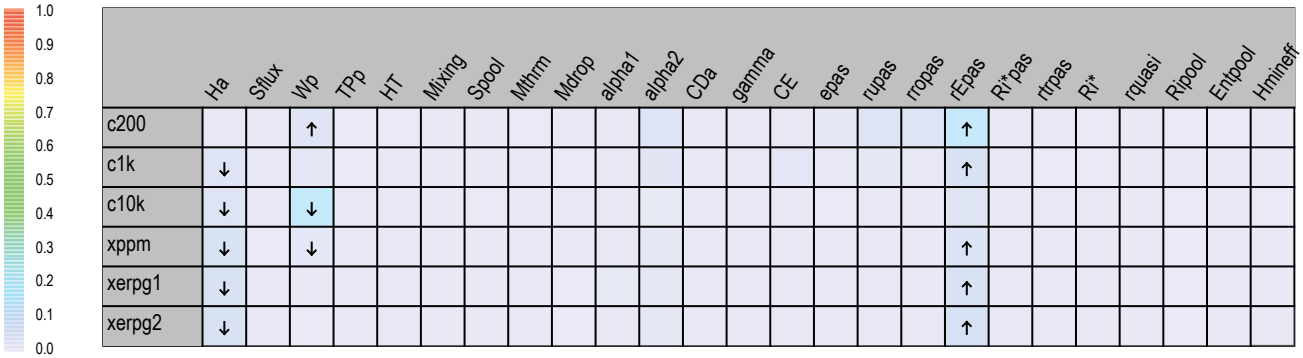
Correlation



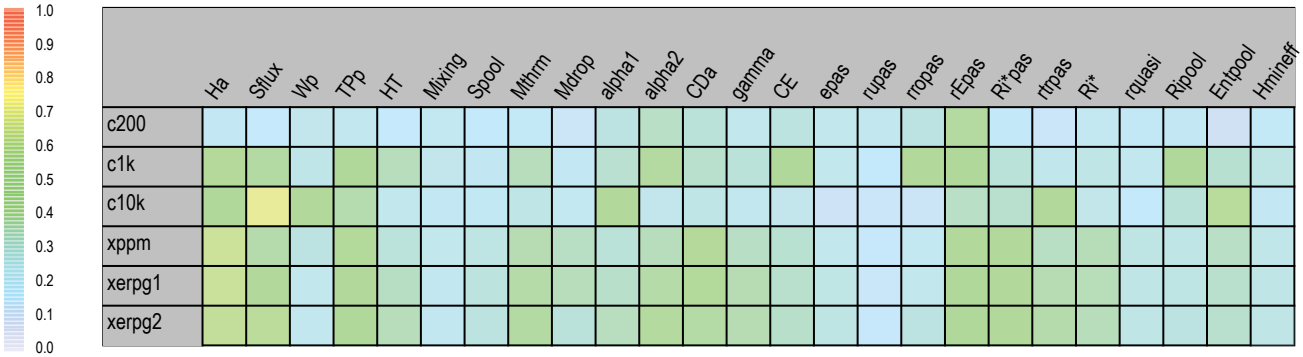
Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
c200	2.53	10923.98	816.71	812.79	71.26	0	0	0
c1k	0.00	751.54	87.33	93.83	44.78	0	64	0
c10k	0.00	15.51	2.76	2.43	45.17	7	787	0
xppm	0.00	2815.76	852.60	959.31	39.90	0	202	0
xerpg1	0.00	1884.88	538.81	624.24	46.66	0	1173	0
xerpg2	0.00	1541.84	397.25	470.93	53.16	0	2484	0

Scenario HF-7 (Hydrofluoric acid, low release rate, vertical release near ground F3)

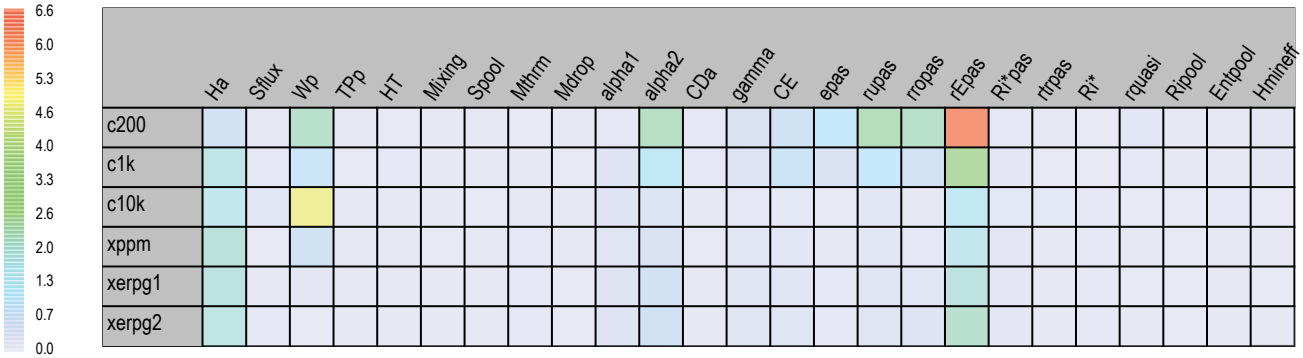
First order indices



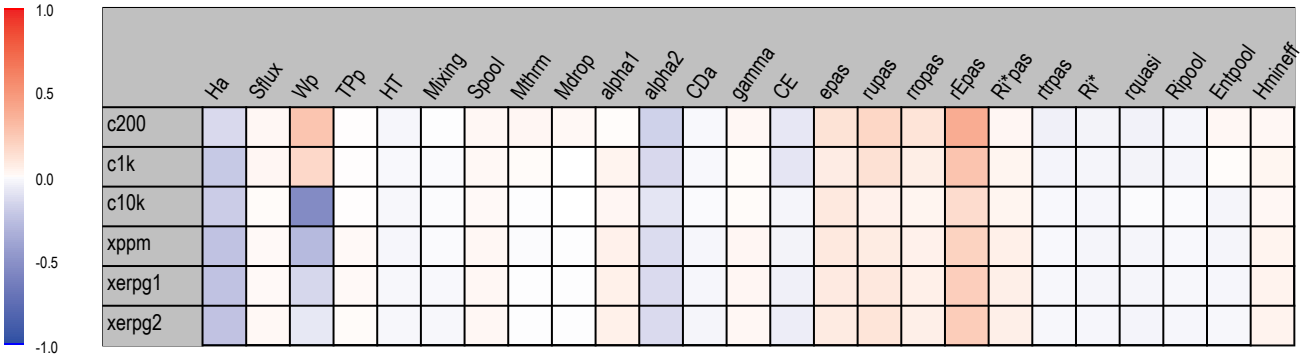
Total indices



Influence (CVSi)



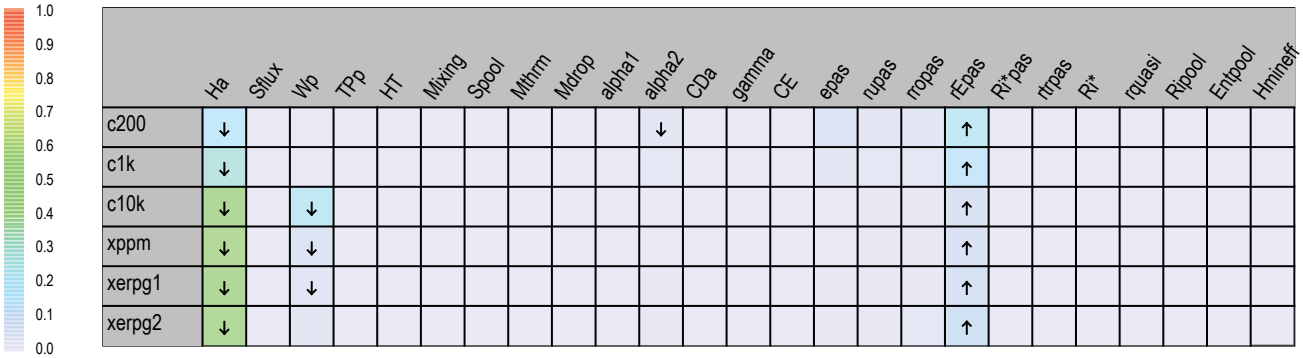
Correlation



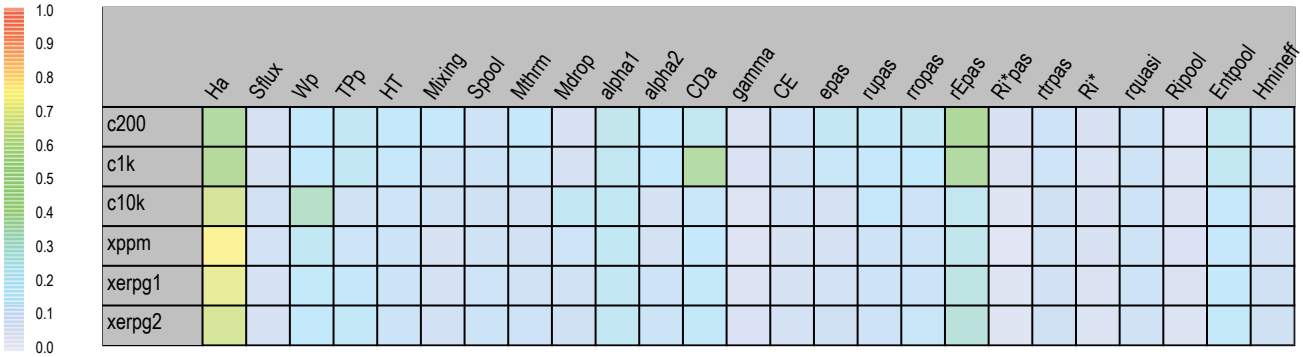
Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
c200	0.00	36301.77	10130.85	10116.66	44.39	18	699	0
c1k	0.00	15846.54	1216.55	1256.82	35.24	17	790	0
c10k	0.00	467.23	42.44	39.98	28.93	17	254	0
xppm	59.45	23778.59	5379.29	5569.71	24.15	17	0	0
xerpg1	56.92	15686.36	3466.15	3688.55	24.38	17	0	0
xerpg2	55.34	12077.85	2631.26	2815.06	24.86	17	0	0

Scenario HF-8 (Hydrofluoric acid, low release rate, vertical elevated release F3)

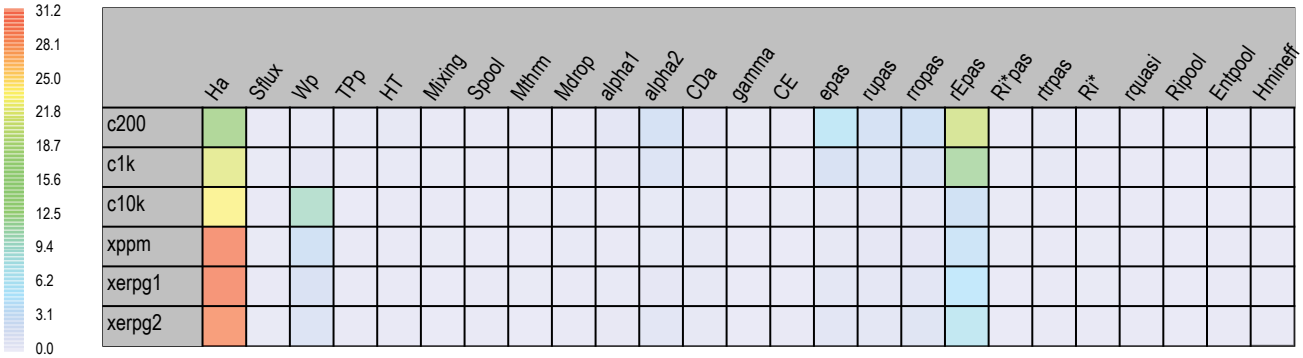
First order indices



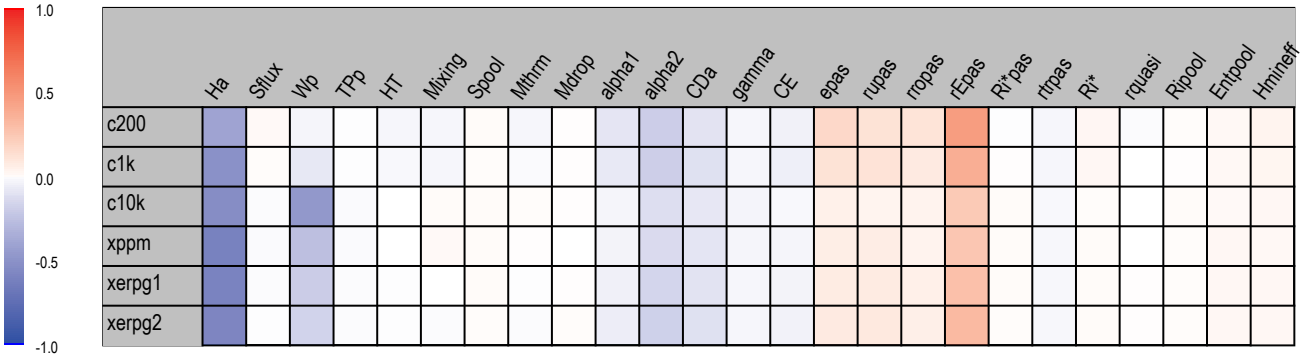
Total indices



Influence (CVSi)



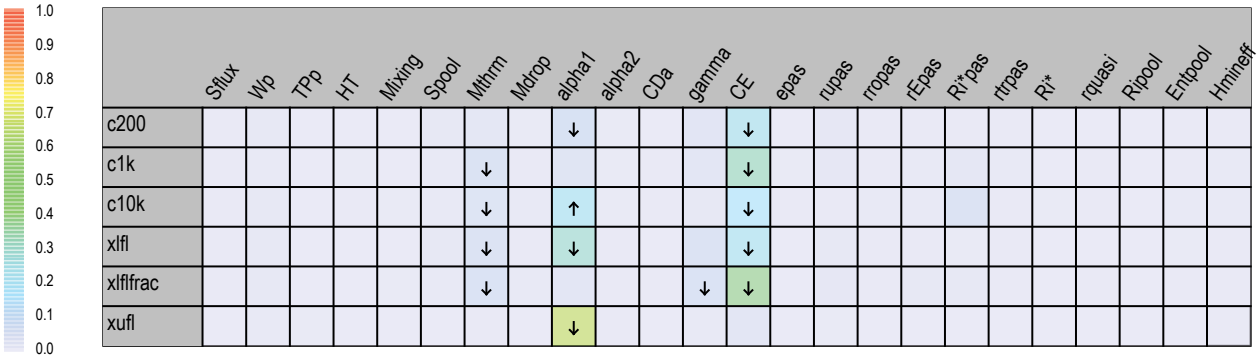
Correlation



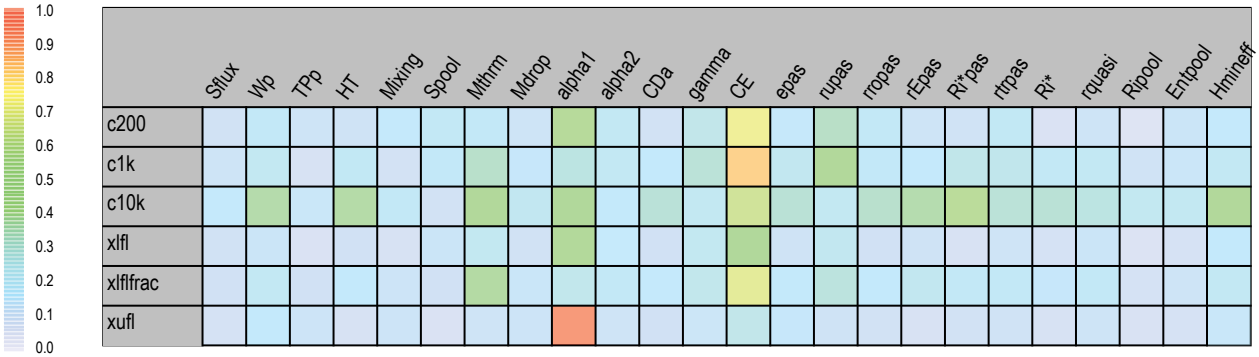
Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
c200	0.00	34114.09	5295.87	2338.17	103.57	4	1428	0
c1k	0.00	13674.08	705.95	579.03	82.65	2	2845	0
c10k	0.00	222.22	31.89	35.89	51.79	1	846	0
xppm	0.00	16194.61	3830.71	4593.32	57.17	1	380	0
xerpg1	0.00	11030.72	2331.51	2704.89	62.80	1	667	0
xerpg2	0.00	8628.60	1704.29	1914.49	66.67	1	930	0

Scenario Hx-9 (Hexane, high release rate, horizontal release near ground D5)

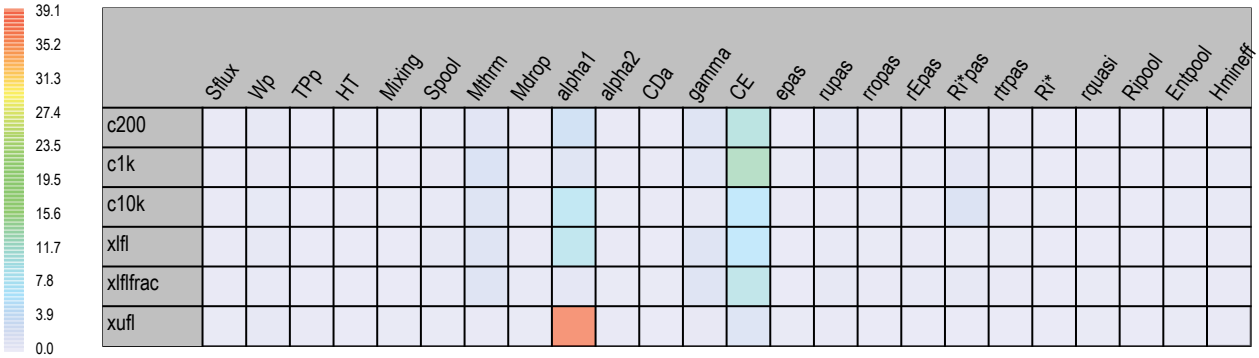
First order indices



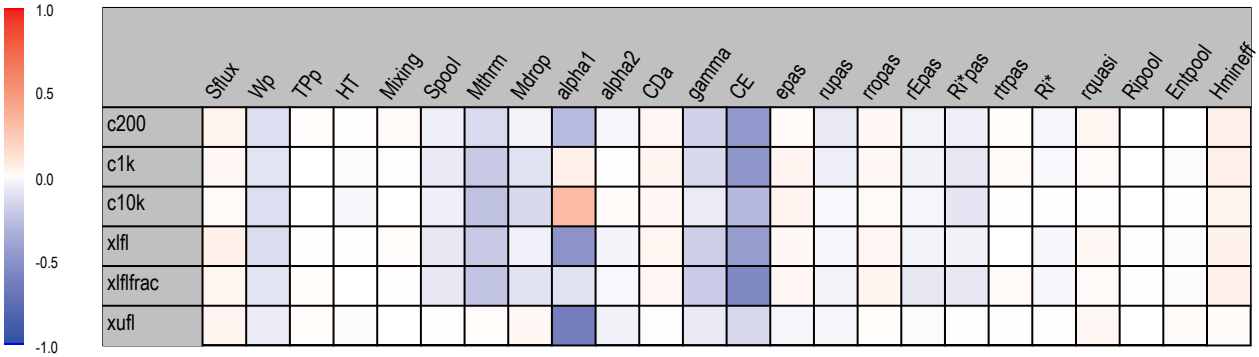
Total indices



Influence (CVSi)



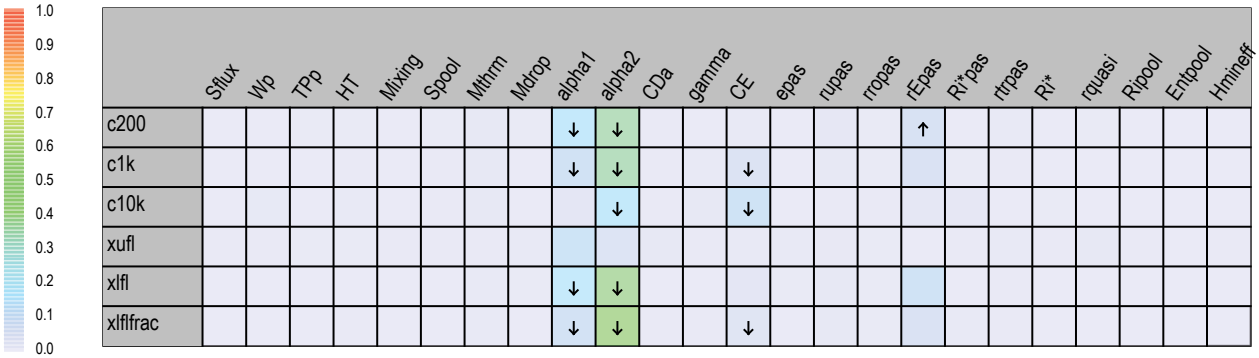
Correlation



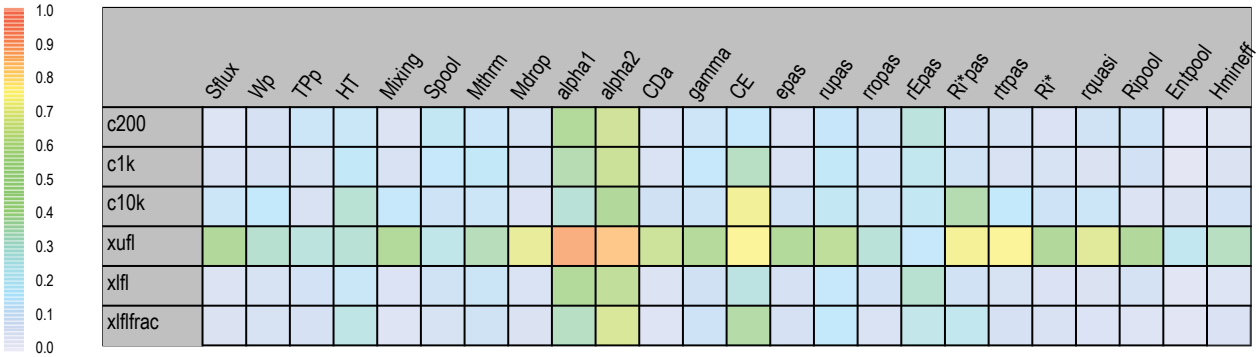
Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
c200	1171.61	70907.18	7613.17	6809.80	48.82	5	0	0
c1k	643.52	28926.03	2811.30	2532.28	41.55	5	0	0
c10k	142.95	7314.49	633.22	585.91	40.97	5	0	0
xlflfrac	8.35	628.76	127.58	121.10	26.19	5	0	0
xlfl	6.15	331.87	75.52	72.95	30.97	5	0	0
xufl	0.03	94.84	13.39	10.67	59.25	5	0	0

Scenario Hx-10 (Hexane, high release rate, horizontal elevated release D5)

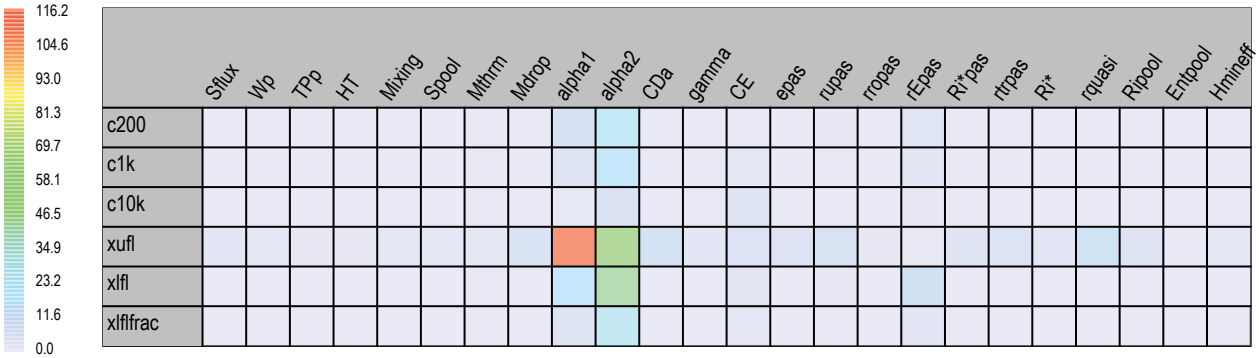
First order indices



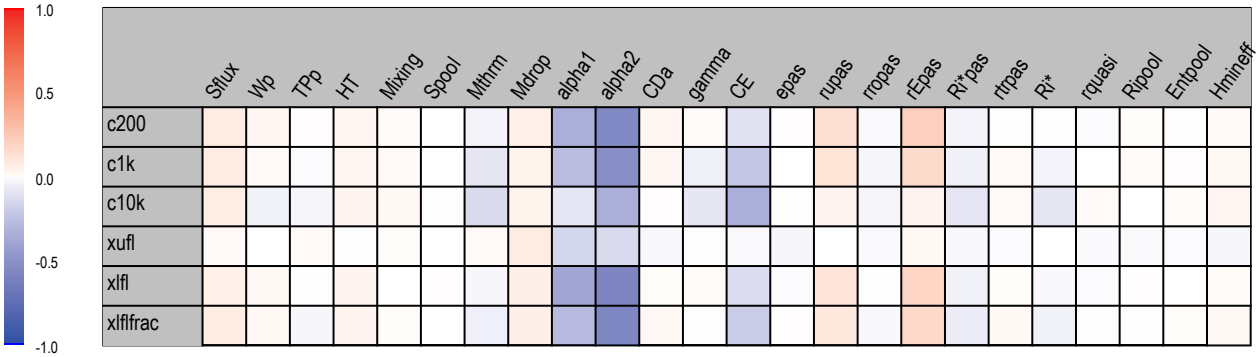
Total indices



Influence (CVSi)



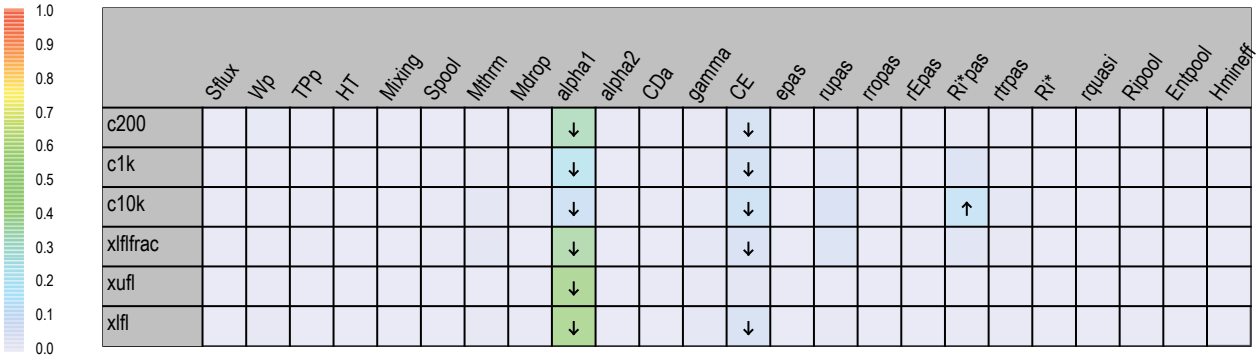
Correlation



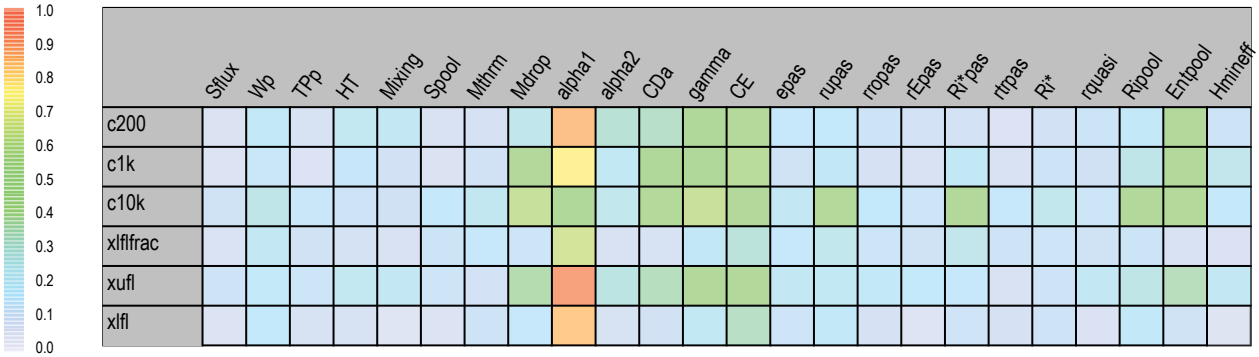
Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
c200	0.00	114240.70	7993.46	6895.02	60.91	6	1	0
c1k	0.00	34677.10	4458.60	4070.14	50.03	6	1	0
c10k	0.00	18967.59	1553.65	1439.76	45.97	6	1	0
xlflfrac	0.00	1728.19	155.37	147.99	55.84	6	2	0
xlfl	0.00	863.97	54.54	51.06	112.27	6	8776	0
xufl	0.00	117.74	0.50	0.00	995.14	6	19775	0

Scenario Hx-11 (Hexane, high release rate, horizontal release near ground F3)

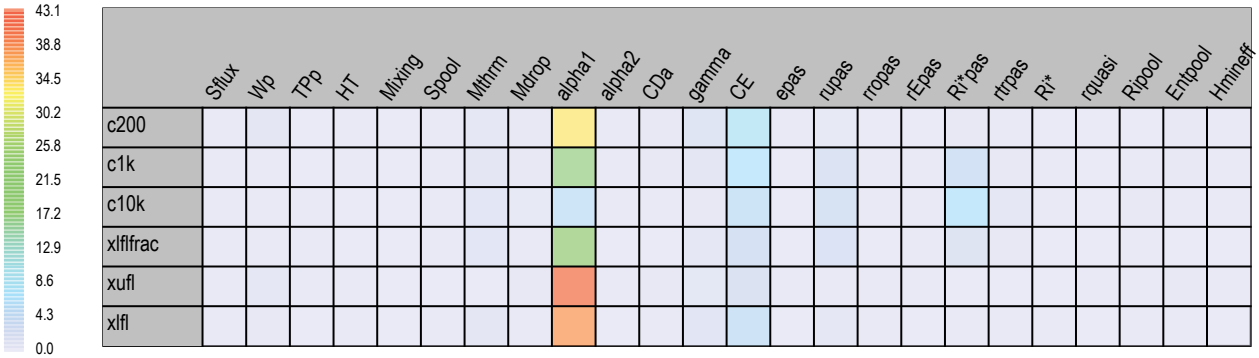
First order indices



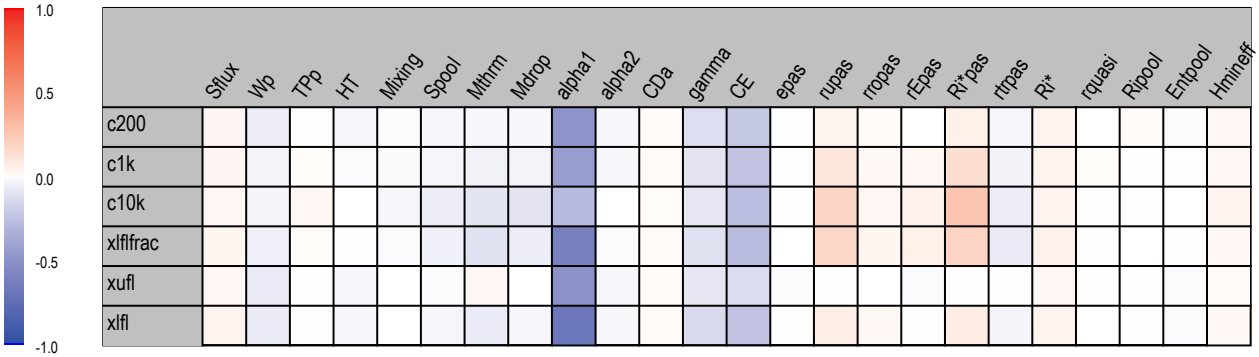
Total indices



Influence (CVSi)



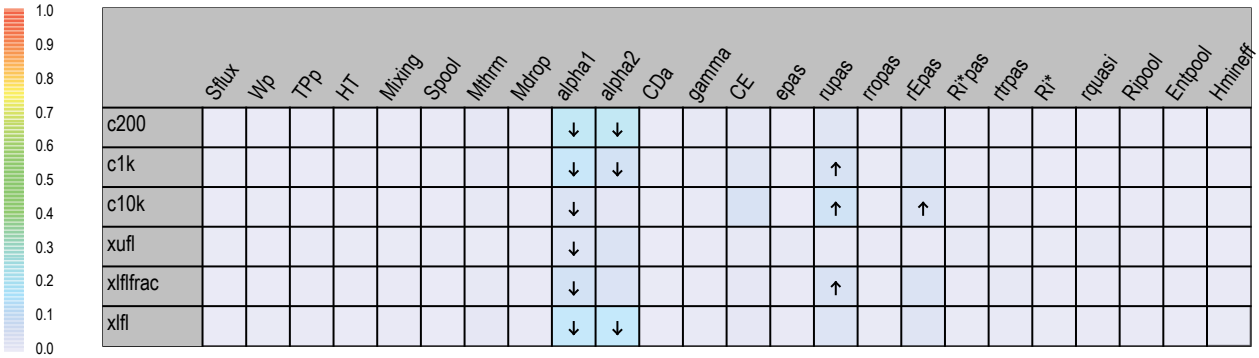
Correlation



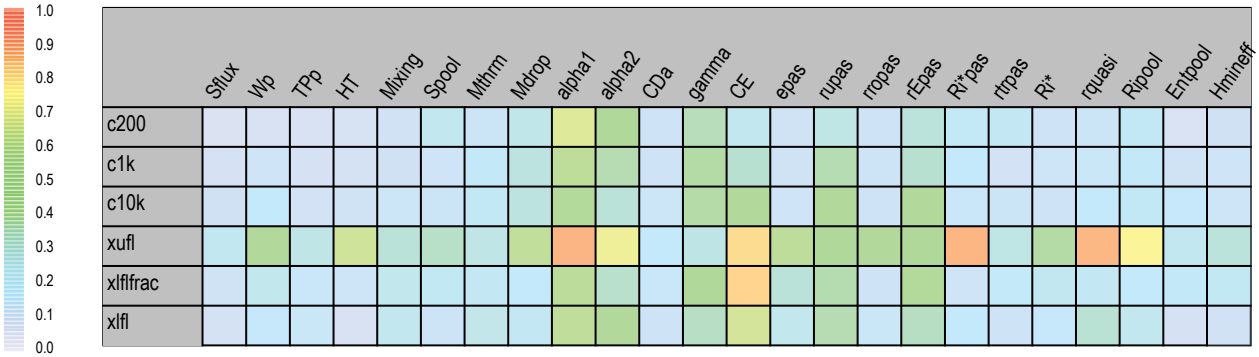
Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
c200	384.33	298594.70	9963.84	7532.45	99.02	13	0	0
c1k	341.31	144896.70	5401.98	4585.49	76.95	13	0	0
c10k	176.33	49630.53	2224.99	2140.47	50.95	13	0	0
xlflfrac	4.02	1274.04	189.56	166.31	52.55	13	0	0
xlfl	3.13	1054.10	85.20	65.28	70.42	13	0	0
xufl	0.47	305.97	13.43	9.84	96.41	13	0	0

Scenario Hx-12 (Hexane, high release rate, horizontal elevated release F3)

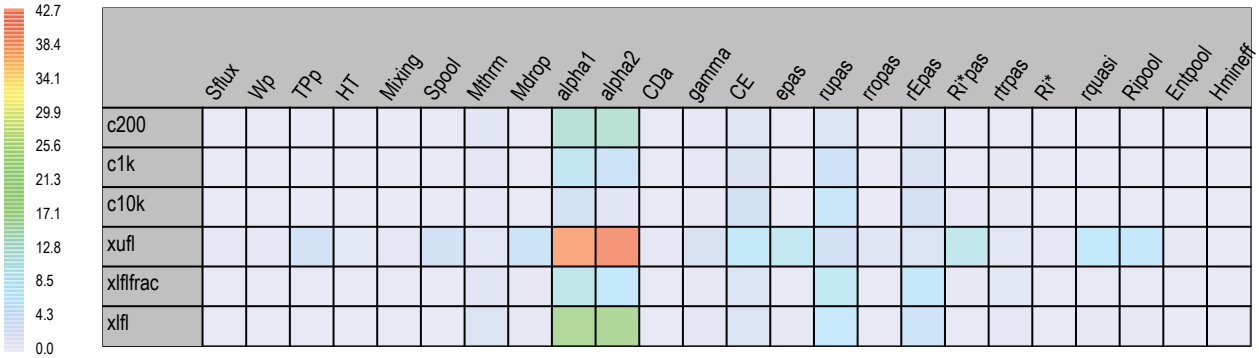
First order indices



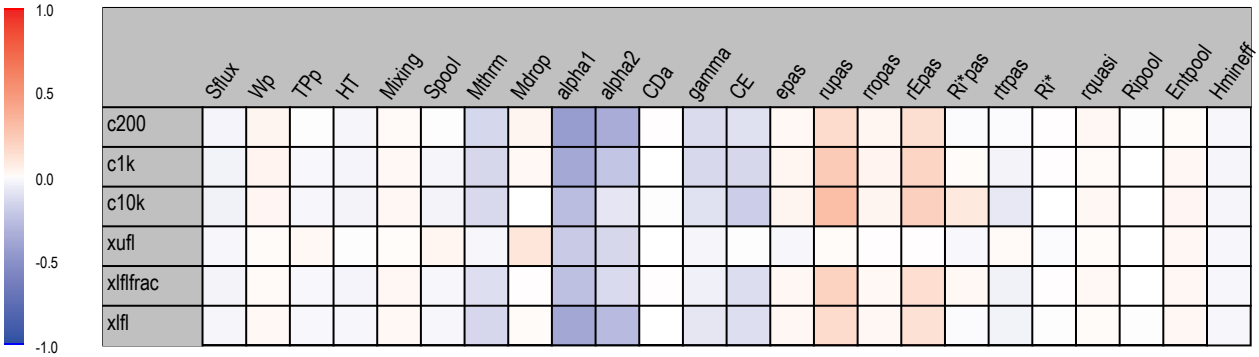
Total indices



Influence (CVSi)



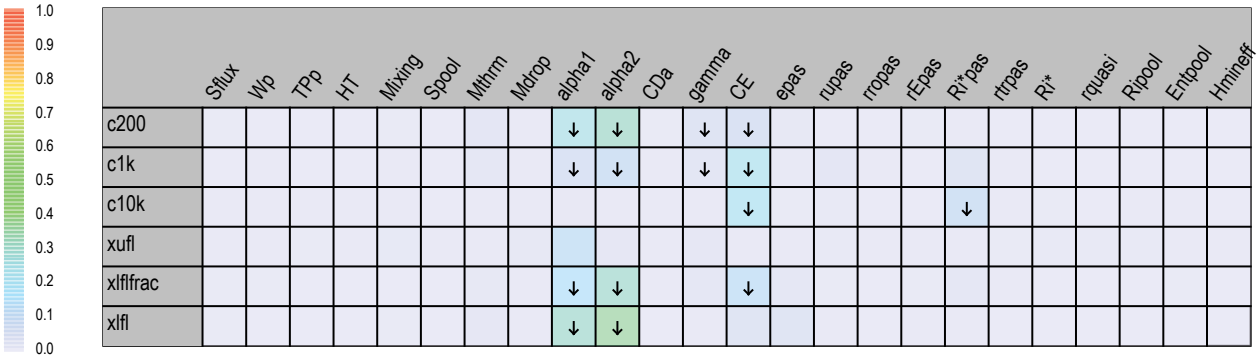
Correlation



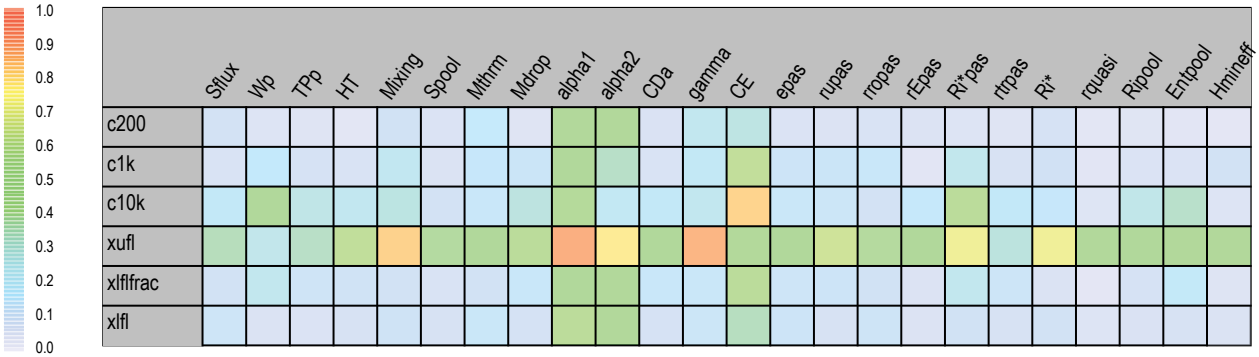
Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
c200	0.00	135432.60	8557.22	7032.44	68.91	3	1	0
c1k	0.00	80595.95	5778.49	4714.46	62.96	3	1	0
c10k	0.00	36359.88	3142.03	2615.18	58.73	3	1	0
xlflfrac	0.00	23594.47	244.42	167.33	116.00	3	1	0
xlfl	0.00	3997.03	80.05	49.56	126.01	3	3644	0
xufl	0.00	220.15	0.92	0.00	744.01	3	19584	0

Scenario Hx-20 (Hexane, high release rate, horizontal elevated release A3)

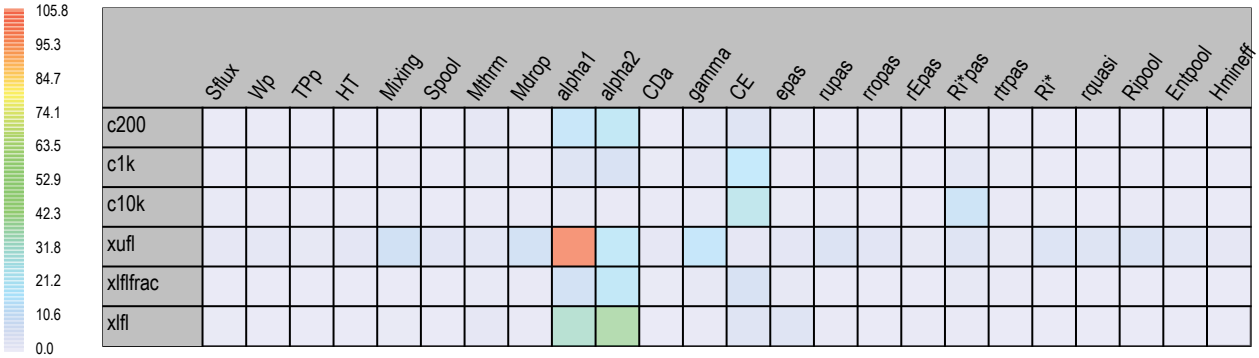
First order indices



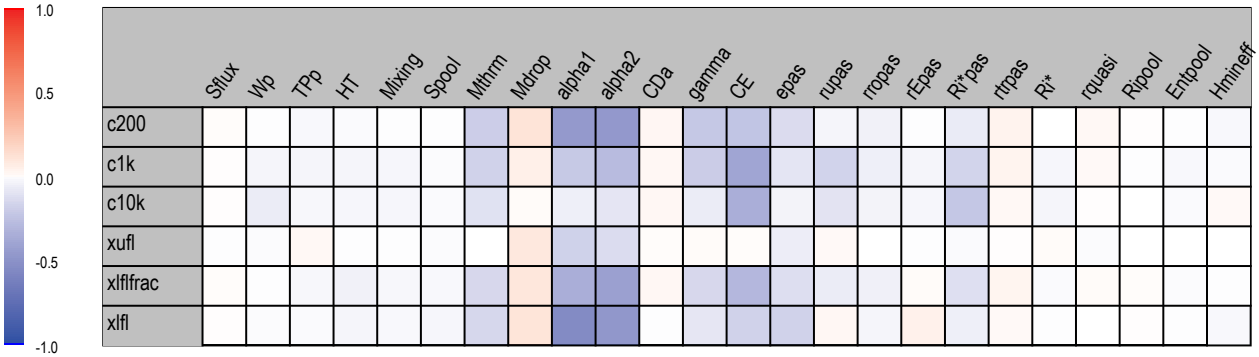
Total indices



Influence (CVSi)



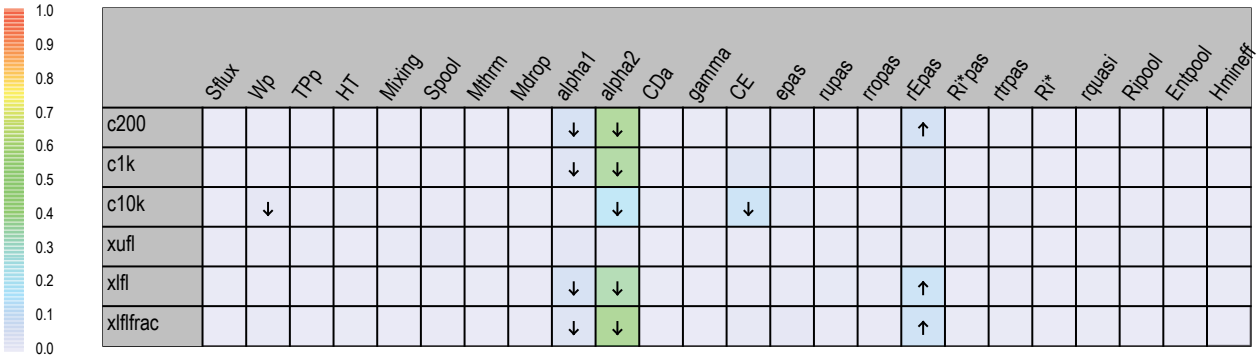
Correlation



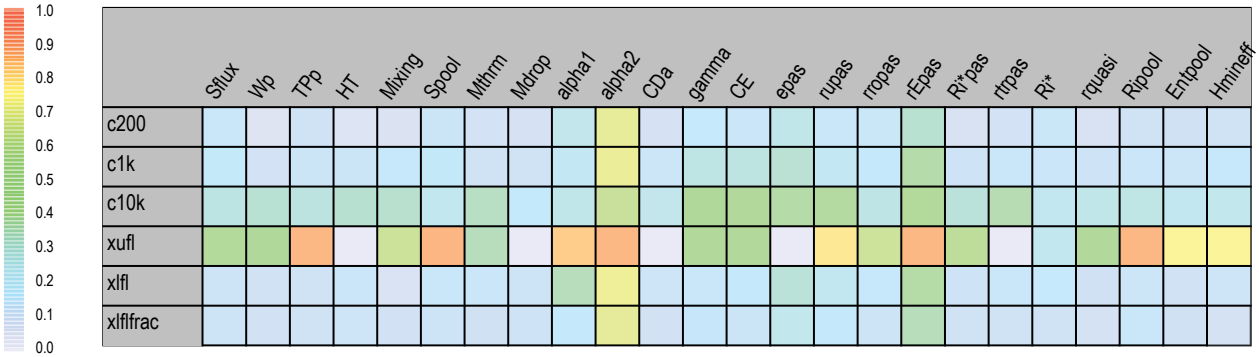
Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
c200	245.16	40838.67	6063.54	4828.09	65.44	2	0	0
c1k	119.20	26336.65	2512.11	1835.68	77.15	2	0	0
c10k	45.59	16101.95	540.00	369.20	130.06	2	0	0
xlflfrac	15.68	1373.19	107.72	92.58	65.51	2	0	0
xlfl	0.00	790.49	43.05	40.09	113.10	2	7444	0
xufl	0.00	71.80	0.53	0.00	895.14	2	19739	0

Scenario Hx-19 (Hexane, high release rate, horizontal elevated release D9)

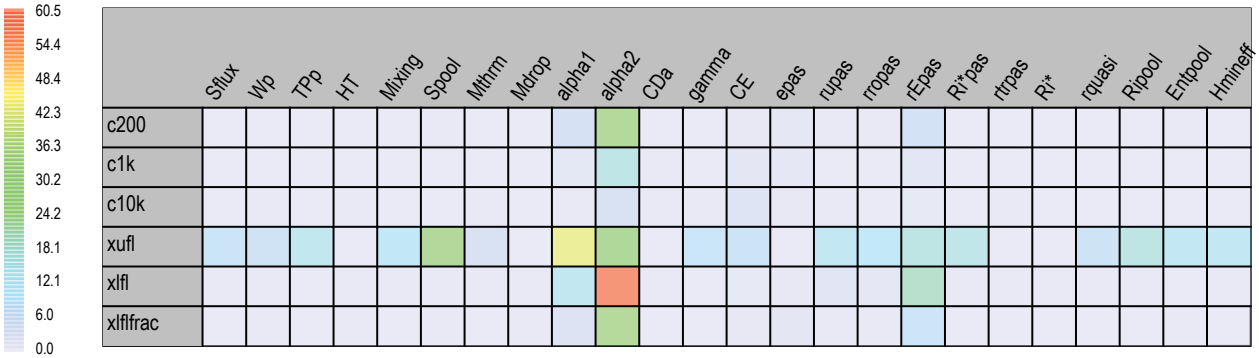
First order indices



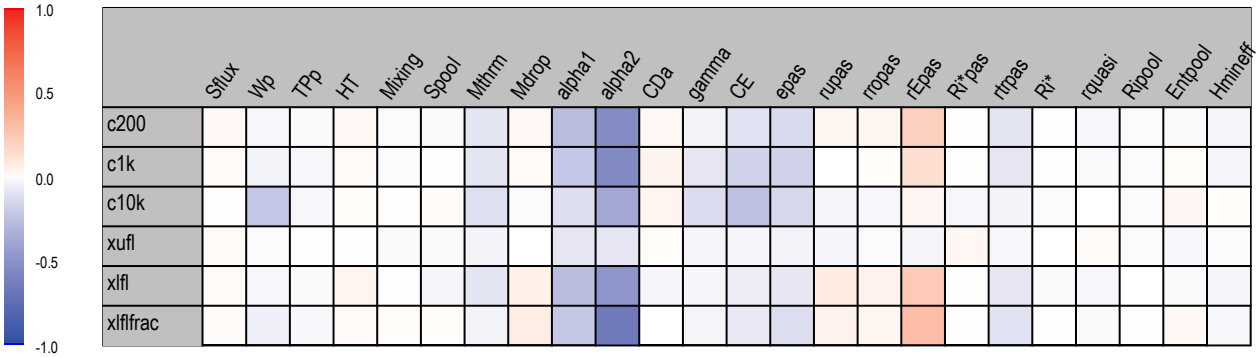
Total indices



Influence (CVSi)



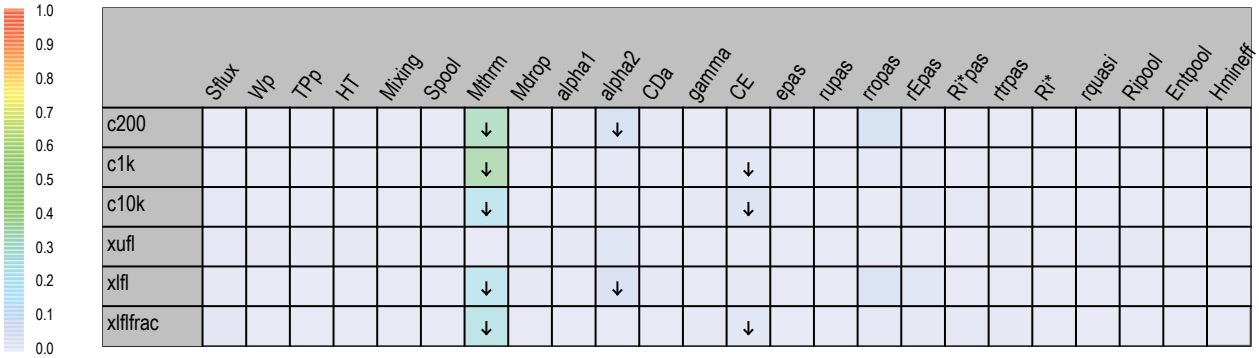
Correlation



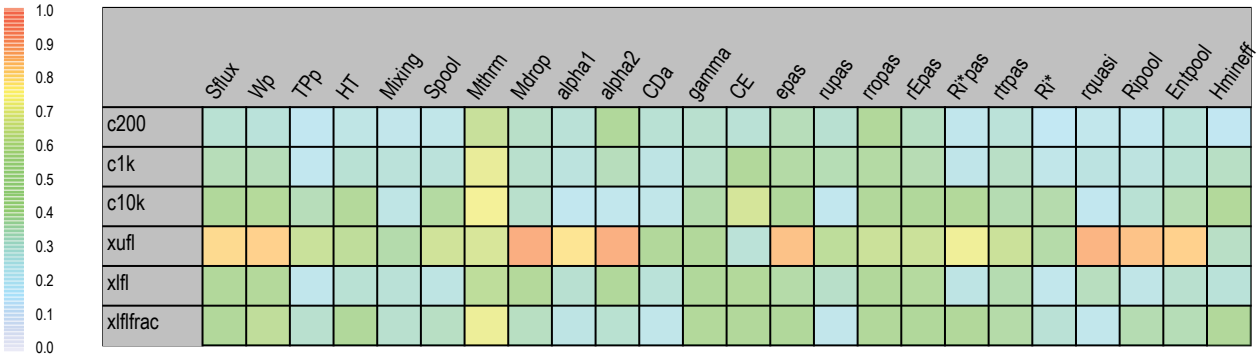
Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
c200	0.00	90048.14	7236.80	6020.26	63.19	7	5	0
c1k	0.00	28502.49	3512.85	3288.45	40.50	7	5	0
c10k	0.00	5501.05	1007.40	981.87	25.84	7	7	0
xlflfrac	0.00	518.61	106.12	124.63	73.54	7	5754	0
xlfl	0.00	316.93	30.70	0.00	168.06	7	14397	0
xufl	0.00	110.15	0.24	0.00	1673.95	7	19909	0

Scenario Hx-13 (Hexane, high release rate, vertical release near ground D5)

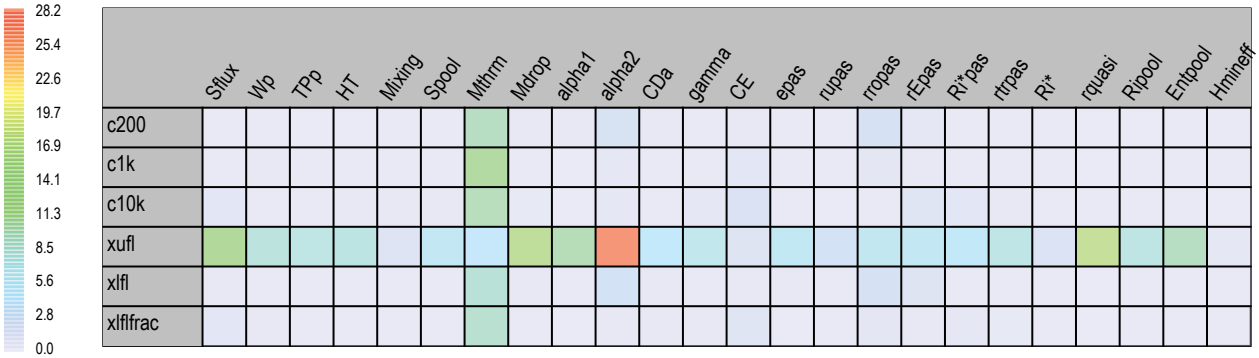
First order indices



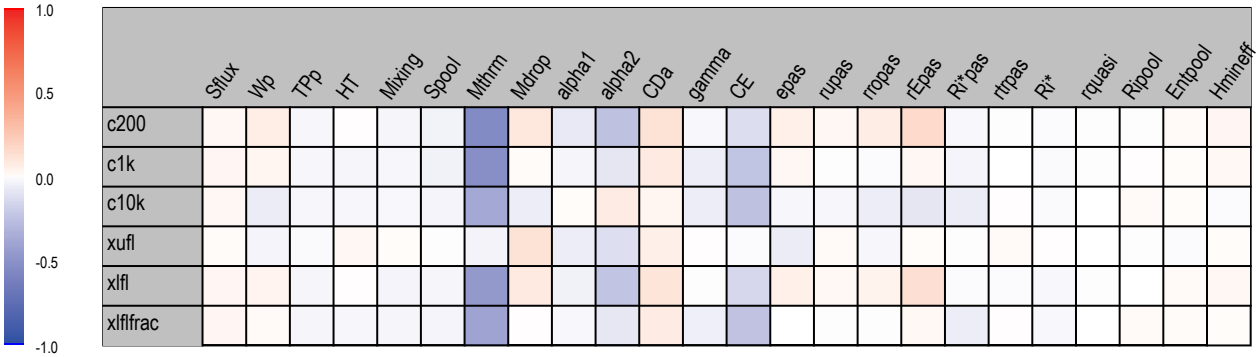
Total indices



Influence (CVSi)



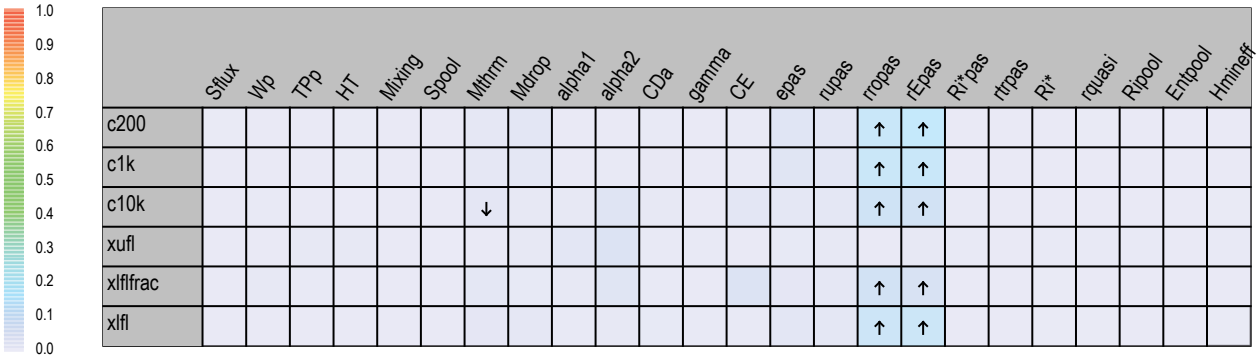
Correlation



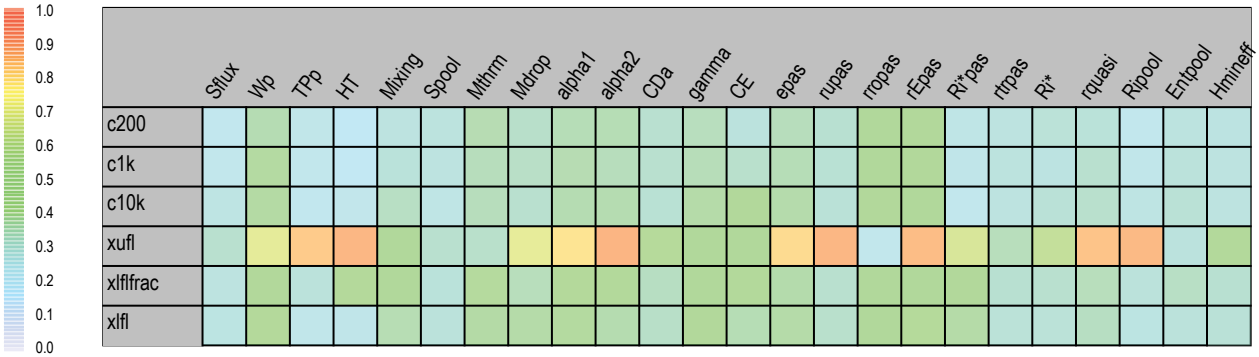
Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
c200	52.55	54207.03	11298.72	11073.58	29.22	29	0	0
c1k	30.12	27046.27	5470.57	5017.64	30.65	29	0	0
c10k	12.94	12242.90	1583.85	1411.42	42.89	29	0	0
xlflfrac	6.91	2098.13	204.28	192.76	34.93	29	0	0
xlfl	6.01	665.28	105.68	105.02	37.29	29	0	0
xufl	0.00	55.63	0.35	0.00	803.80	29	19604	0

Scenario Hx-15 (Hexane, high release rate, vertical release near ground F3)

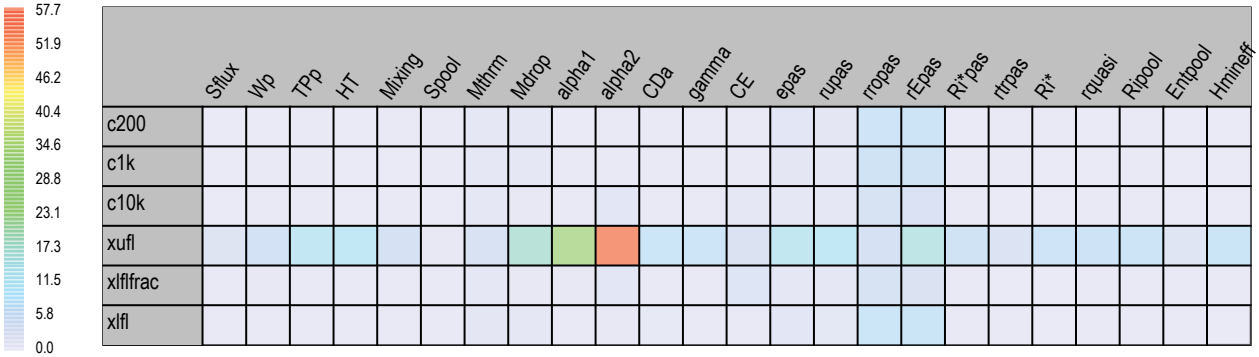
First order indices



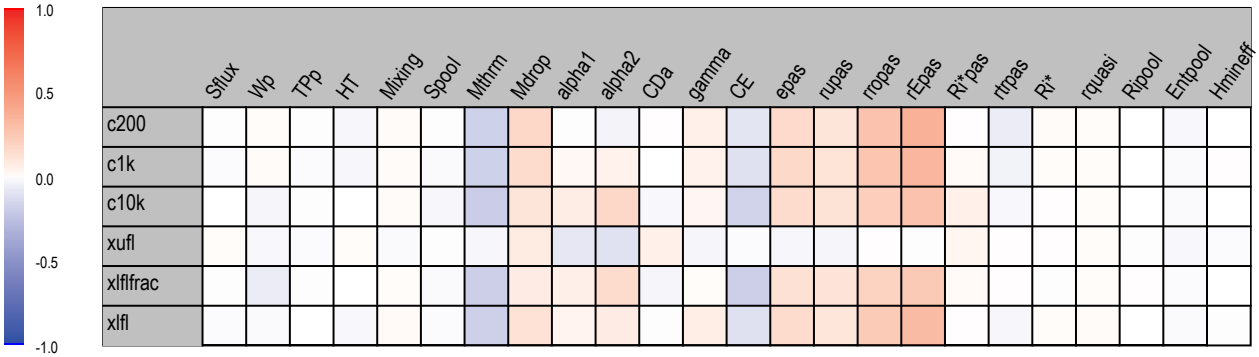
Total indices



Influence (CVSi)



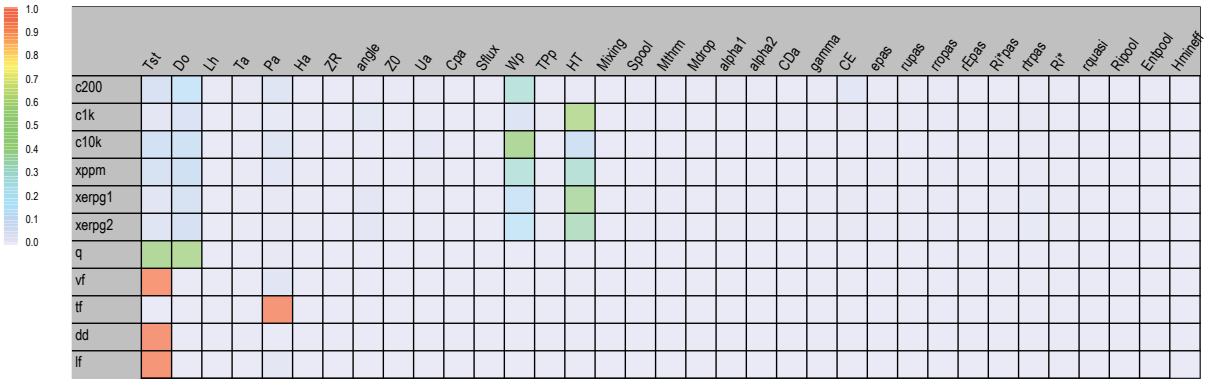
Correlation



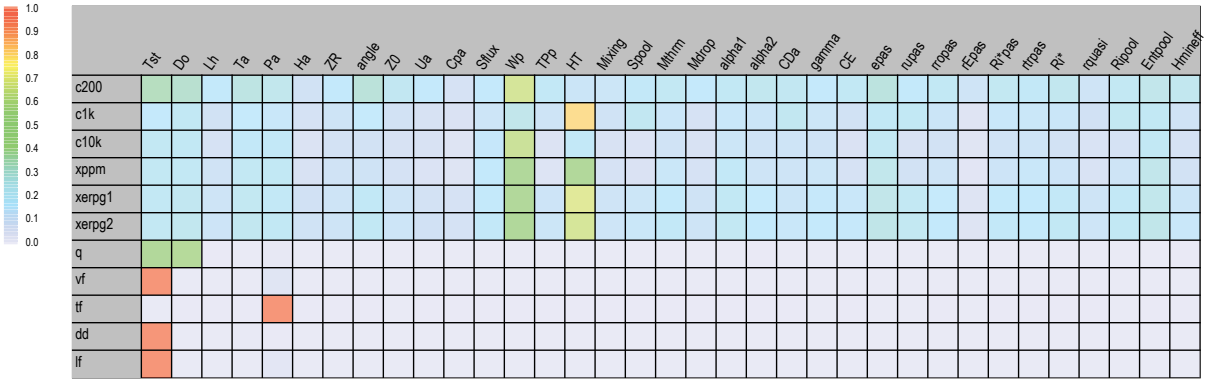
Output	Min	Max	Mean	Median	CV	Errors	=0	=50k
c200	0.00	106786.10	19542.68	21645.37	45.44	25	2	0
c1k	0.00	42266.18	13323.26	14981.41	44.69	25	2	0
c10k	0.00	33428.02	6126.96	6887.13	41.57	25	2	0
xlflfrac	0.00	6763.61	556.11	643.78	47.60	25	2	0
xlfl	0.00	4227.58	264.88	320.25	58.66	25	2	0
xufl	0.00	139.17	0.21	0.00	1068.51	25	19706	0

Local analysis results for Ammonia · Phase 1

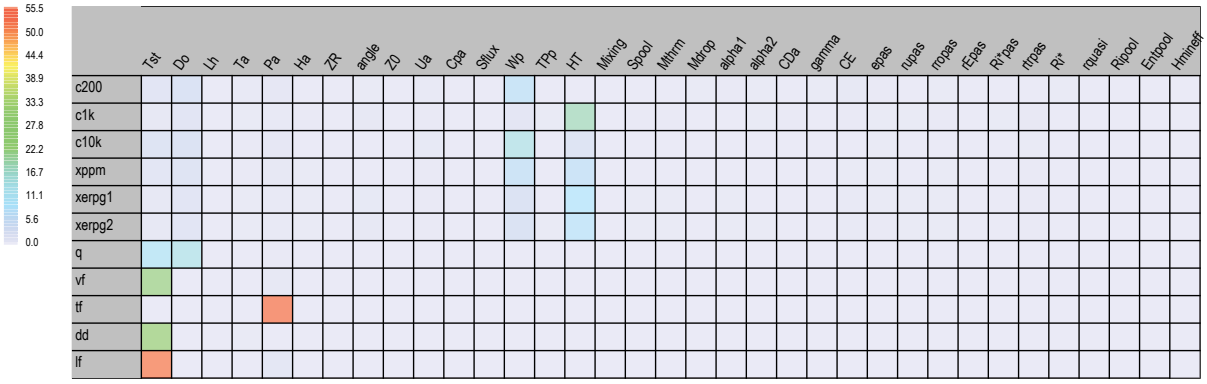
First order indices

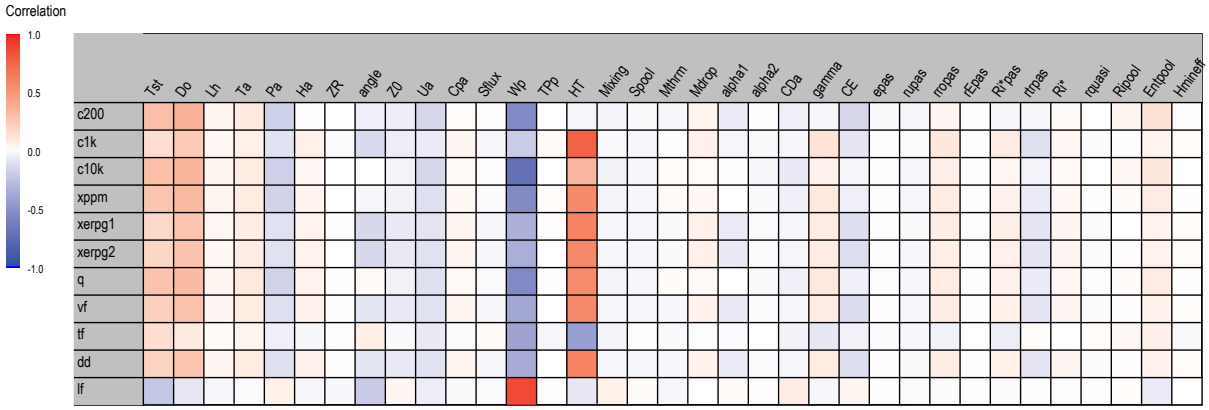


Total indices



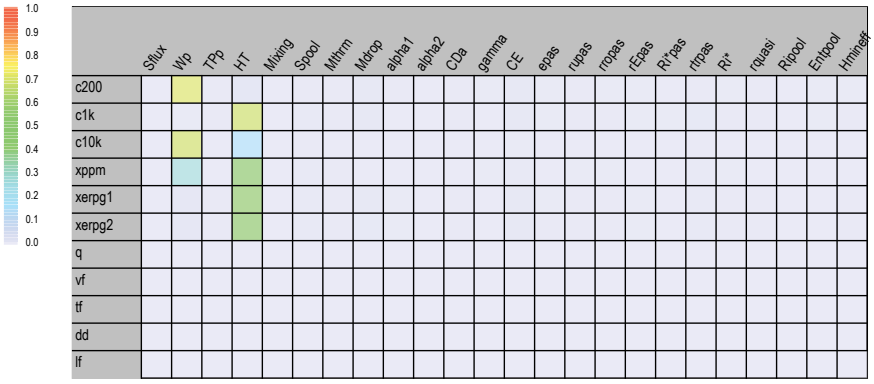
Influence (CVSi)



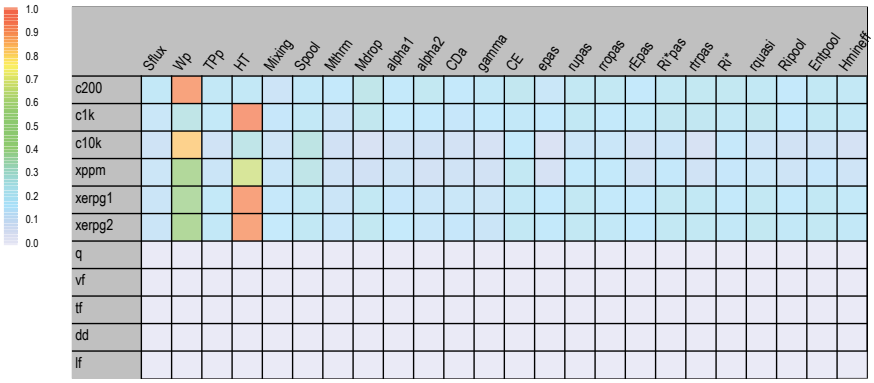

Correlation
1.0
0.5
0.0
-0.5
-1.0
Tst
Do
Lh
Ta
Pa
Ha
ZR
angle
Z0
Ua
Cpa
Sflux
Wp
TPp
HT
Mixing
Spool
Mthrm
Mdrop
alpha1
alpha2
CDa
gamma
CE
epas
rupas
ropas
rEpas
Ri*pas
rtrpas
Ri*
rquasi
Ripool
Entpool
Hmineff
c200
c1k
c10k
xppm
xerpg1
xerpg2
q
vf
tf
dd
lf

Local analysis results for Ammonia · Phase 2

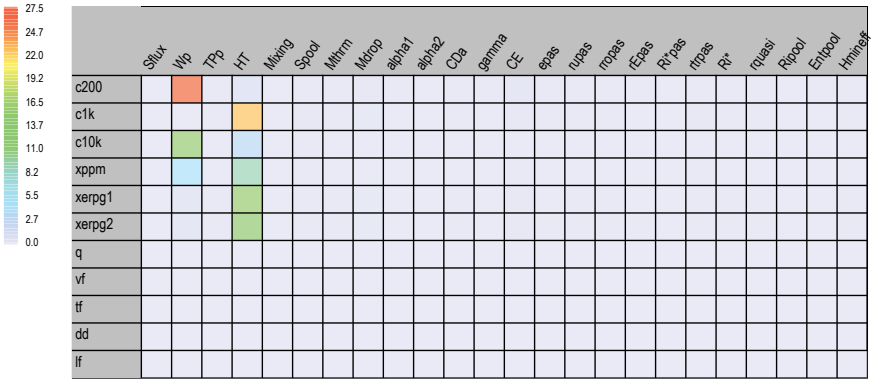
First order indices



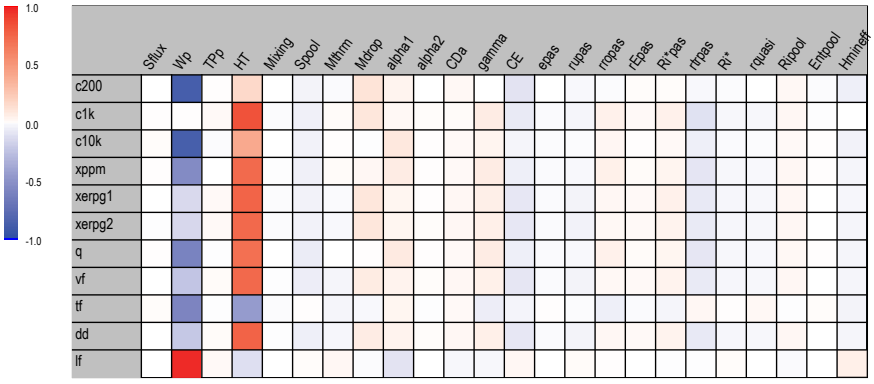
Total indices



Influence (CVSi)

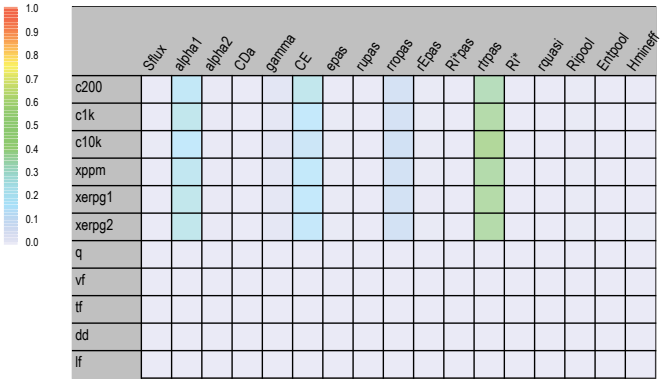


Correlation

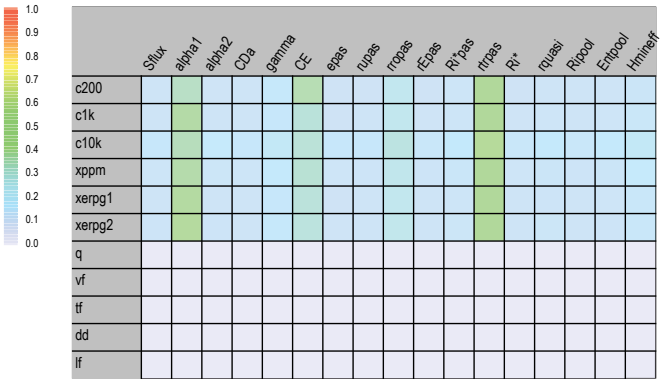


Local analysis results for Ammonia · Phase 3

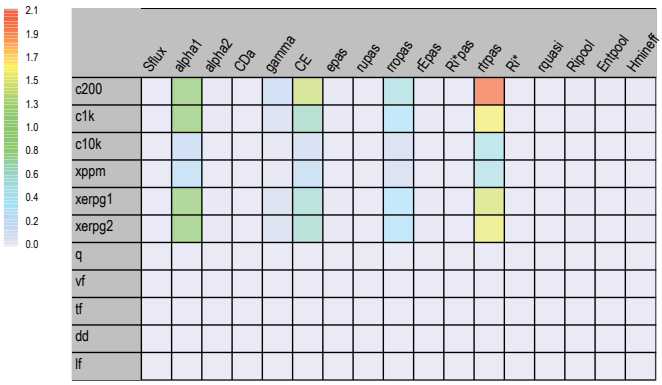
First order indices



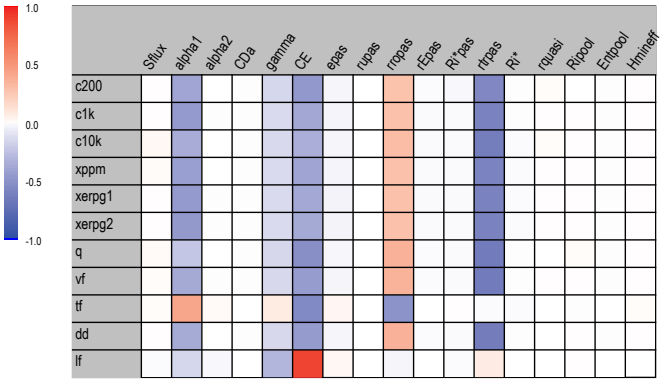
Total indices



Influence (CVSi)

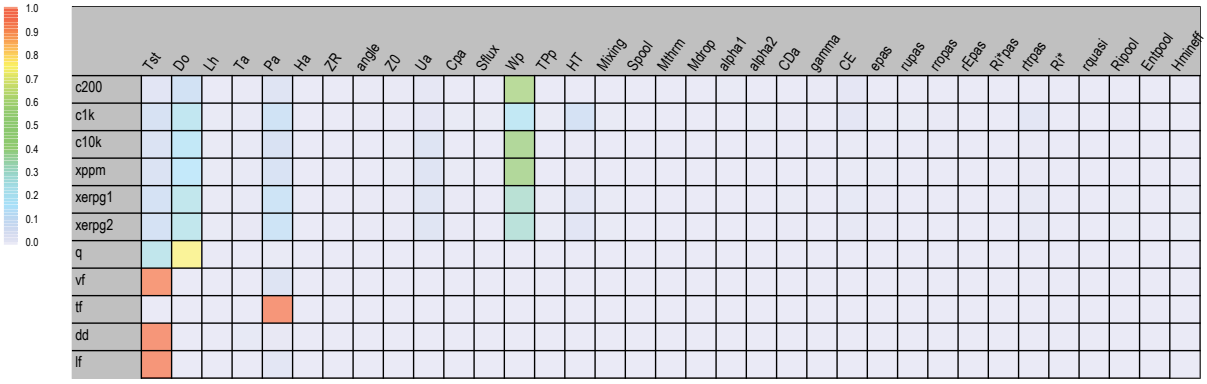


Correlation

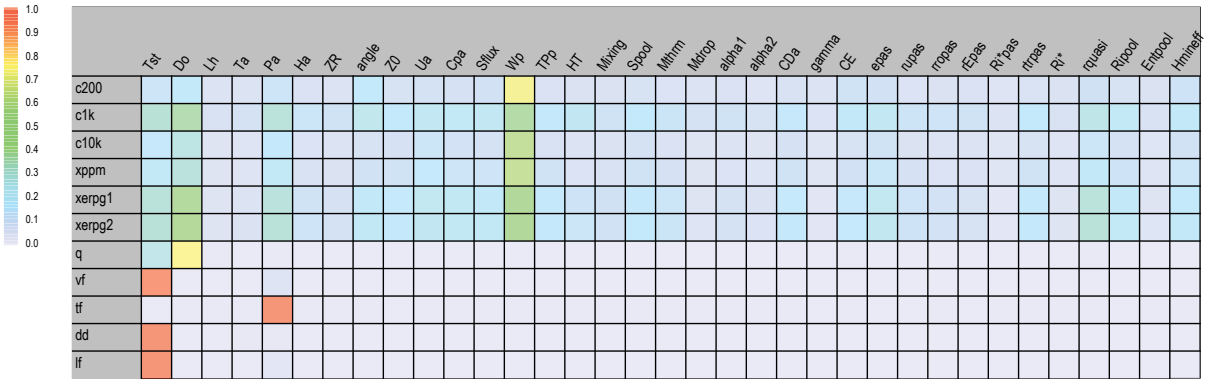


Local analysis results for Chlorine · Phase 1

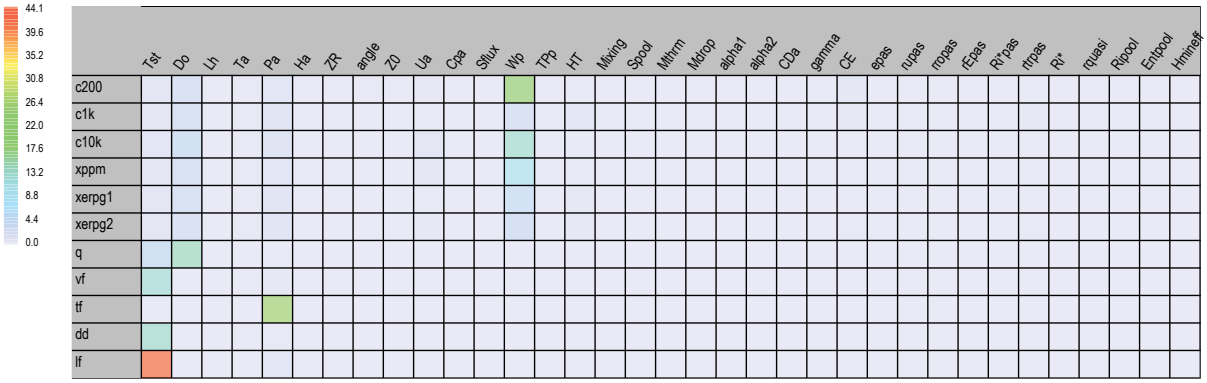
First order indices



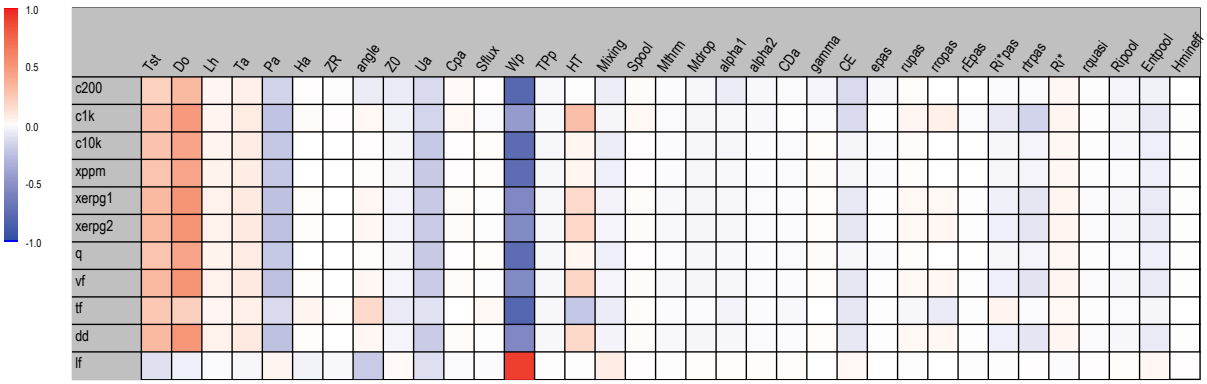
Total indices



Influence (CVSi)

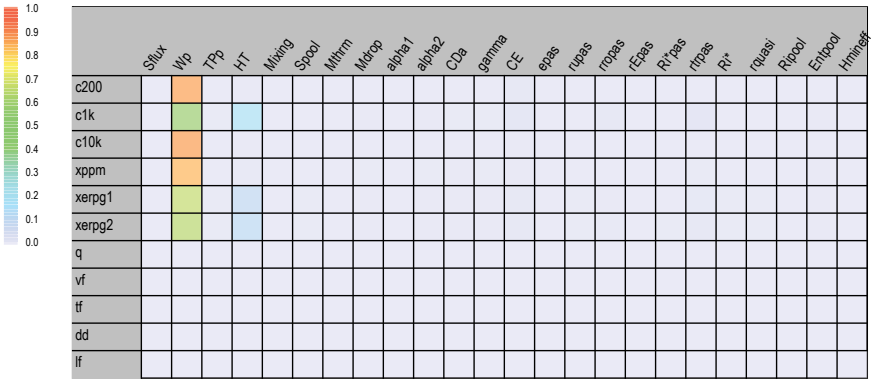


Correlation

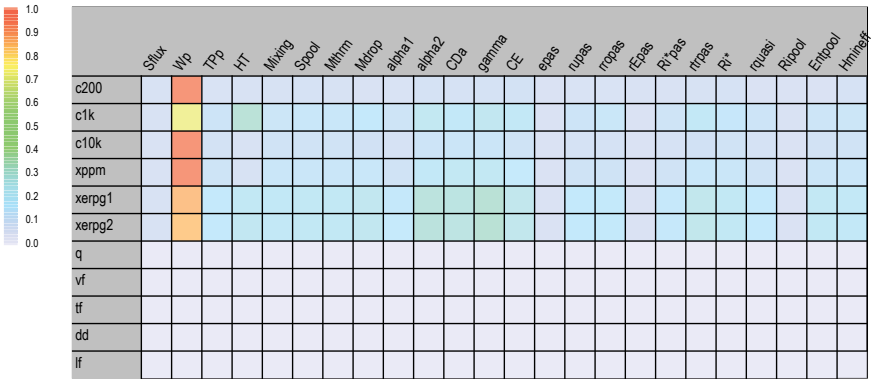


Local analysis results for Chlorine · Phase 2

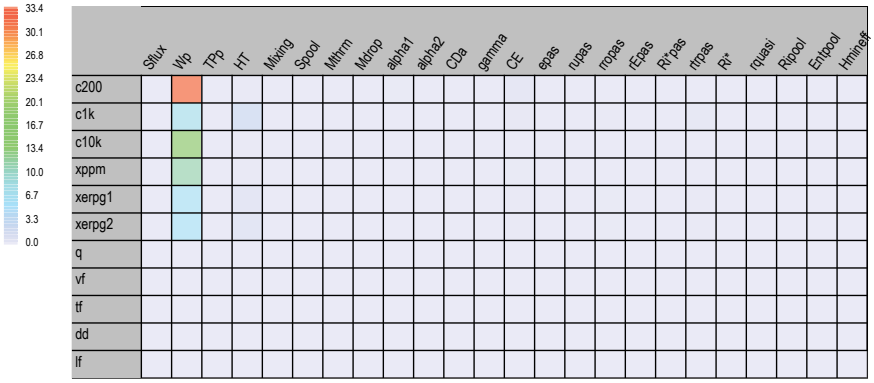
First order indices



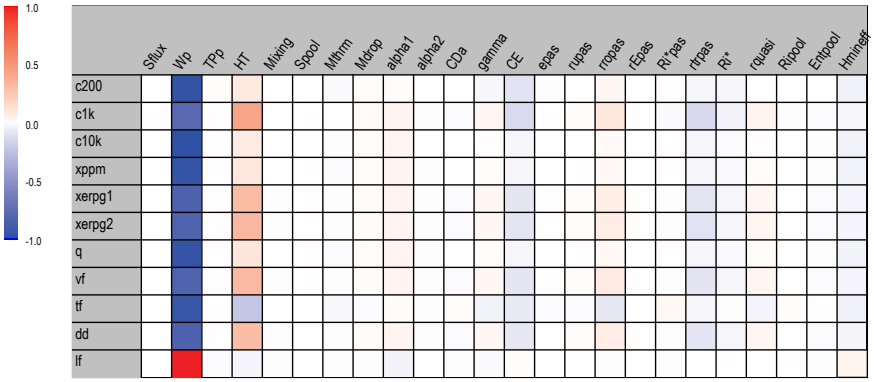
Total indices



Influence (CVSi)

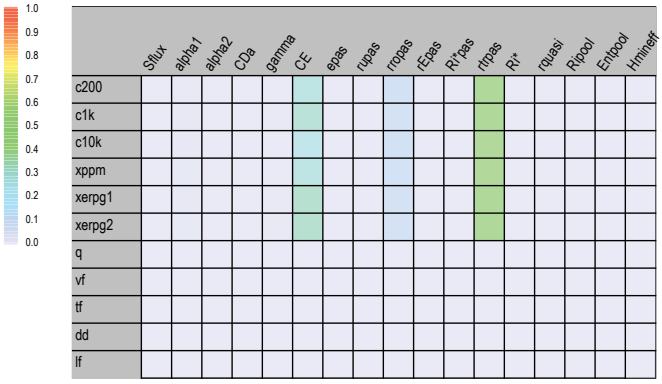


Correlation

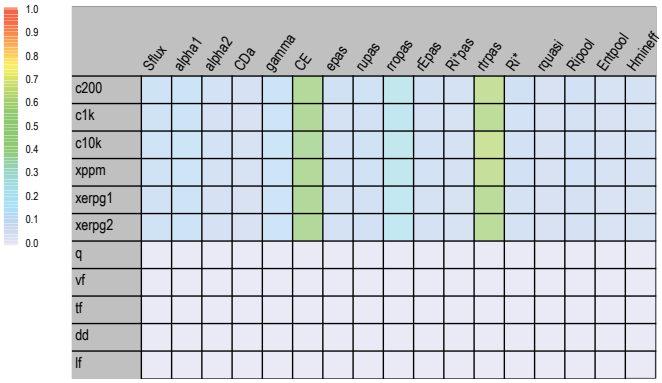


Local analysis results for Chlorine · Phase 3

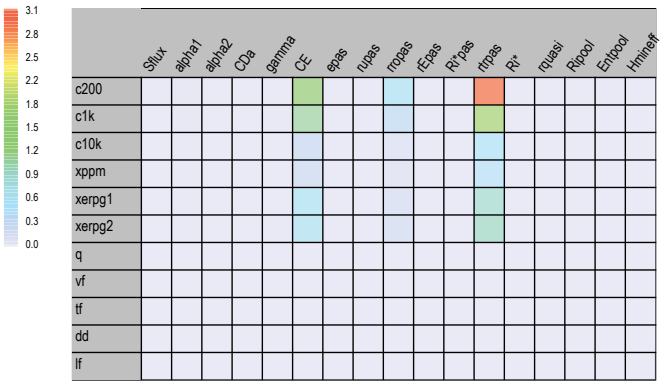
First order indices



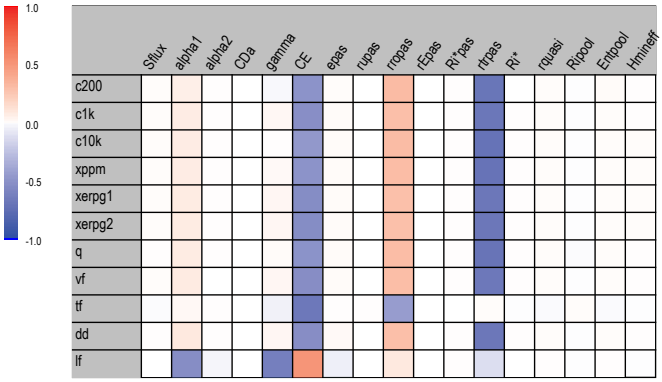
Total indices



Influence (CVSi)

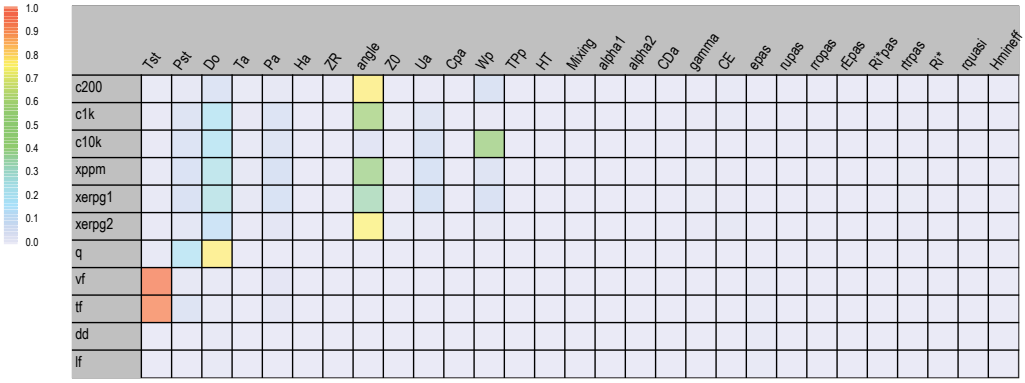


Correlation

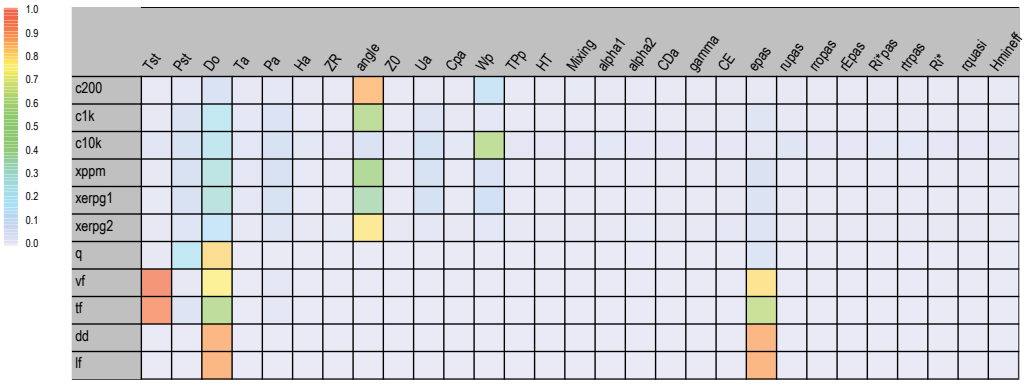


Local analysis results for Nitrogen oxide · Phase 1

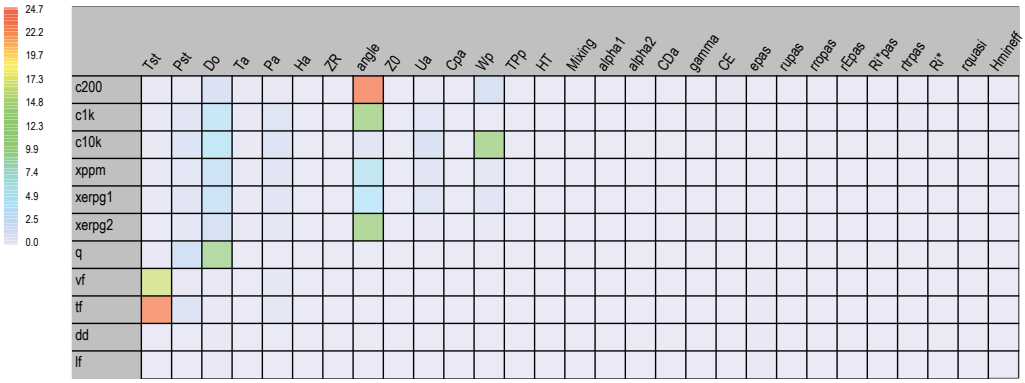
First order indices



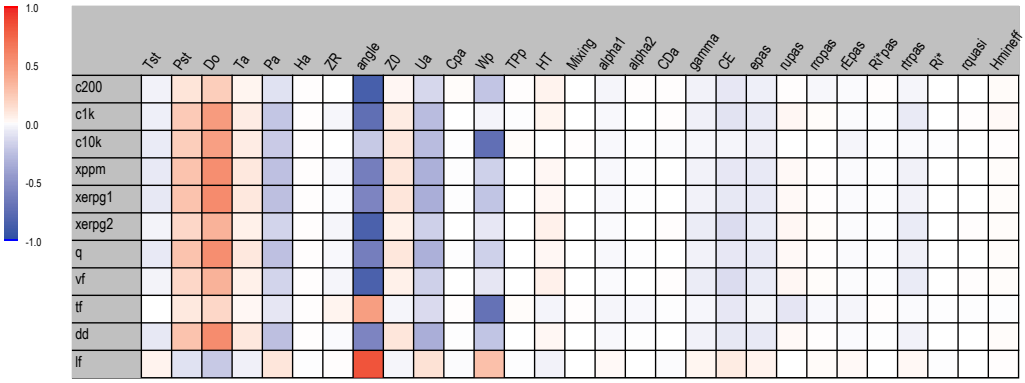
Total indices



Influence (CVSi)

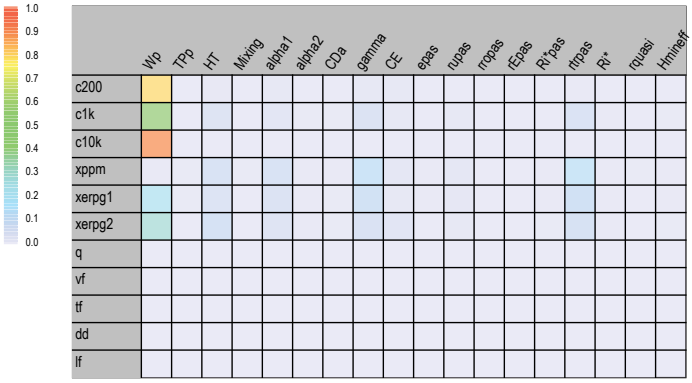


Correlation

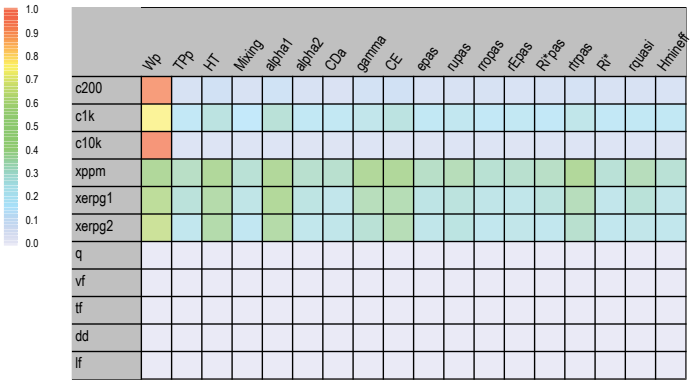


Local analysis results for Nitrogen oxide · Phase 2

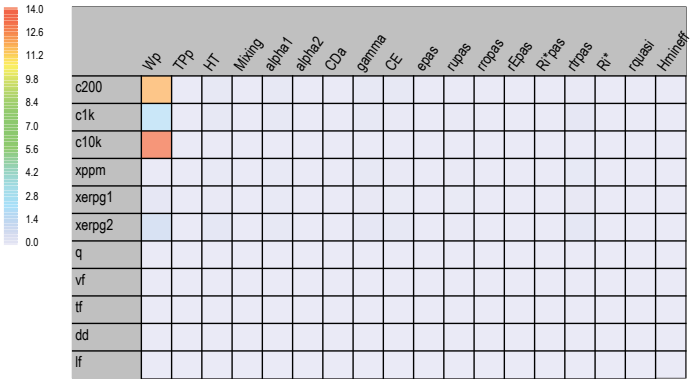
First order indices



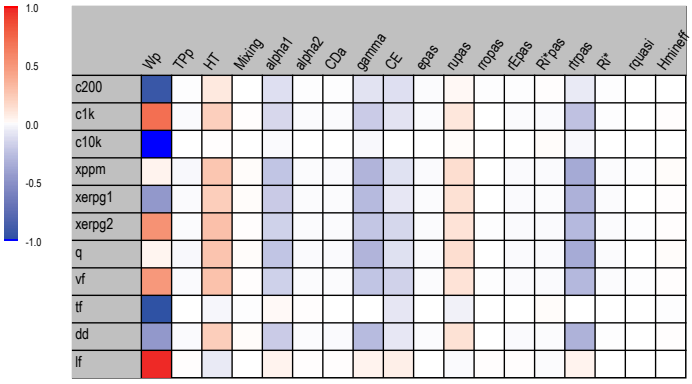
Total indices



Influence (CVSi)

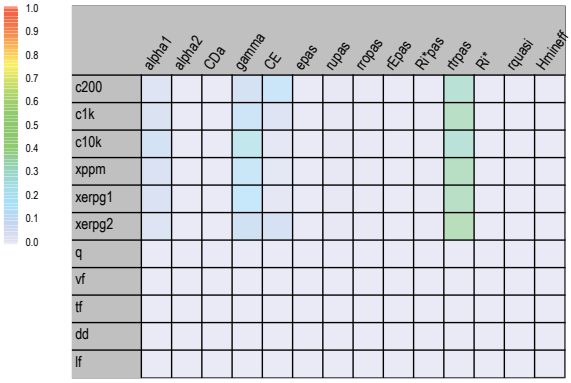


Correlation

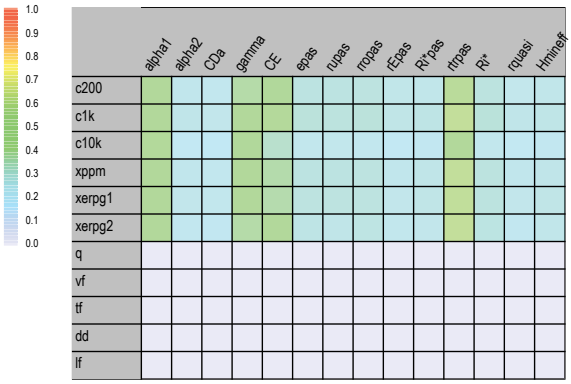


Local analysis results for Nitrogen oxide · Phase 3

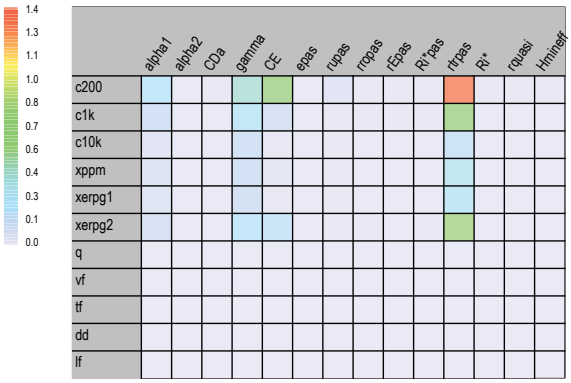
First order indices



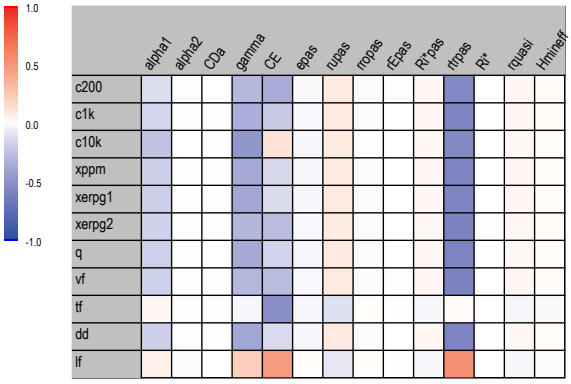
Total indices



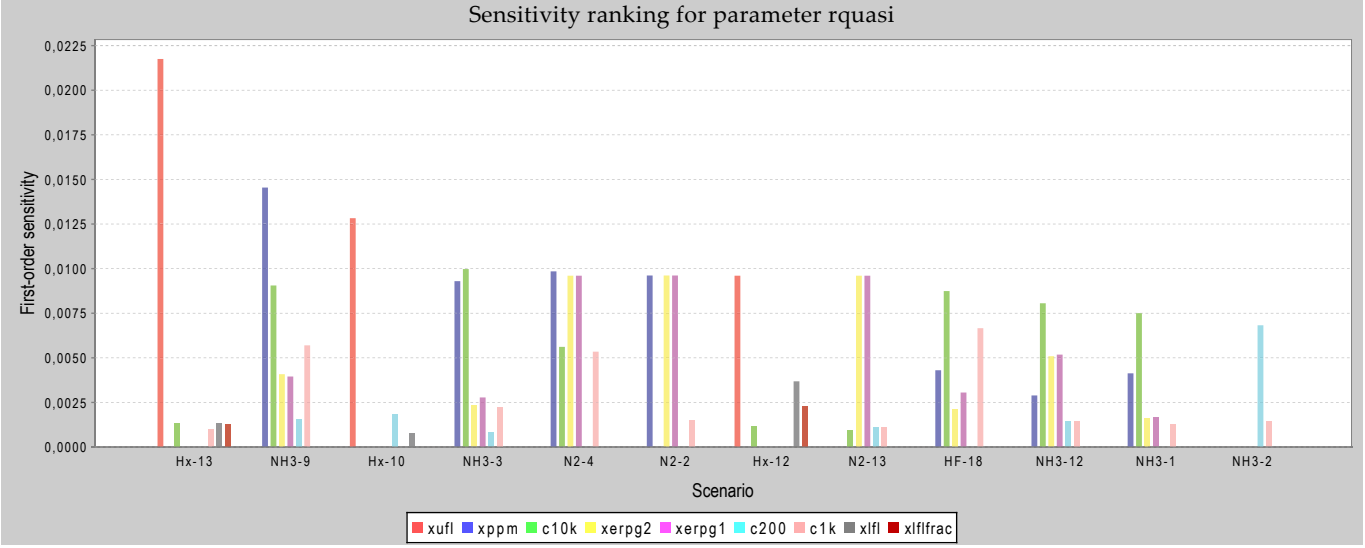
Influence (CVSi)

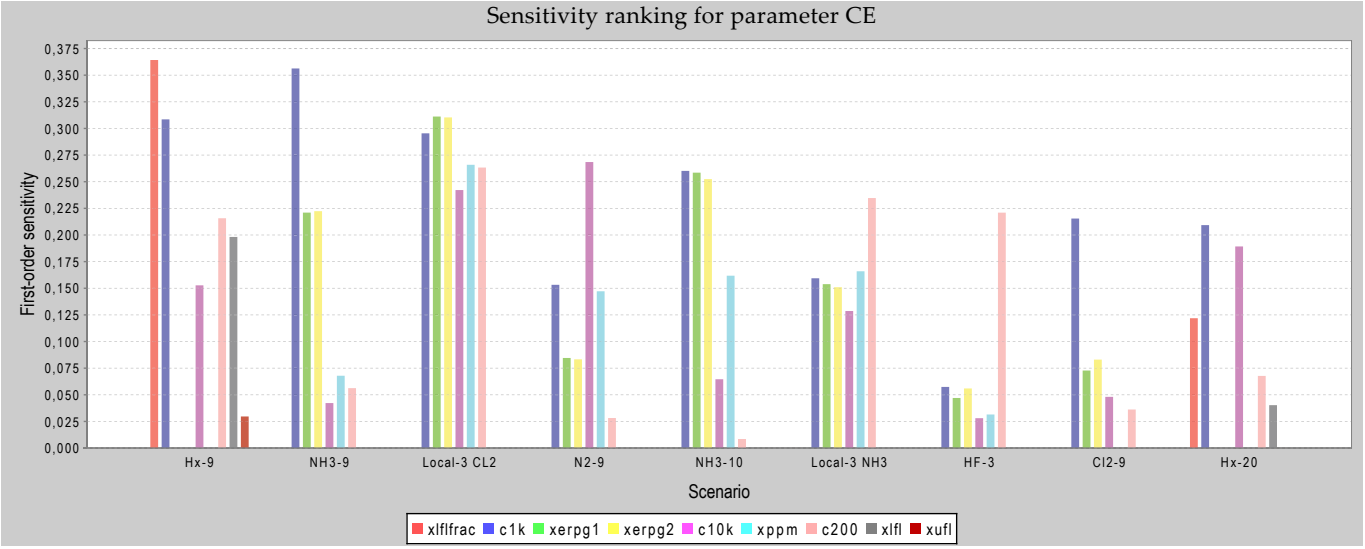


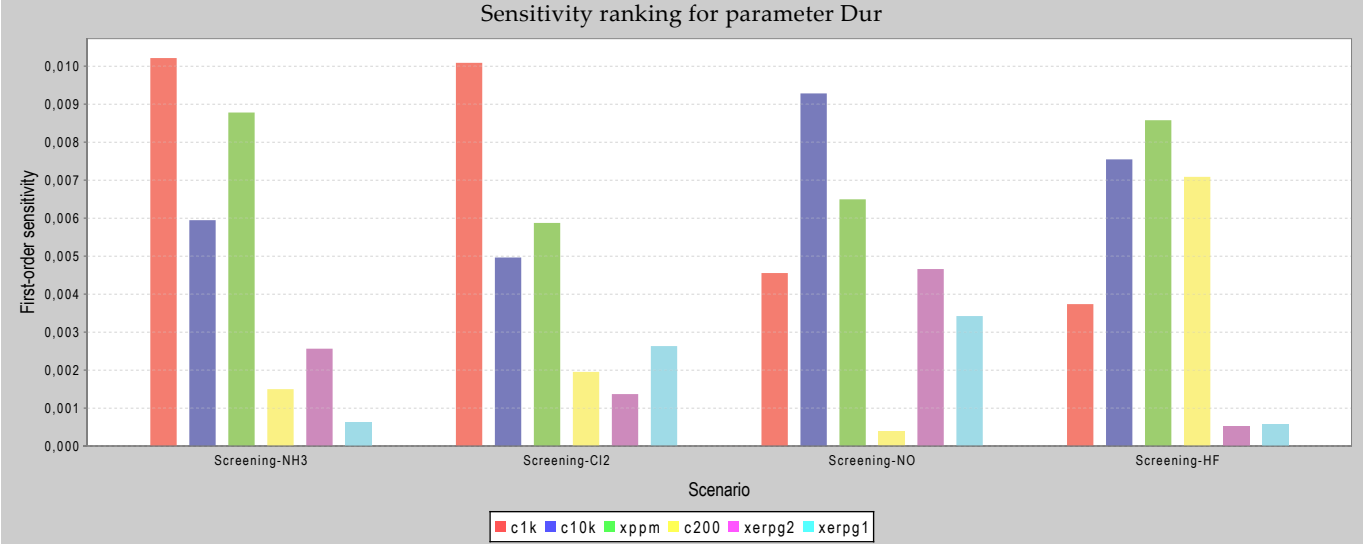
Correlation

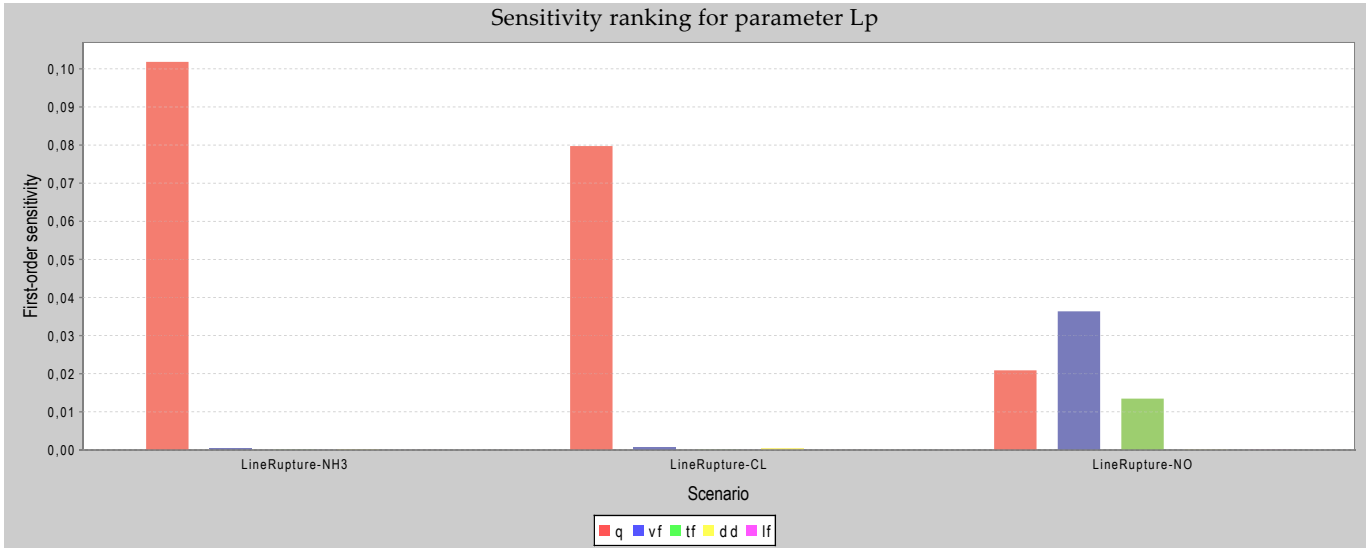


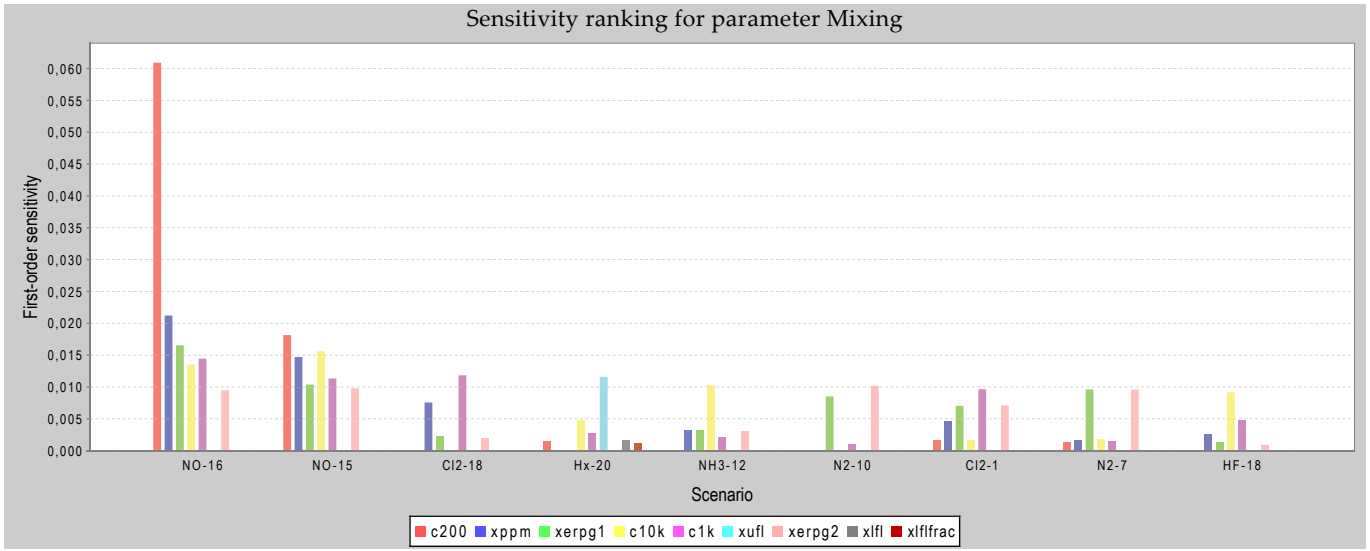
5 Parameter sensitivities

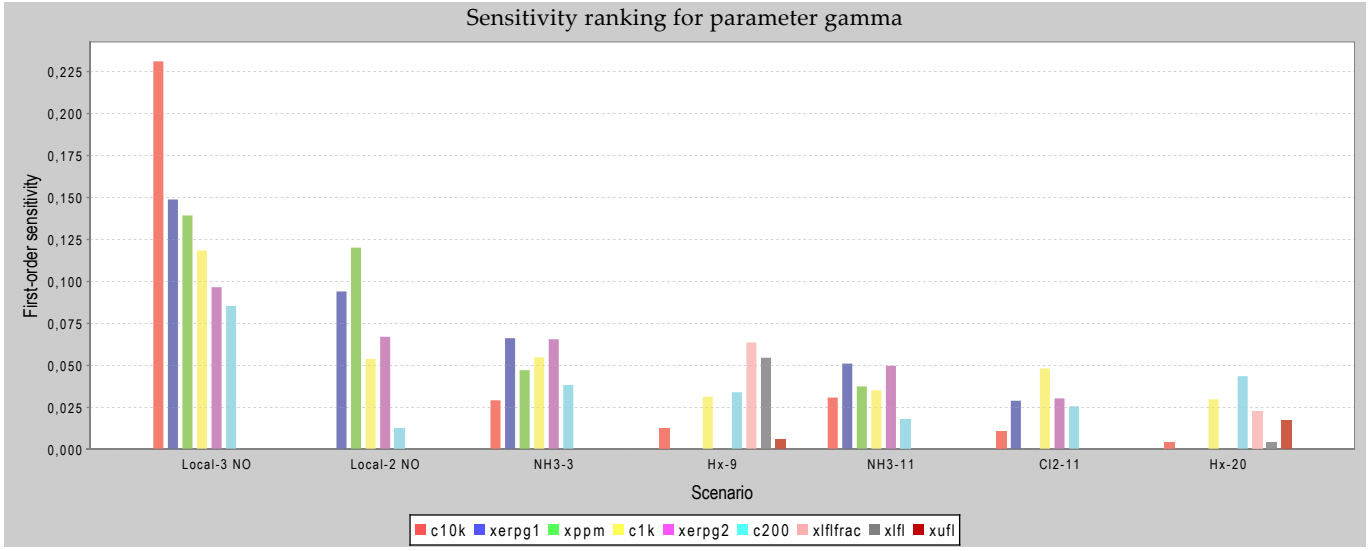


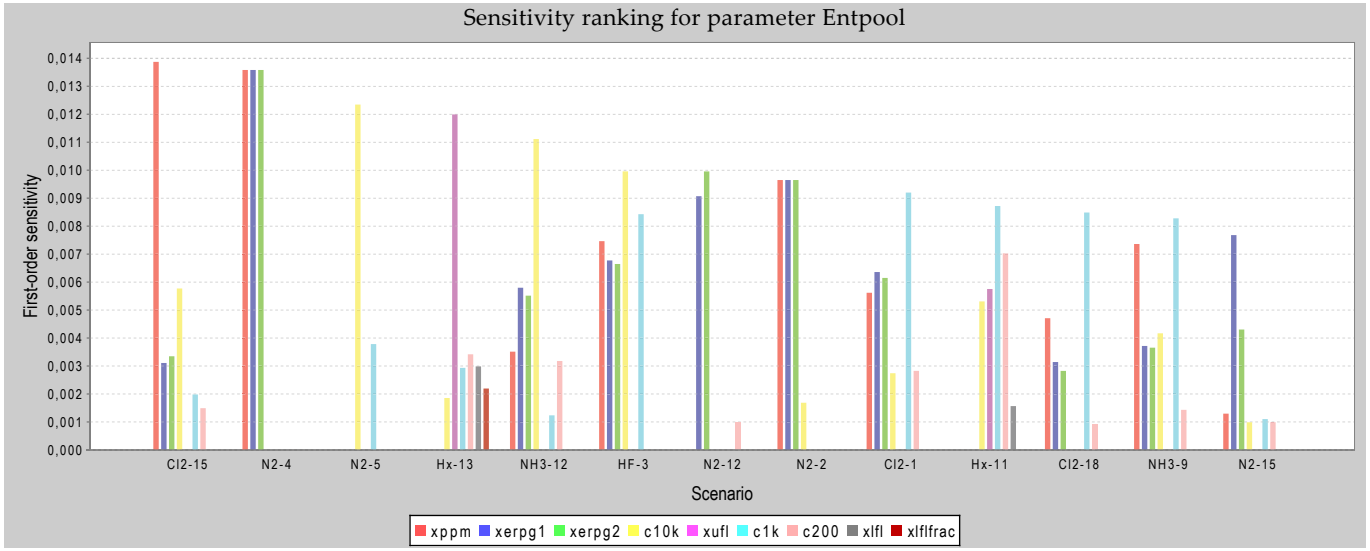


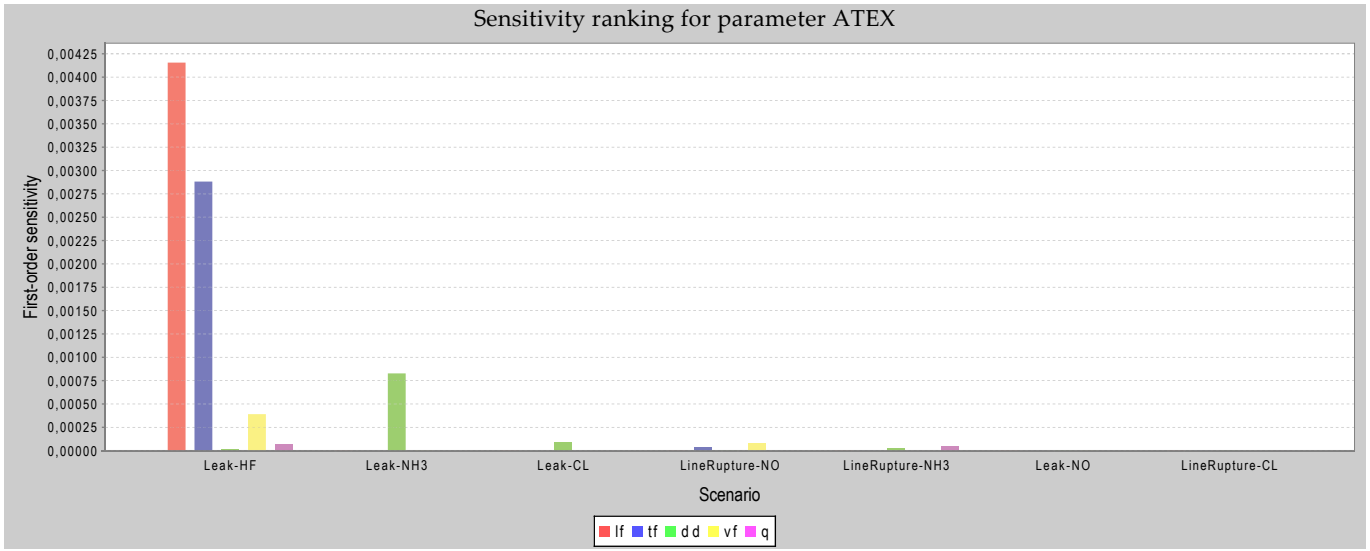


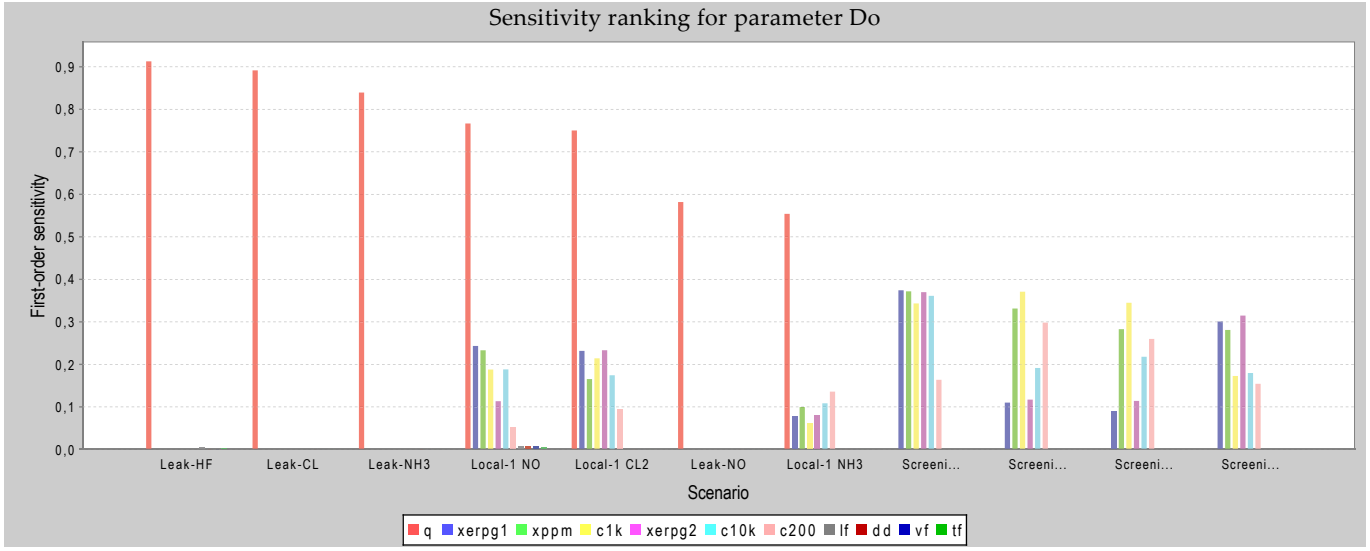

Sensitivity ranking for parameter Lp
First-order sensitivity
0,10
0,09
0,08
0,07
0,06
0,05
0,04
0,03
0,02
0,01
0,00
LineRupture-NH3
LineRupture-CL
LineRupture-NO
Scenario
q vf tf dd lf

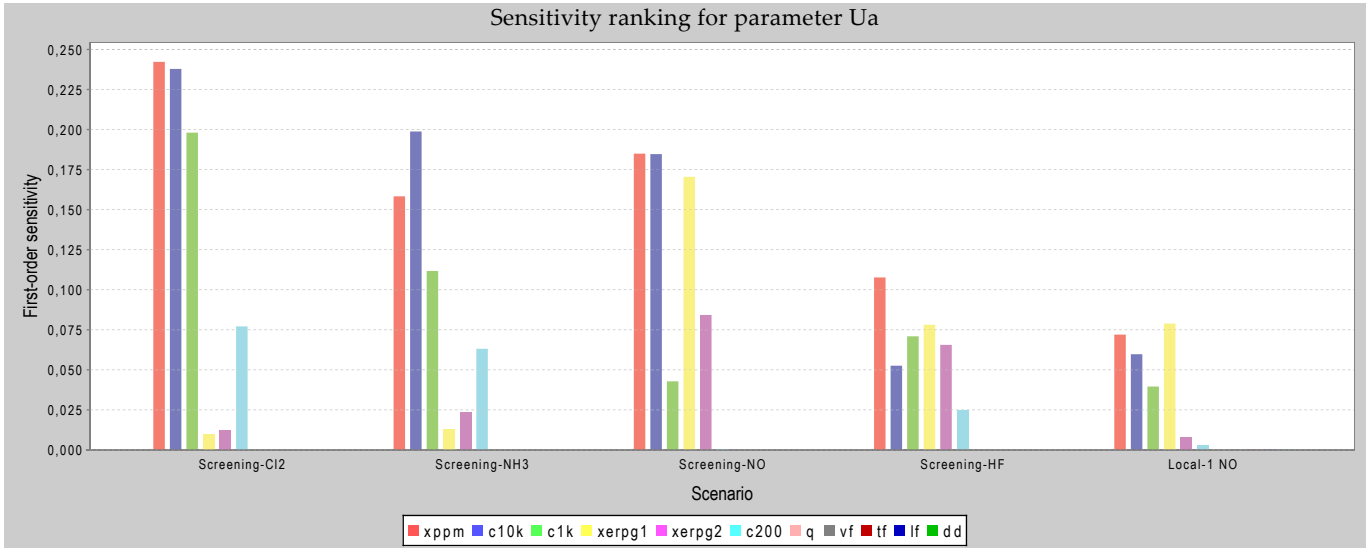

Sensitivity ranking for parameter Mixing
First-order sensitivity
0,060
0,055
0,050
0,045
0,040
0,035
0,030
0,025
0,020
0,015
0,010
0,005
0,000
NO-16
NO-15
Cl2-18
Hx-20
NH3-12
N2-10
Cl2-1
N2-7
HF-18
Scenario
c200 xppm xerpg1 c10k c1k xufl xerpg2 xlfl xlflfrac

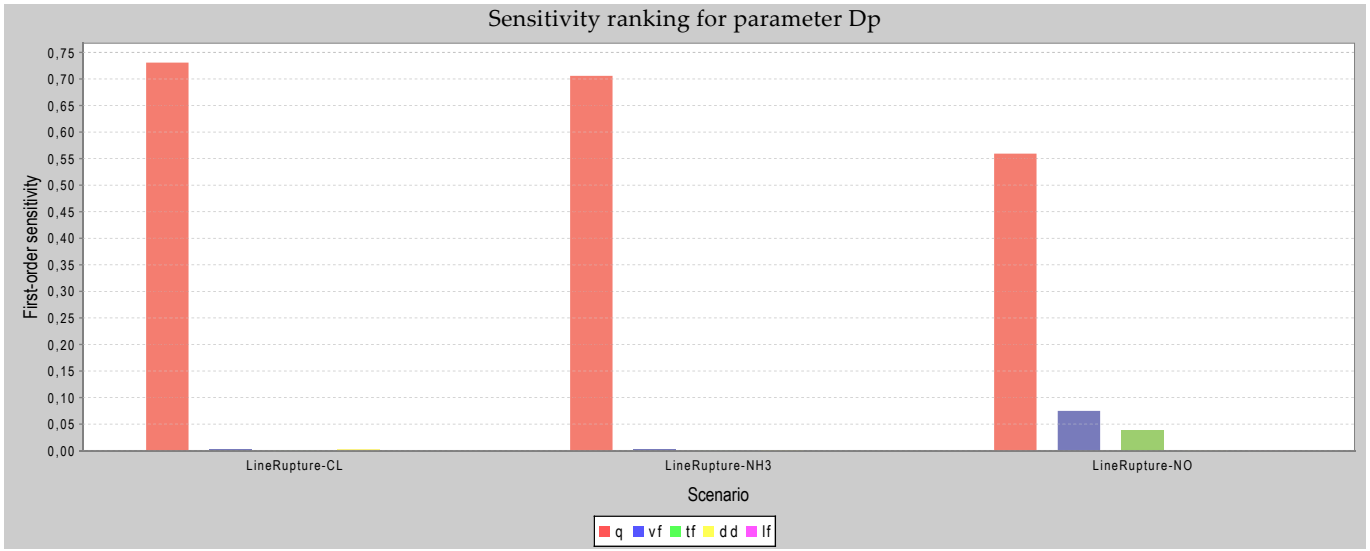

Sensitivity ranking for parameter gamma
First-order sensitivity
0,225
0,200
0,175
0,150
0,125
0,100
0,075
0,050
0,025
0,000
Local-3 NO
Local-2 NO
NH3-3
Hx-9
NH3-11
Cl2-11
Hx-20
Scenario
c10k xerpg1 xppm c1k xerpg2 c200 xlflfrac xlfl xufl

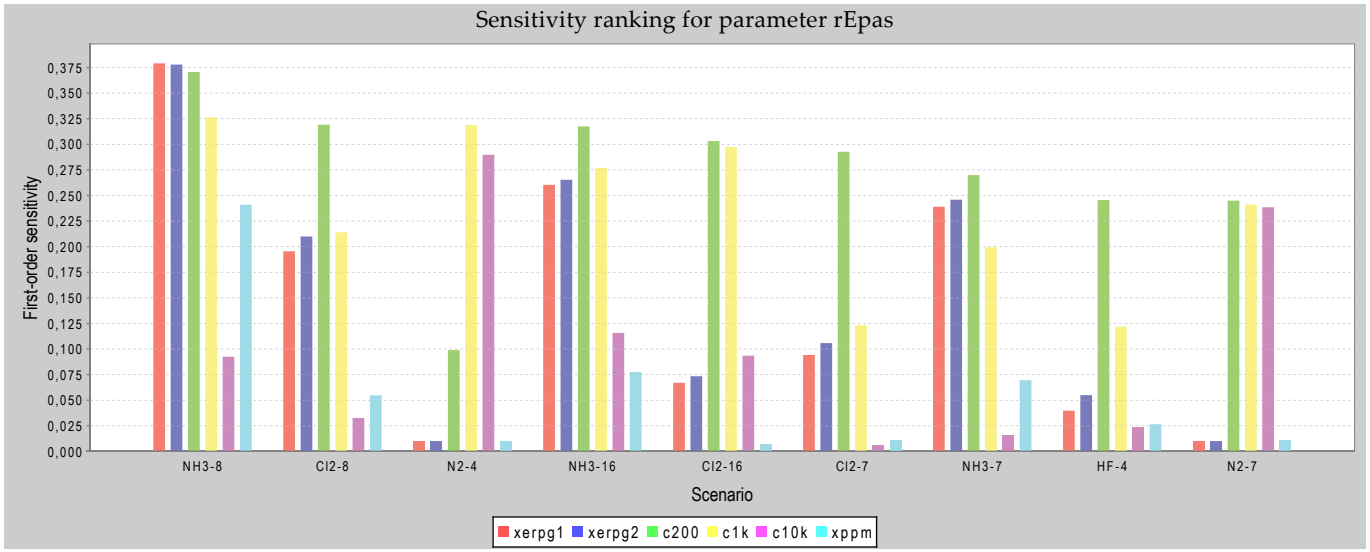

Sensitivity ranking for parameter Entpool
First-order sensitivity
0,014
0,013
0,012
0,011
0,010
0,009
0,008
0,007
0,006
0,005
0,004
0,003
0,002
0,001
0,000
Cl2-15
N2-4
N2-5
Hx-13
NH3-12
HF-3
N2-12
N2-2
Cl2-1
Hx-11
Cl2-18
NH3-9
N2-15
Scenario
xppm
xerpg1
xerpg2
c10k
xufl
c1k
c200
xlfl
xlflfrac

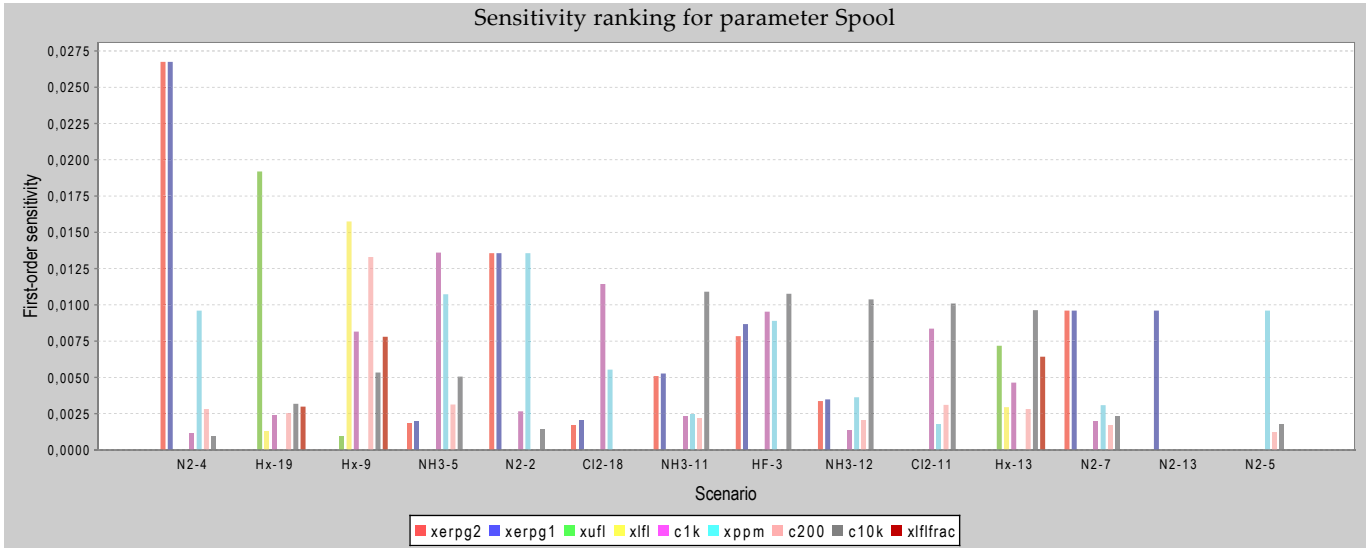

Sensitivity ranking for parameter ATEX
First-order sensitivity
0,00425
0,00400
0,00375
0,00350
0,00325
0,00300
0,00275
0,00250
0,00225
0,00200
0,00175
0,00150
0,00125
0,00100
0,00075
0,00050
0,00025
0,00000
Leak-HF
Leak-NH3
Leak-CL
LineRupture-NO
LineRupture-NH3
Leak-NO
LineRupture-CL
Scenario
lf
tf
dd
vf
q

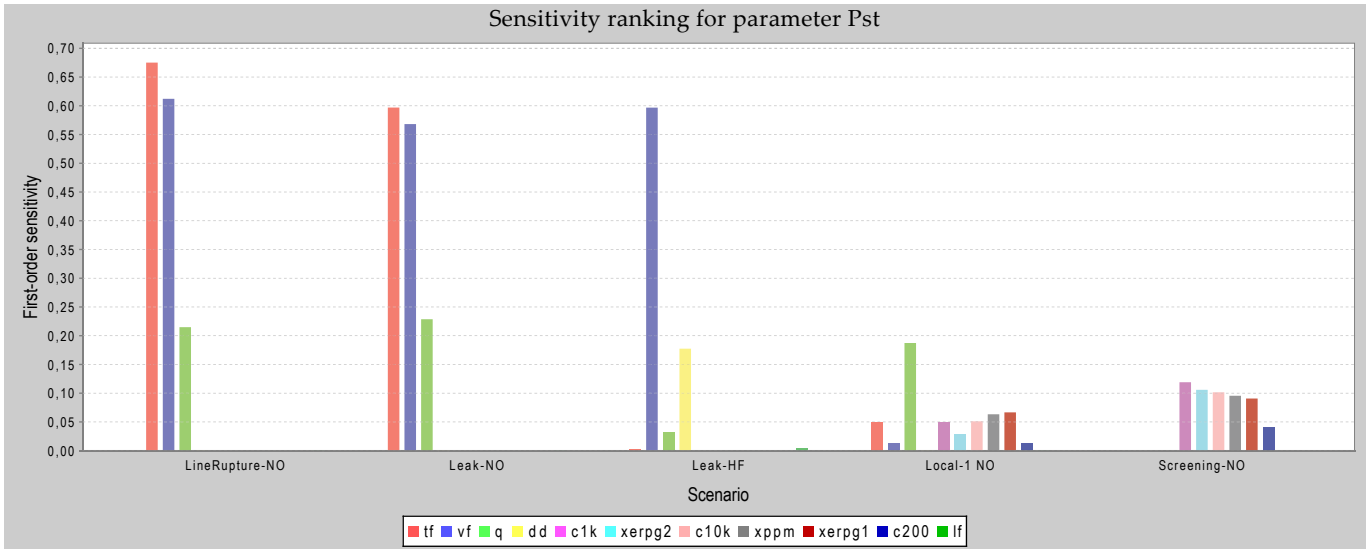

Sensitivity ranking for parameter Do
First-order sensitivity
0,9
0,8
0,7
0,6
0,5
0,4
0,3
0,2
0,1
0,0
Leak-HF
Leak-CL
Leak-NH3
Local-1 NO
Local-1 CL2
Leak-NO
Local-1 NH3
Screeni...
Screeni...
Screeni...
Screeni...
Scenario
q
xerpg1
xppm
c1k
xerpg2
c10k
c200
lf
dd
vf
tf

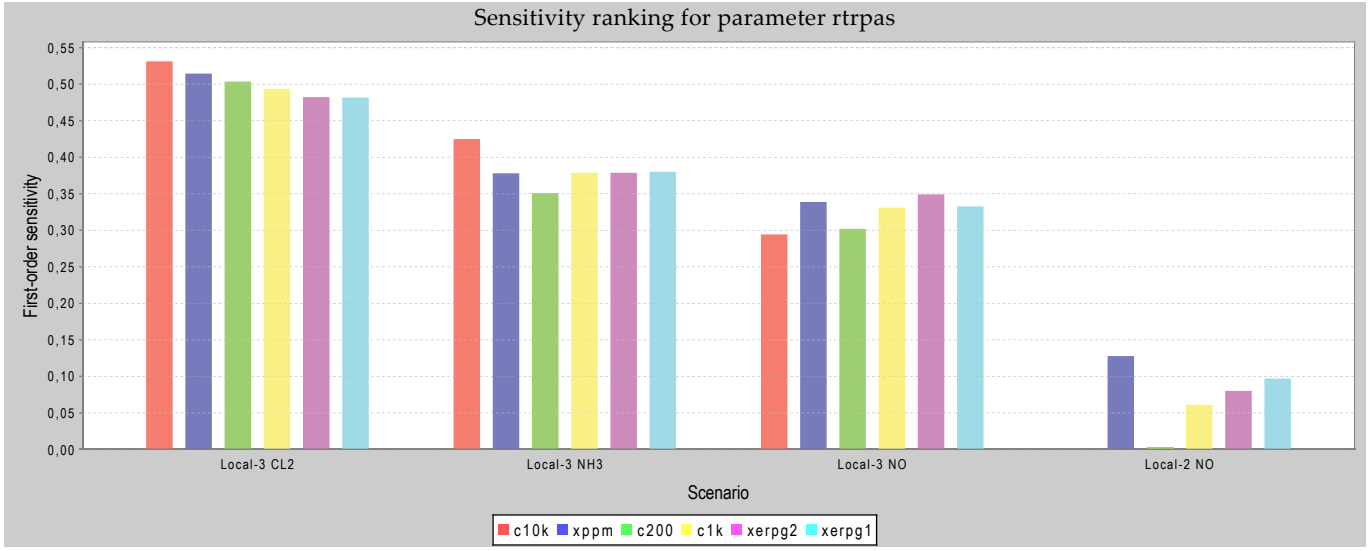

Sensitivity ranking for parameter Ua
First-order sensitivity
0,250
0,225
0,200
0,175
0,150
0,125
0,100
0,075
0,050
0,025
0,000
Screening-Cl2
Screening-NH3
Screening-NO
Screening-HF
Local-1 NO
Scenario
xppm c10k c1k xerpg1 xerpg2 c200 q vf tf lf dd

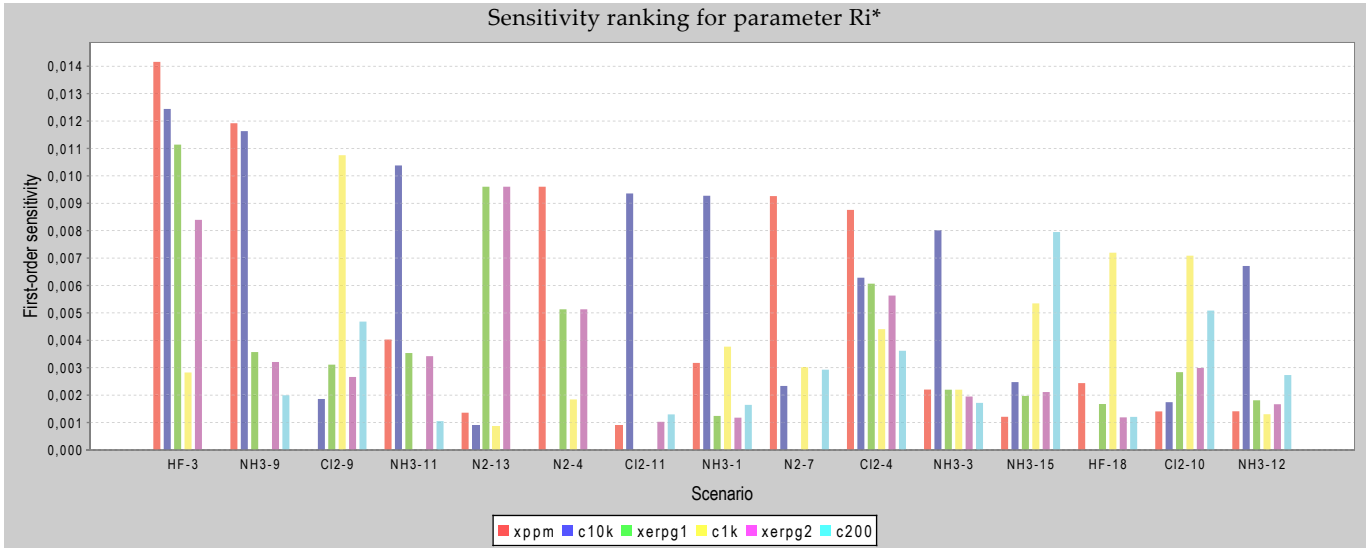

Sensitivity ranking for parameter Dp
First-order sensitivity
0,75
0,70
0,65
0,60
0,55
0,50
0,45
0,40
0,35
0,30
0,25
0,20
0,15
0,10
0,05
0,00
LineRupture-CL
LineRupture-NH3
LineRupture-NO
Scenario
q vf tf dd lf

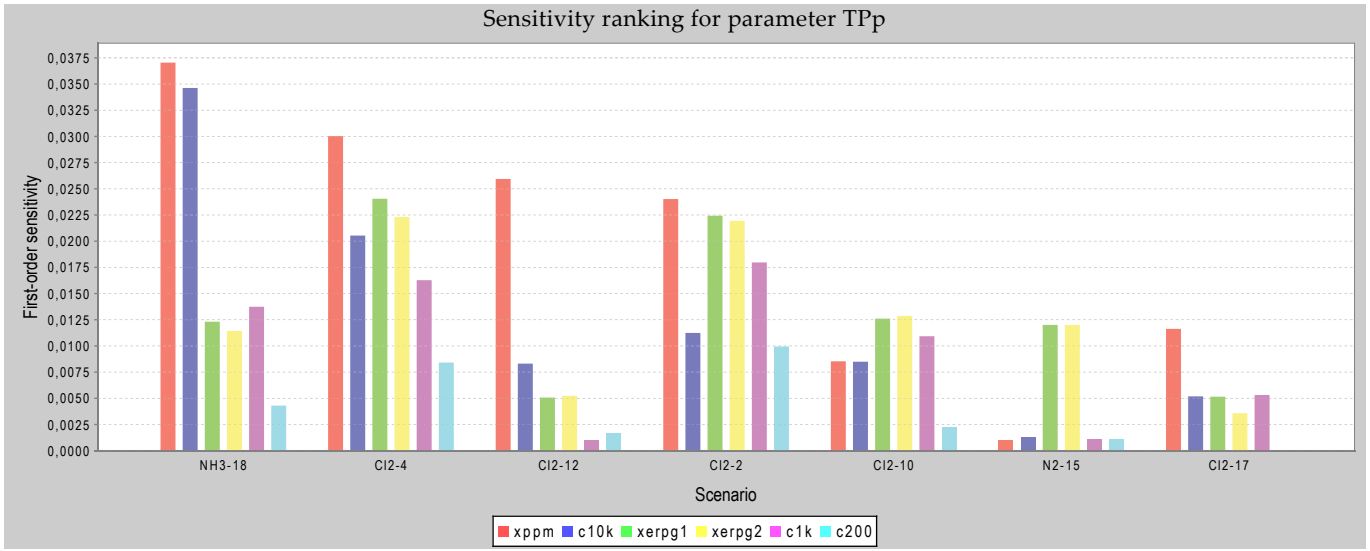

Sensitivity ranking for parameter rEpas
First-order sensitivity
0,375
0,350
0,325
0,300
0,275
0,250
0,225
0,200
0,175
0,150
0,125
0,100
0,075
0,050
0,025
0,000
NH3-8
Cl2-8
N2-4
NH3-16
Cl2-16
Cl2-7
NH3-7
HF-4
N2-7
Scenario
xerpg1 xerpg2 c200 c1k c10k xppm

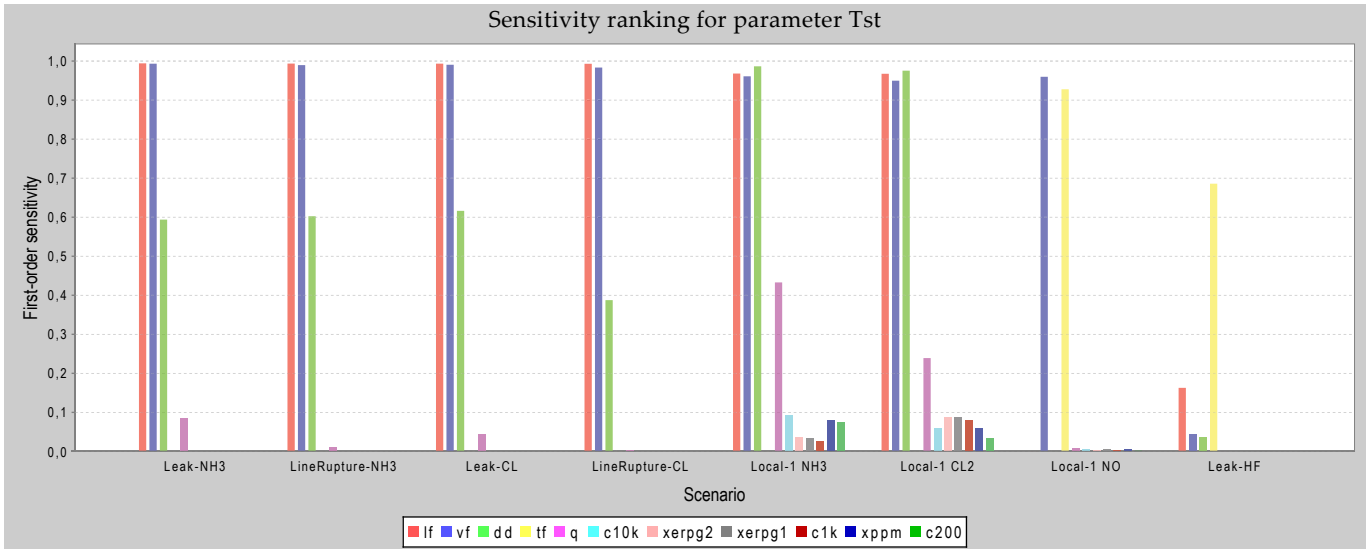

Sensitivity ranking for parameter Spool
First-order sensitivity
0,0275
0,0250
0,0225
0,0200
0,0175
0,0150
0,0125
0,0100
0,0075
0,0050
0,0025
0,0000
N2-4
Hx-19
Hx-9
NH3-5
N2-2
Cl2-18
NH3-11
HF-3
NH3-12
Cl2-11
Hx-13
N2-7
N2-13
N2-5
Scenario
xerpg2 xerpg1 xufl xlfl c1k xppm c200 c10k xlflfrac

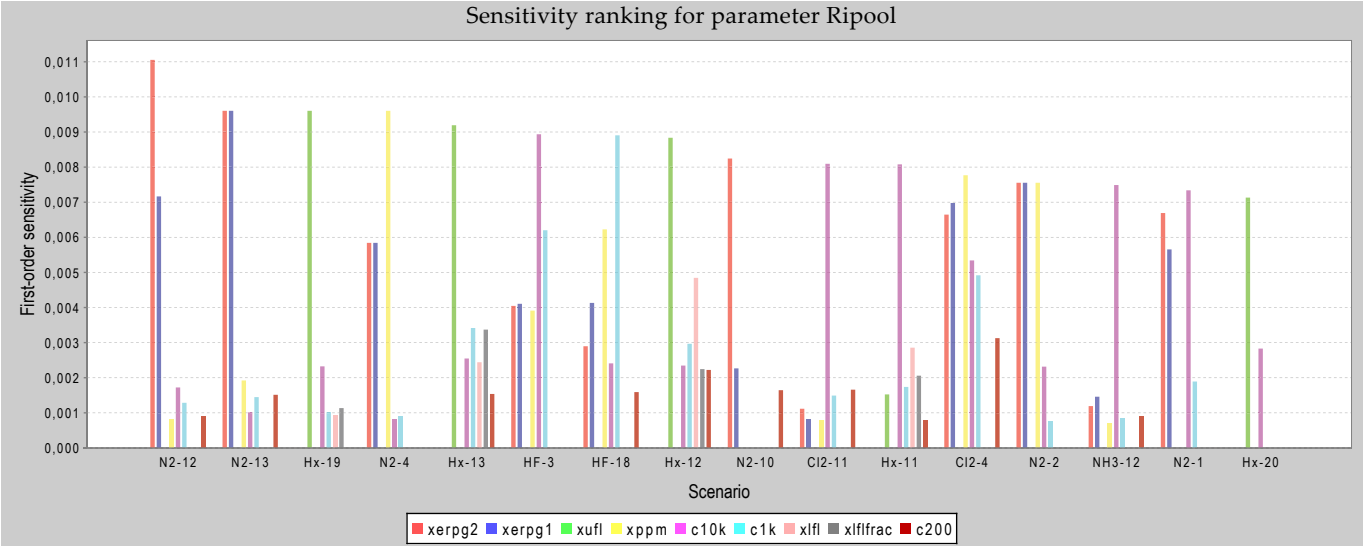

Sensitivity ranking for parameter Pst
First-order sensitivity
0,70
0,65
0,60
0,55
0,50
0,45
0,40
0,35
0,30
0,25
0,20
0,15
0,10
0,05
0,00
LineRupture-NO
Leak-NO
Leak-HF
Local-1 NO
Screening-NO
Scenario
tf vf q dd c1k xerpg2 c10k xppm xerpg1 c200 lf

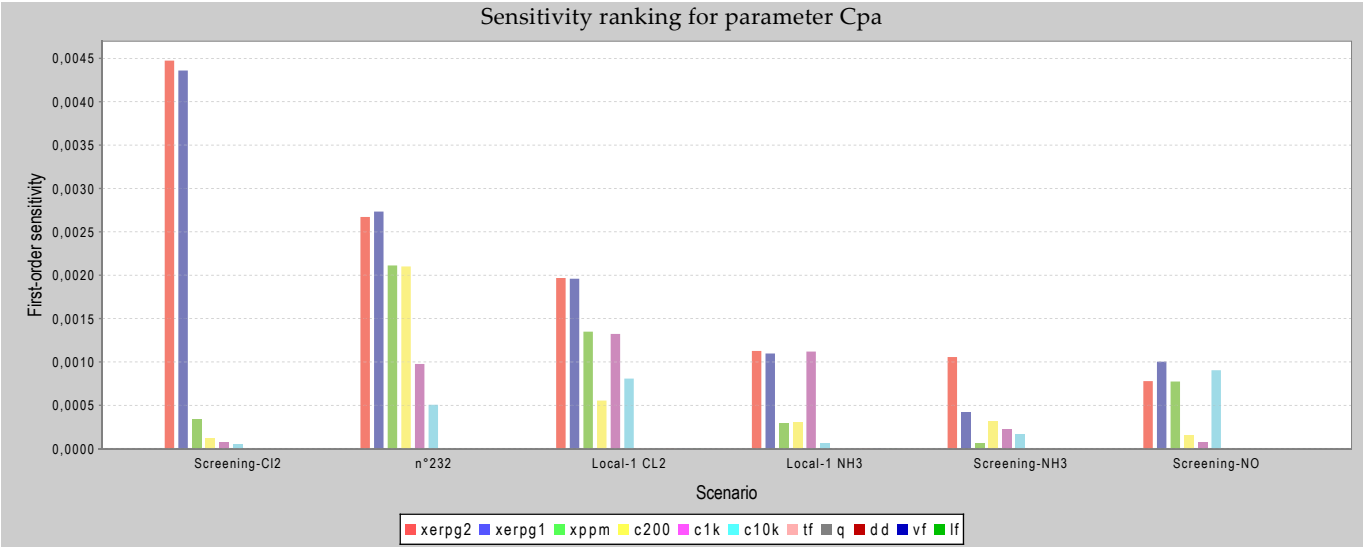

Sensitivity ranking for parameter rtrpas
First-order sensitivity
0,55
0,50
0,45
0,40
0,35
0,30
0,25
0,20
0,15
0,10
0,05
0,00
Local-3 CL2
Local-3 NH3
Local-3 NO
Local-2 NO
Scenario
c10k xppm c200 c1k xerpg2 xerpg1

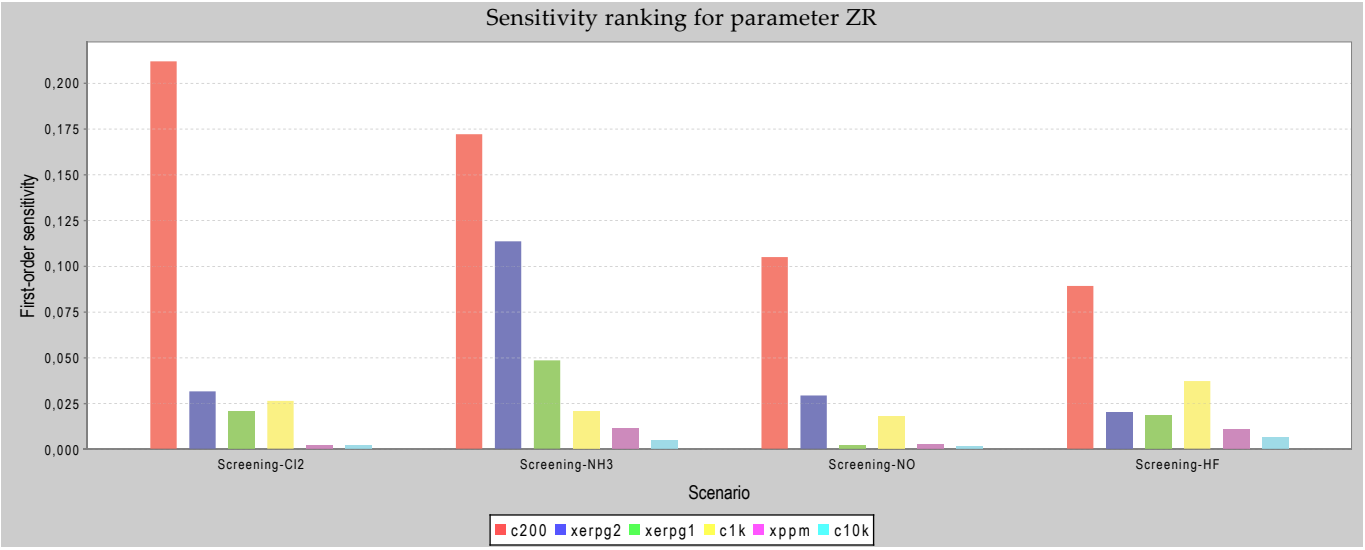

Sensitivity ranking for parameter Ri*
First-order sensitivity
0,014
0,013
0,012
0,011
0,010
0,009
0,008
0,007
0,006
0,005
0,004
0,003
0,002
0,001
0,000
HF-3
NH3-9
Cl2-9
NH3-11
N2-13
N2-4
Cl2-11
NH3-1
N2-7
Cl2-4
NH3-3
NH3-15
HF-18
Cl2-10
NH3-12
Scenario
xppm
c10k
xerpg1
c1k
xerpg2
c200

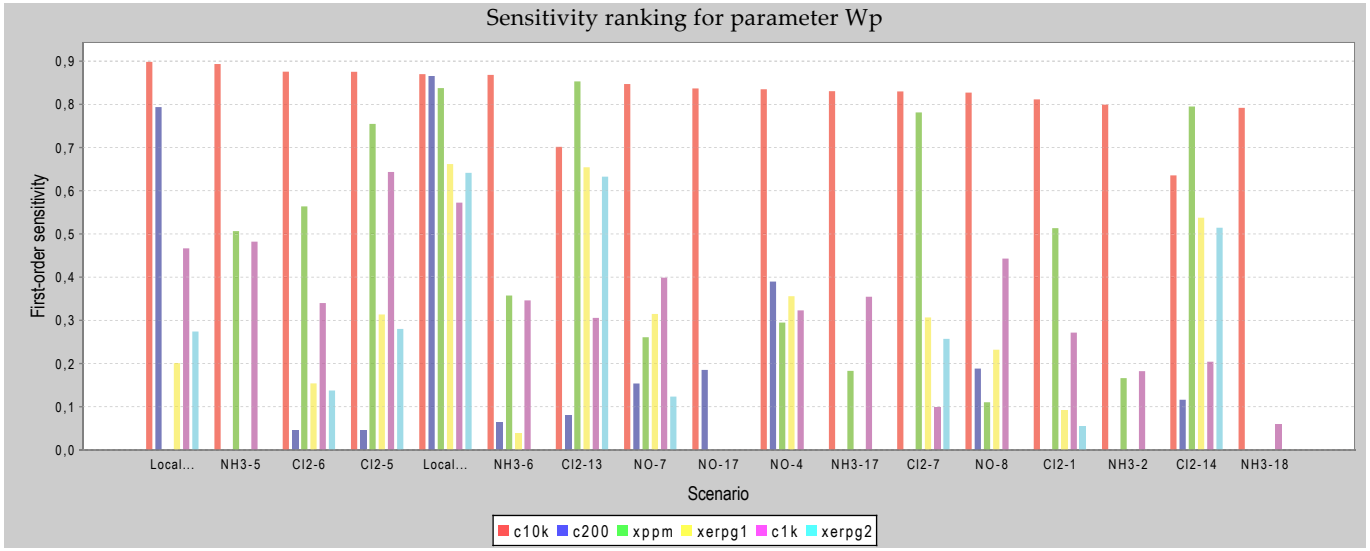

Sensitivity ranking for parameter TPp
First-order sensitivity
0,0375
0,0350
0,0325
0,0300
0,0275
0,0250
0,0225
0,0200
0,0175
0,0150
0,0125
0,0100
0,0075
0,0050
0,0025
0,0000
NH3-18
Cl2-4
Cl2-12
Cl2-2
Cl2-10
N2-15
Cl2-17
Scenario
xppm
c10k
xerpg1
xerpg2
c1k
c200

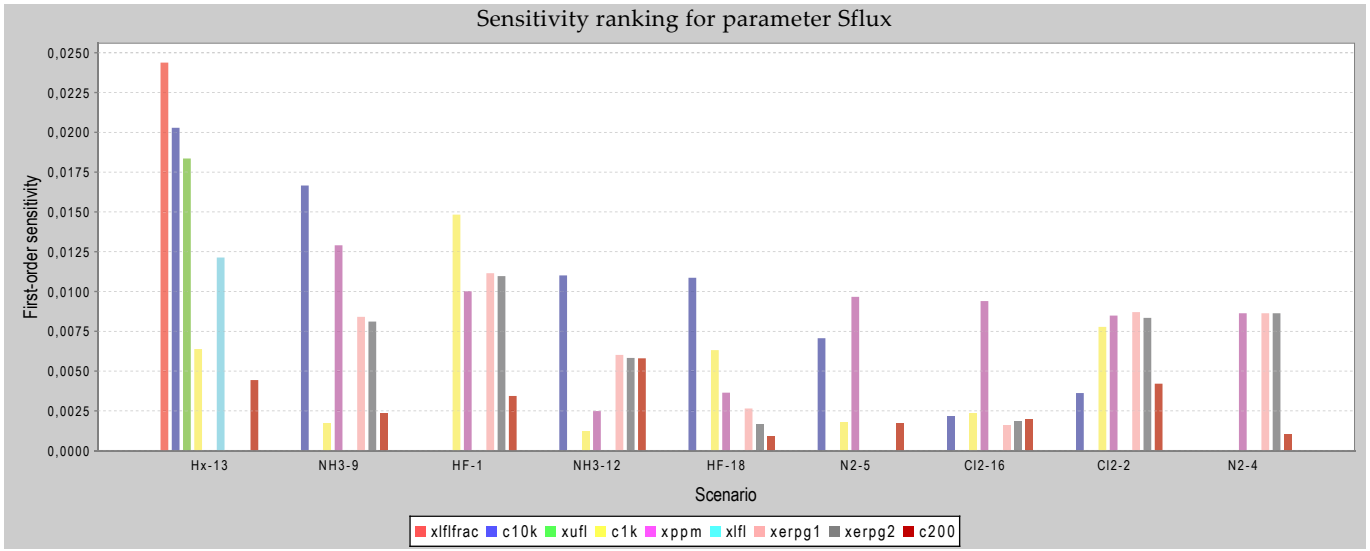

Sensitivity ranking for parameter Tst
First-order sensitivity
1,0
0,9
0,8
0,7
0,6
0,5
0,4
0,3
0,2
0,1
0,0
Leak-NH3
LineRupture-NH3
Leak-CL
LineRupture-CL
Local-1 NH3
Local-1 CL2
Local-1 NO
Leak-HF
Scenario
lf
vf
dd
tf
q
c10k
xerpg2
xerpg1
c1k
xppm
c200

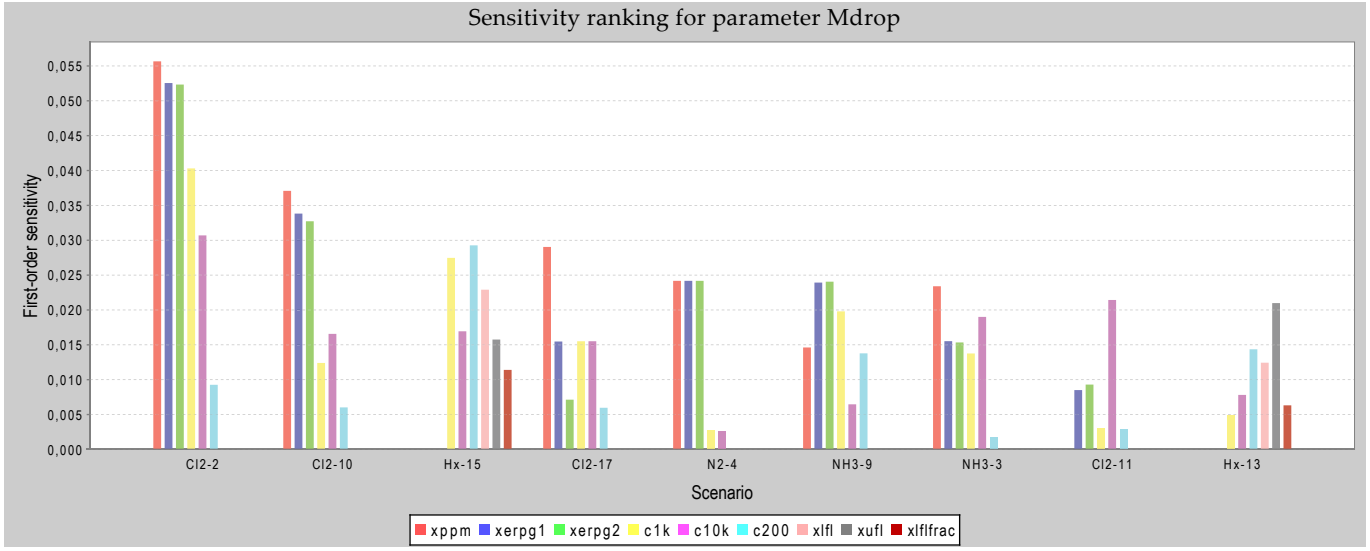

Sensitivity ranking for parameter Ripool
First-order sensitivity
0,011
0,010
0,009
0,008
0,007
0,006
0,005
0,004
0,003
0,002
0,001
0,000
N2-12
N2-13
Hx-19
N2-4
Hx-13
HF-3
HF-18
Hx-12
N2-10
Cl2-11
Hx-11
Cl2-4
N2-2
NH3-12
N2-1
Hx-20
Scenario
xerpg2 xerpg1 xufl xppm c10k c1k xlfl xlflfrac c200

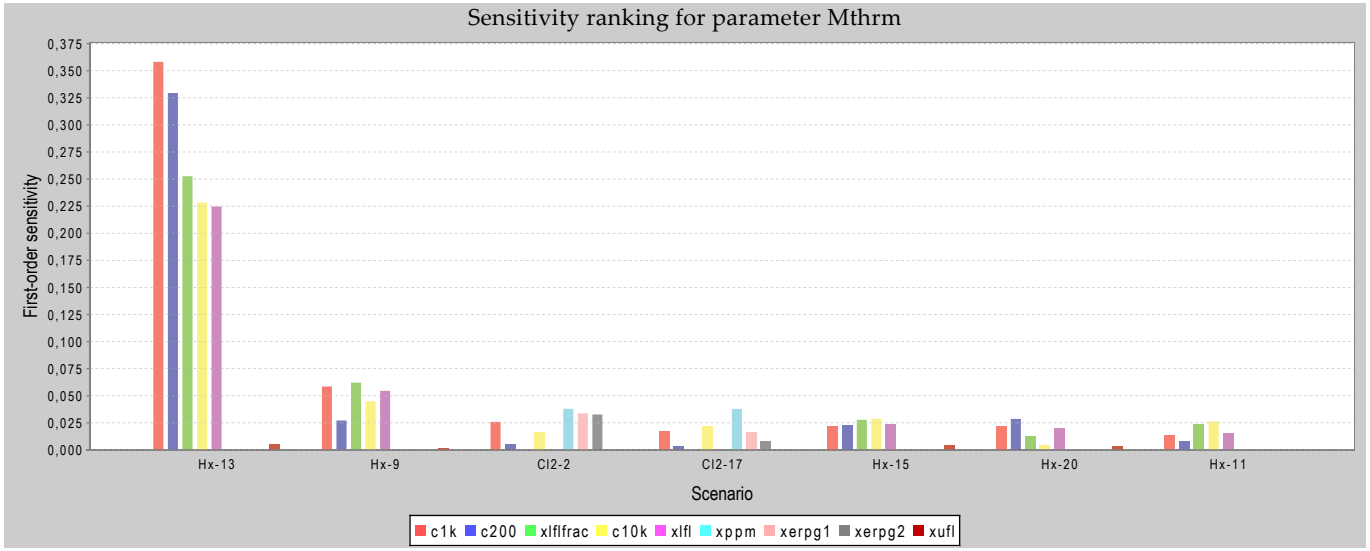

Sensitivity ranking for parameter Cpa
First-order sensitivity
0,0045
0,0040
0,0035
0,0030
0,0025
0,0020
0,0015
0,0010
0,0005
0,0000
Screening-Cl2
n°232
Local-1 CL2
Local-1 NH3
Screening-NH3
Screening-NO
Scenario
xerpg2 xerpg1 xppm c200 c1k c10k tf q dd vf lf

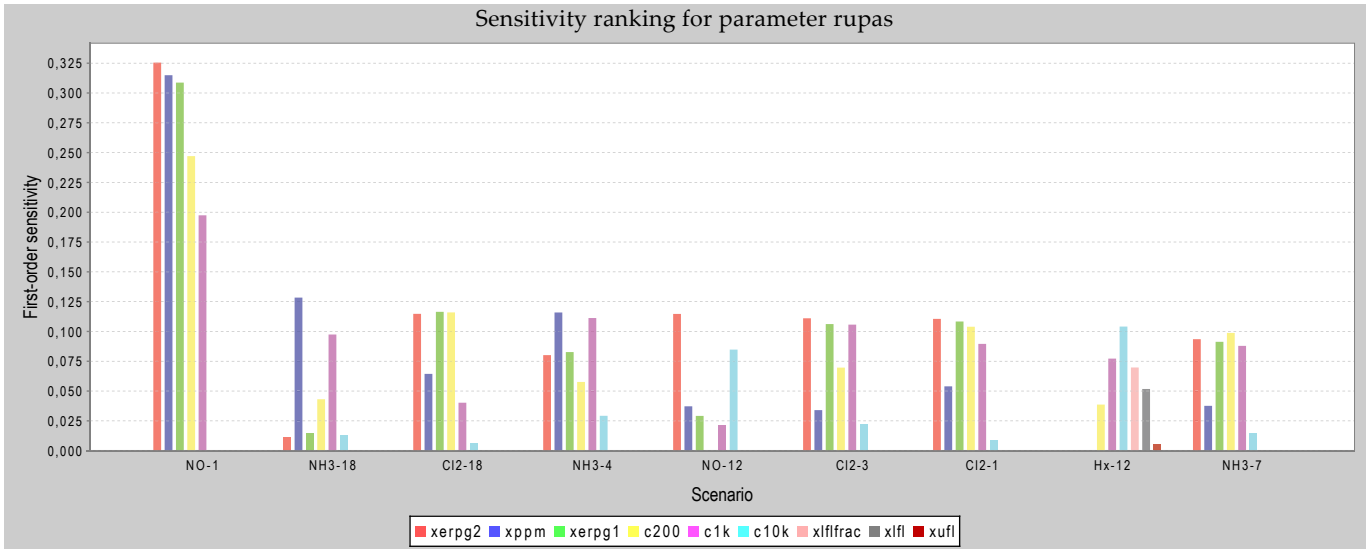

Sensitivity ranking for parameter ZR
First-order sensitivity
0,200
0,175
0,150
0,125
0,100
0,075
0,050
0,025
0,000
Screening-Cl2
Screening-NH3
Screening-NO
Screening-HF
Scenario
c200 xerpg2 xerpg1 c1k xppm c10k

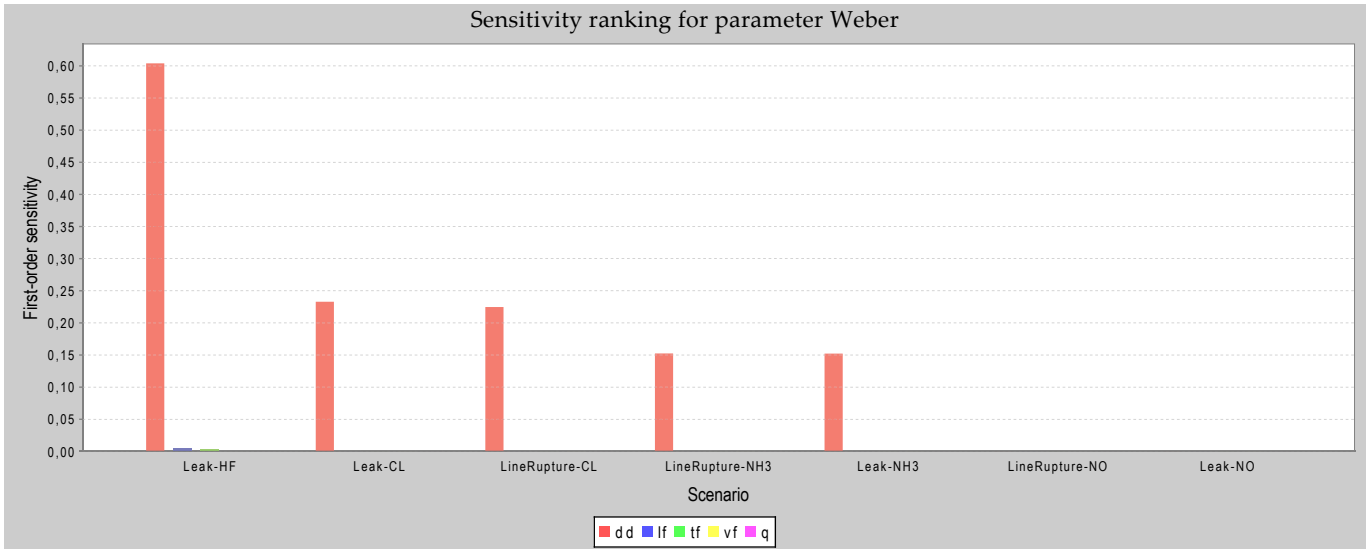

Sensitivity ranking for parameter Wp
First-order sensitivity
0,0
0,1
0,2
0,3
0,4
0,5
0,6
0,7
0,8
0,9
Local...
NH3-5
Cl2-6
Cl2-5
Local...
NH3-6
Cl2-13
NO-7
NO-17
NO-4
NH3-17
Cl2-7
NO-8
Cl2-1
NH3-2
Cl2-14
NH3-18
Scenario
c10k
c200
xppm
xerpg1
c1k
xerpg2

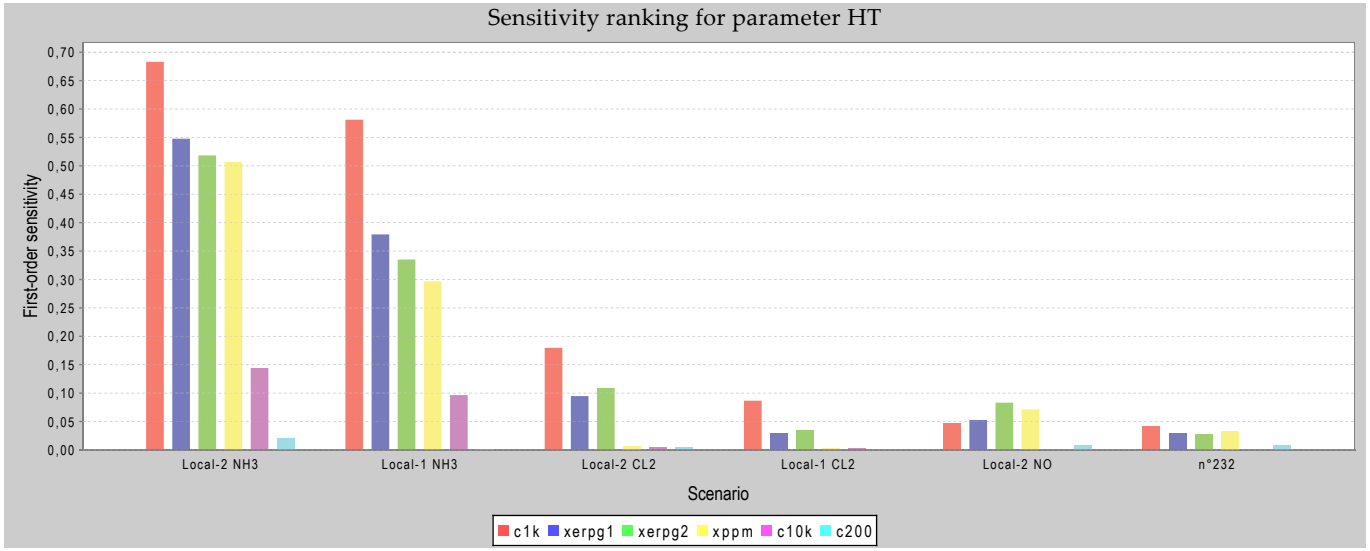

Sensitivity ranking for parameter Sflux
First-order sensitivity
0,0000
0,0025
0,0050
0,0075
0,0100
0,0125
0,0150
0,0175
0,0200
0,0225
0,0250
Hx-13
NH3-9
HF-1
NH3-12
HF-18
N2-5
Cl2-16
Cl2-2
N2-4
Scenario
xlflfrac
c10k
xufl
c1k
xppm
xlfl
xerpg1
xerpg2
c200

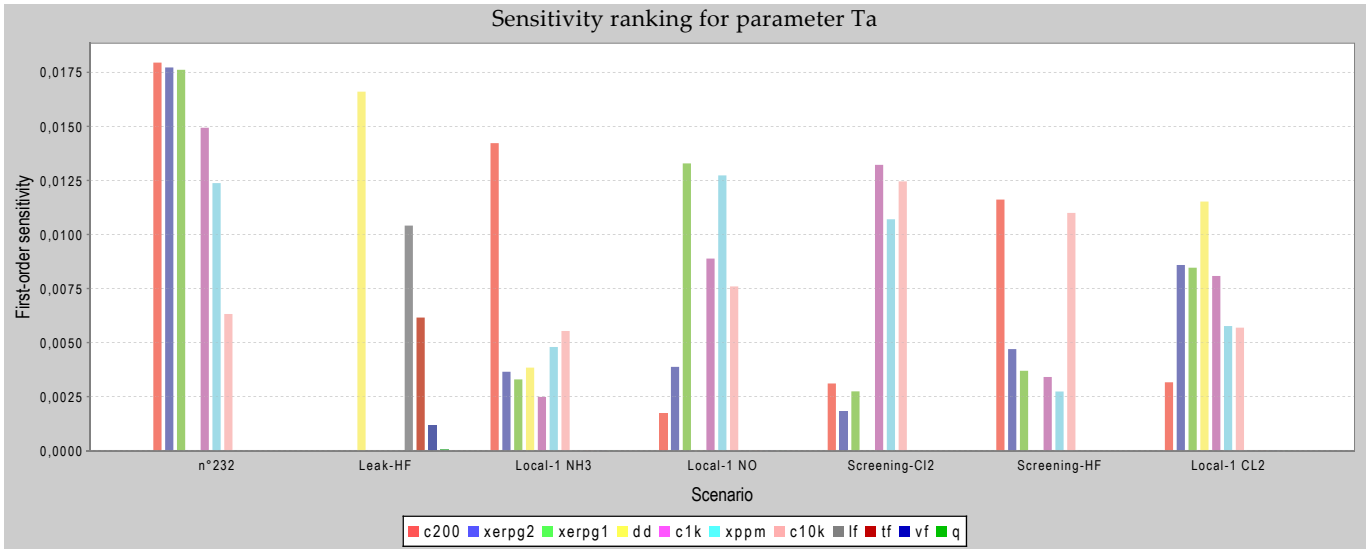

Sensitivity ranking for parameter Mdrop
First-order sensitivity
0,000
0,005
0,010
0,015
0,020
0,025
0,030
0,035
0,040
0,045
0,050
0,055
Cl2-2
Cl2-10
Hx-15
Cl2-17
N2-4
NH3-9
NH3-3
Cl2-11
Hx-13
Scenario
xppm
xerpg1
xerpg2
c1k
c10k
c200
xlfl
xufl
xlflfrac

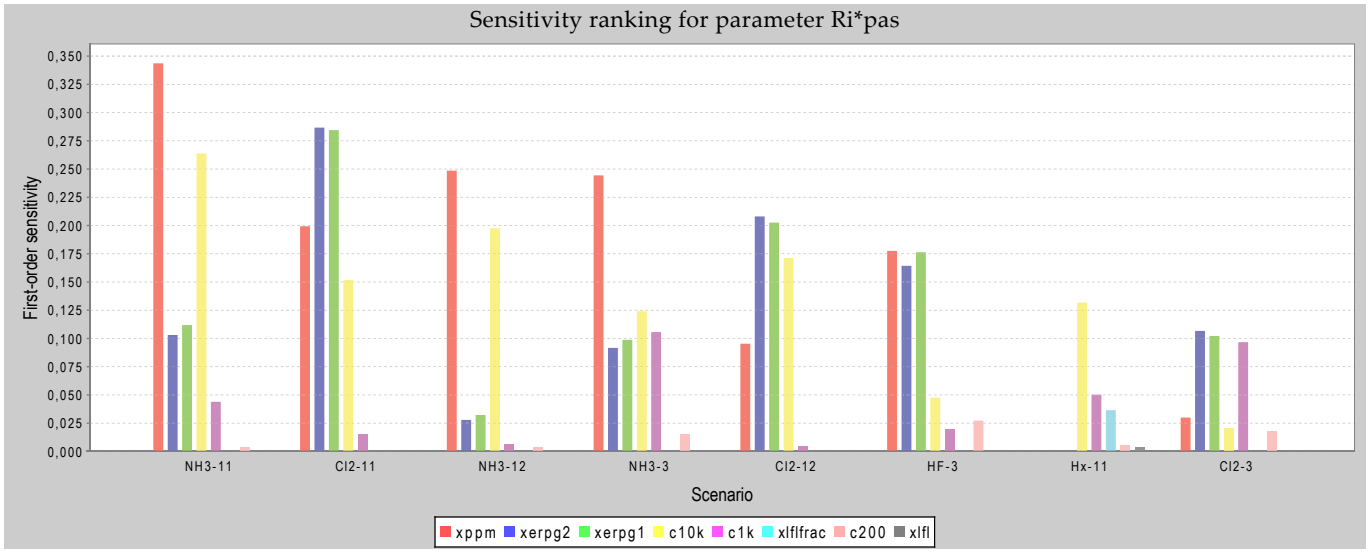

Sensitivity ranking for parameter Mthrm
First-order sensitivity
0,375
0,350
0,325
0,300
0,275
0,250
0,225
0,200
0,175
0,150
0,125
0,100
0,075
0,050
0,025
0,000
Hx-13
Hx-9
CI2-2
CI2-17
Hx-15
Hx-20
Hx-11
Scenario
c1k c200 xlflfrac c10k xlfl xppm xerpg1 xerpg2 xufl

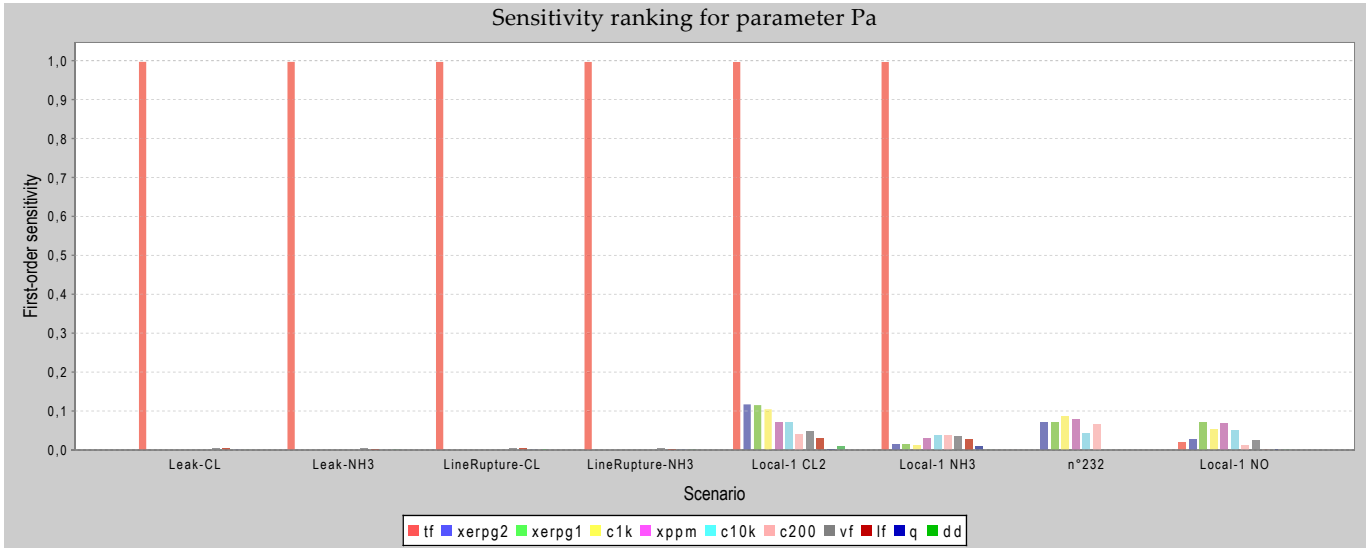

Sensitivity ranking for parameter rupas
First-order sensitivity
0,325
0,300
0,275
0,250
0,225
0,200
0,175
0,150
0,125
0,100
0,075
0,050
0,025
0,000
NO-1
NH3-18
CI2-18
NH3-4
NO-12
CI2-3
CI2-1
Hx-12
NH3-7
Scenario
xerpg2 xppm xerpg1 c200 c1k c10k xlflfrac xlfl xufl

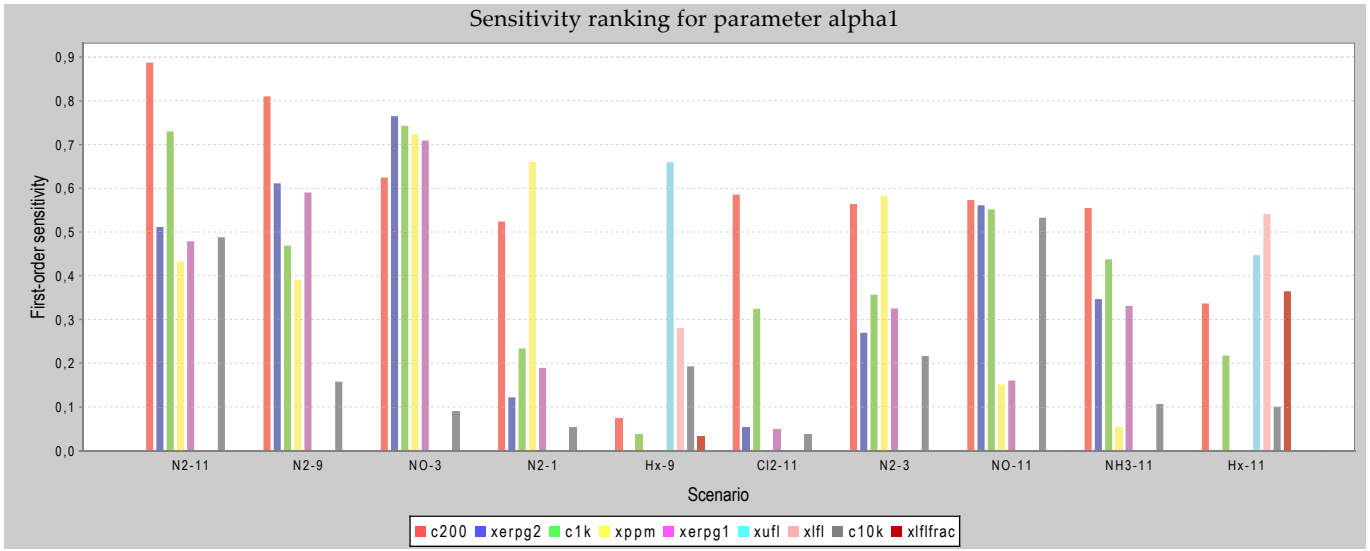

Sensitivity ranking for parameter Weber
First-order sensitivity
0,60
0,55
0,50
0,45
0,40
0,35
0,30
0,25
0,20
0,15
0,10
0,05
0,00
Leak-HF
Leak-CL
LineRupture-CL
LineRupture-NH3
Leak-NH3
LineRupture-NO
Leak-NO
Scenario
dd lf tf vf q

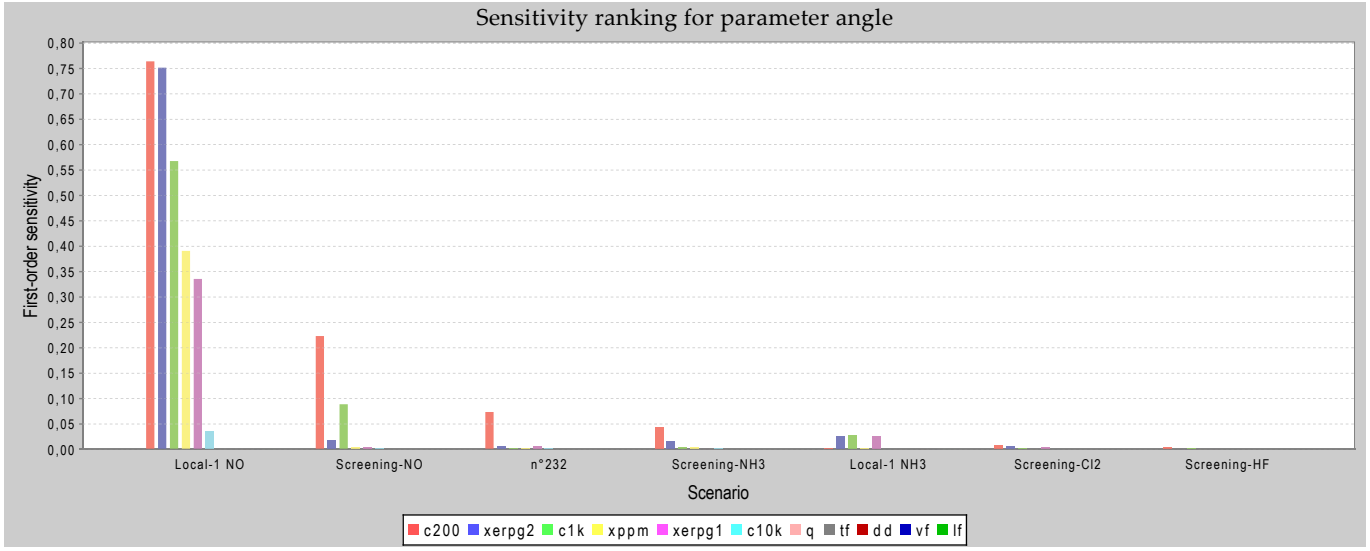

Sensitivity ranking for parameter HT
First-order sensitivity
0,70
0,65
0,60
0,55
0,50
0,45
0,40
0,35
0,30
0,25
0,20
0,15
0,10
0,05
0,00
Local-2 NH3
Local-1 NH3
Local-2 CL2
Local-1 CL2
Local-2 NO
n°232
Scenario
c1k xerpg1 xerpg2 xppm c10k c200

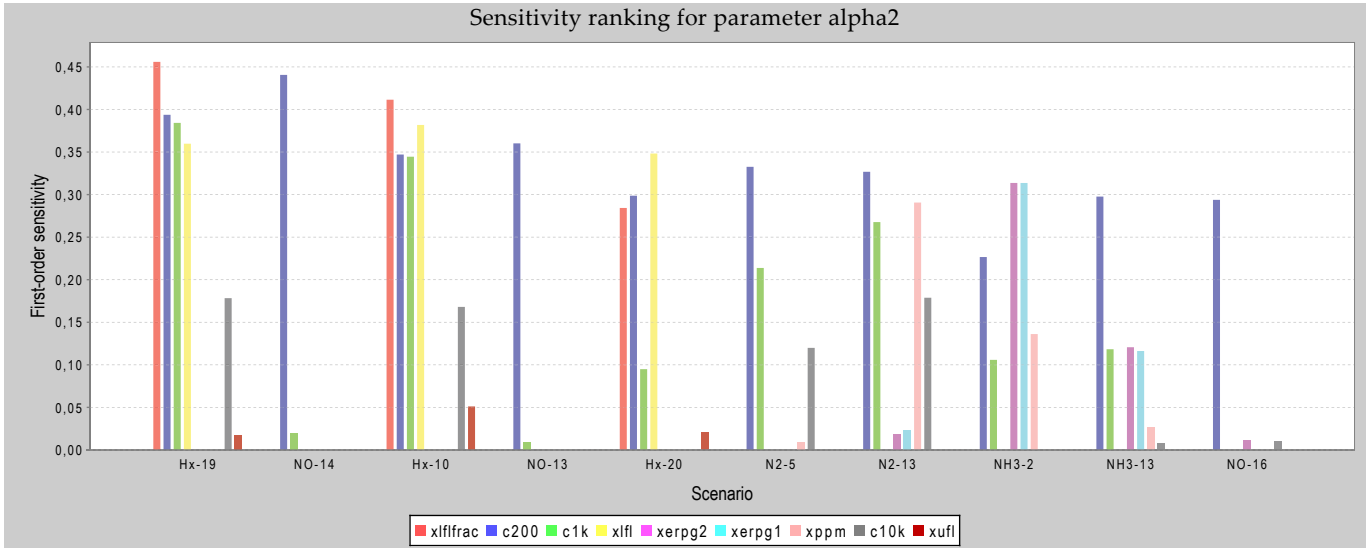

Sensitivity ranking for parameter Ta
First-order sensitivity
0,0175
0,0150
0,0125
0,0100
0,0075
0,0050
0,0025
0,0000
n°232
Leak-HF
Local-1 NH3
Local-1 NO
Screening-Cl2
Screening-HF
Local-1 CL2
Scenario
c200 xerpg2 xerpg1 dd c1k xppm c10k lf tf vf q

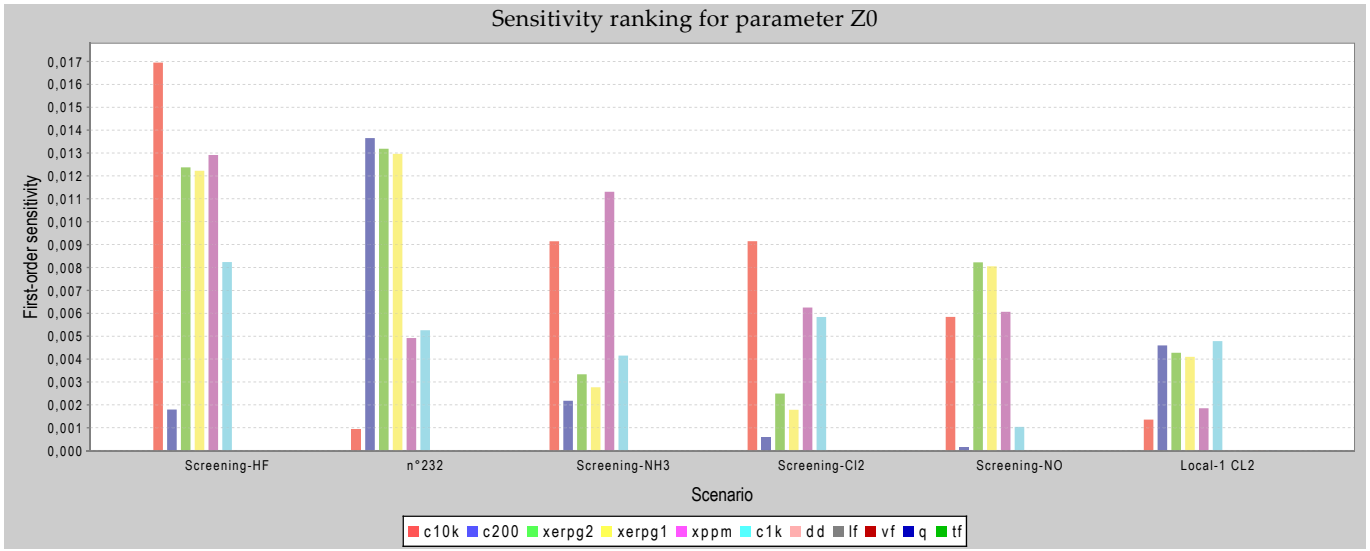

Sensitivity ranking for parameter Ri*pas
First-order sensitivity
0,350
0,325
0,300
0,275
0,250
0,225
0,200
0,175
0,150
0,125
0,100
0,075
0,050
0,025
0,000
NH3-11
Cl2-11
NH3-12
NH3-3
Cl2-12
HF-3
Hx-11
Cl2-3
Scenario
xppm xerpg2 xerpg1 c10k c1k xlflfrac c200 xlfl

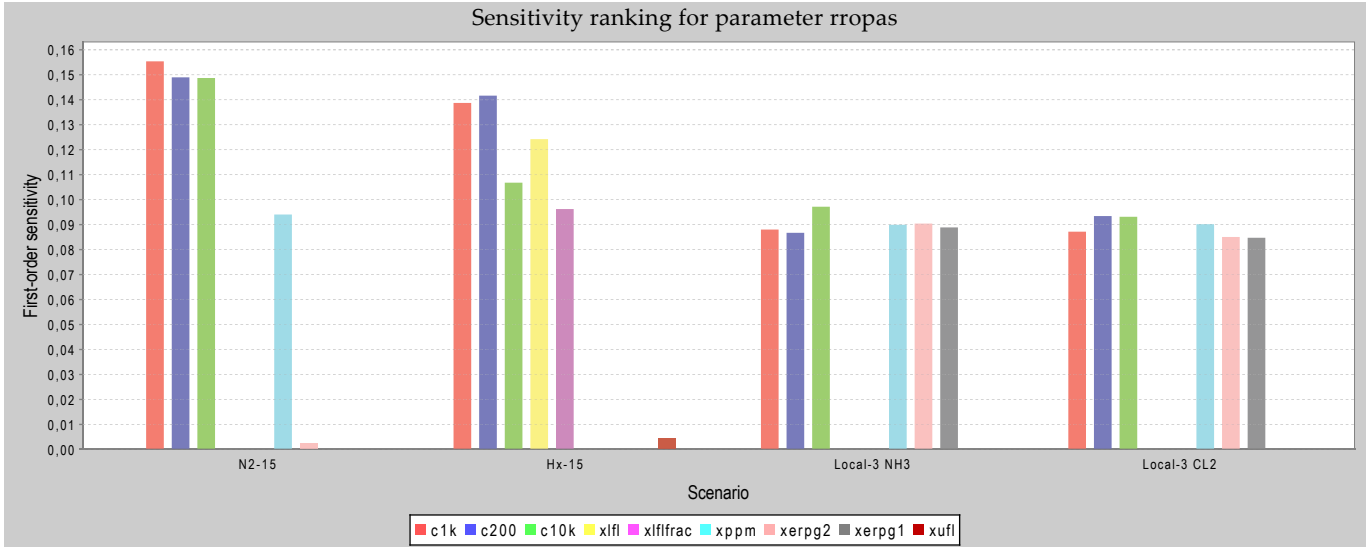

Sensitivity ranking for parameter Pa
First-order sensitivity
1,0
0,9
0,8
0,7
0,6
0,5
0,4
0,3
0,2
0,1
0,0
Leak-CL
Leak-NH3
LineRupture-CL
LineRupture-NH3
Local-1 CL2
Local-1 NH3
n°232
Local-1 NO
Scenario
tf xerpg2 xerpg1 c1k xppm c10k c200 vf lf q dd

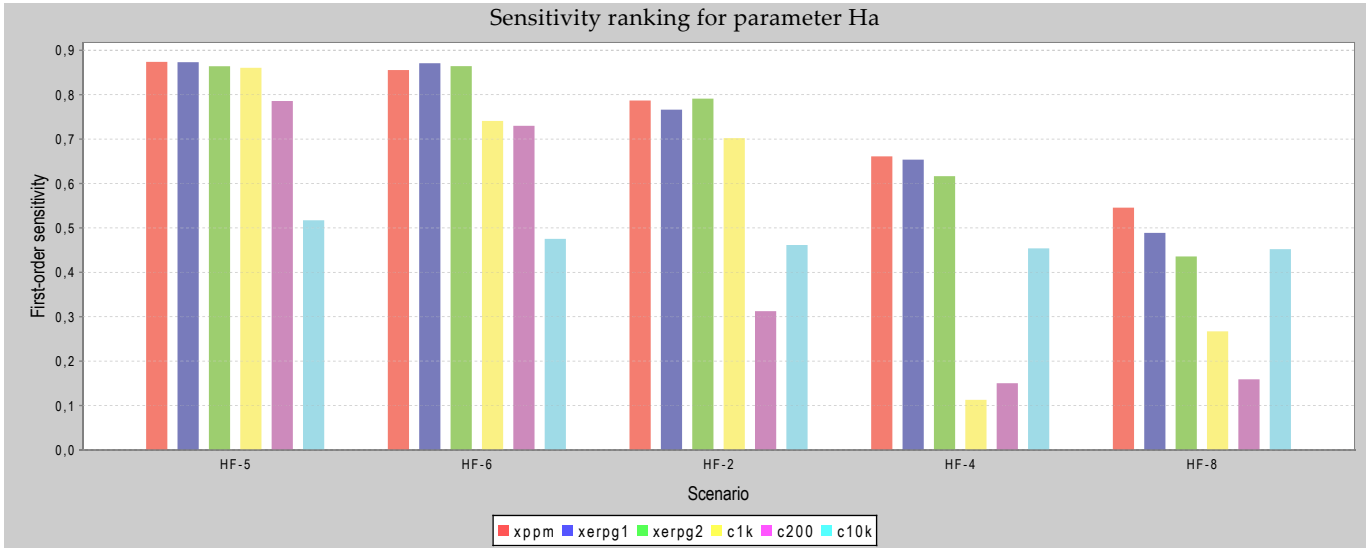

Sensitivity ranking for parameter alpha1
First-order sensitivity
0,9
0,8
0,7
0,6
0,5
0,4
0,3
0,2
0,1
0,0
N2-11
N2-9
NO-3
N2-1
Hx-9
Cl2-11
N2-3
NO-11
NH3-11
Hx-11
Scenario
c200 xerpg2 c1k xppm xerpg1 xufl xlfl c10k xlflfrac

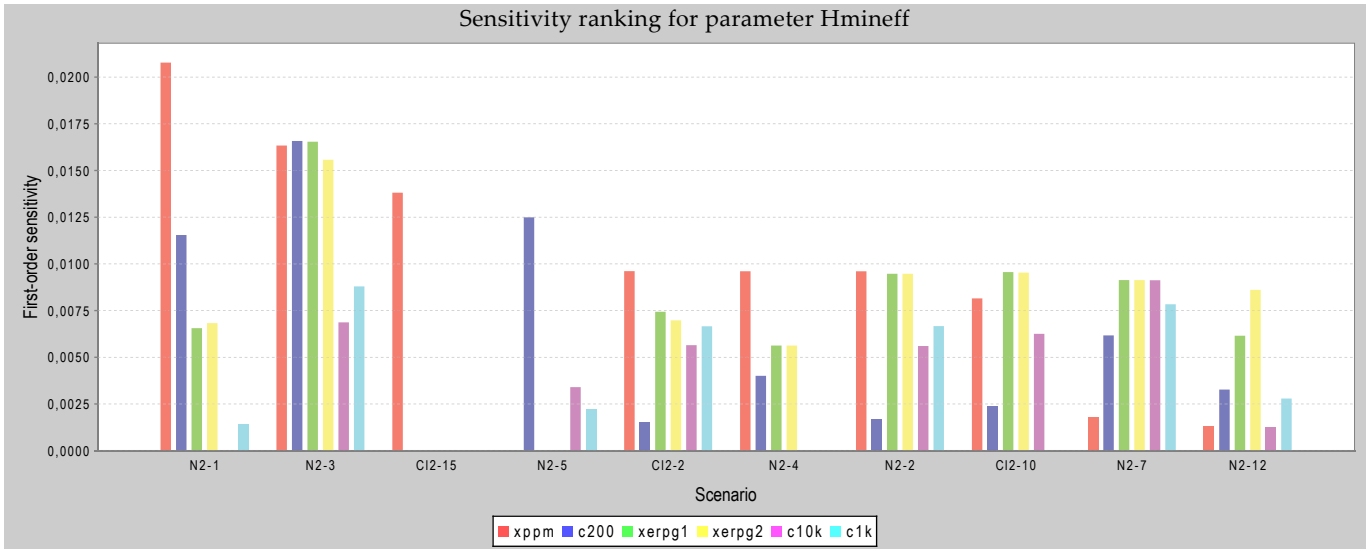

Sensitivity ranking for parameter angle
First-order sensitivity
0,80
0,75
0,70
0,65
0,60
0,55
0,50
0,45
0,40
0,35
0,30
0,25
0,20
0,15
0,10
0,05
0,00
Local-1 NO
Screening-NO
n°232
Screening-NH3
Local-1 NH3
Screening-Cl2
Screening-HF
Scenario
c200 xerpg2 c1k xppm xerpg1 c10k q tf dd vf lf

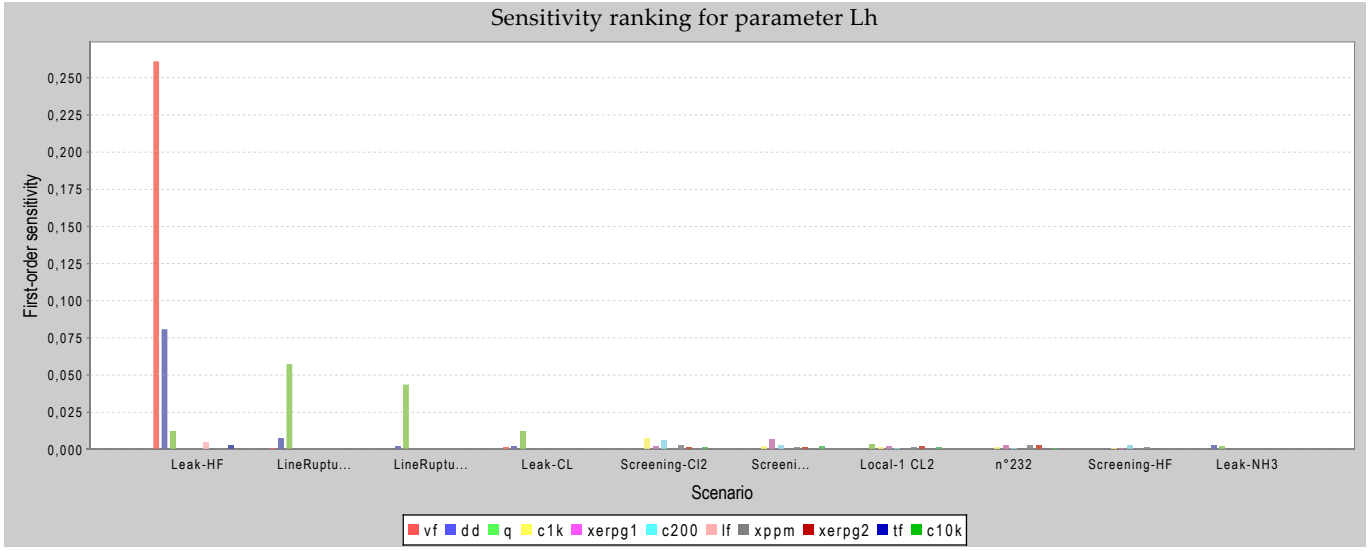

Sensitivity ranking for parameter alpha2
First-order sensitivity
0,45
0,40
0,35
0,30
0,25
0,20
0,15
0,10
0,05
0,00
Hx-19
NO-14
Hx-10
NO-13
Hx-20
N2-5
N2-13
NH3-2
NH3-13
NO-16
Scenario
xlflfrac c200 c1k xlfl xerpg2 xerpg1 xppm c10k xufl

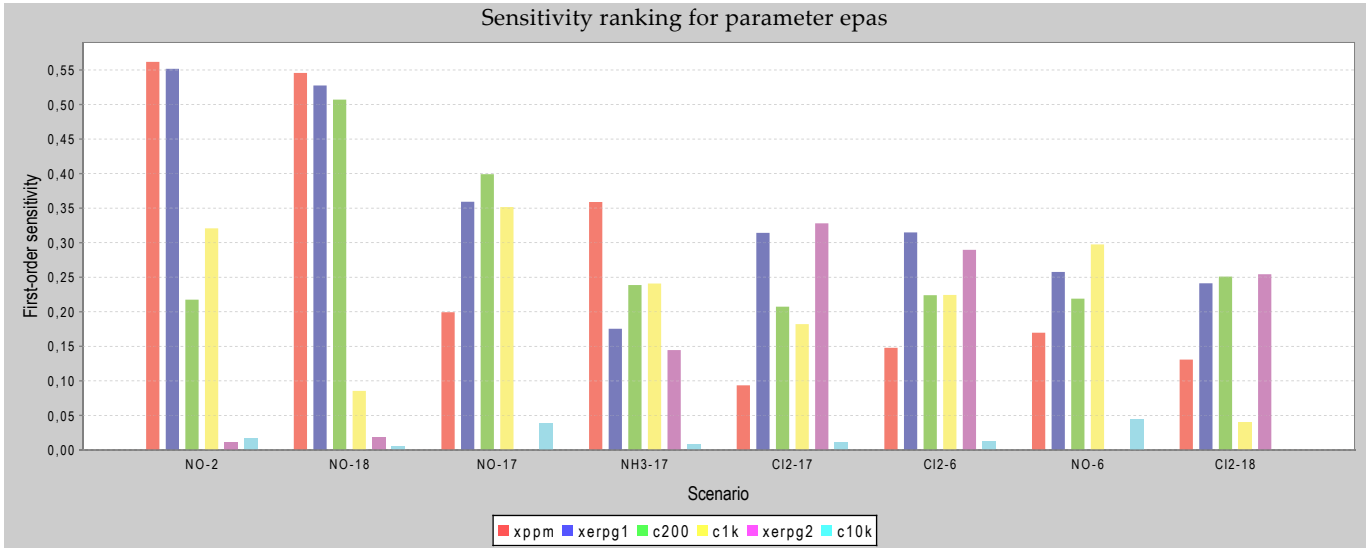

Sensitivity ranking for parameter Z0
First-order sensitivity
0,017
0,016
0,015
0,014
0,013
0,012
0,011
0,010
0,009
0,008
0,007
0,006
0,005
0,004
0,003
0,002
0,001
0,000
Screening-HF
n°232
Screening-NH3
Screening-Cl2
Screening-NO
Local-1 CL2
Scenario
c10k c200 xerpg2 xerpg1 xppm c1k dd lf vf q tf

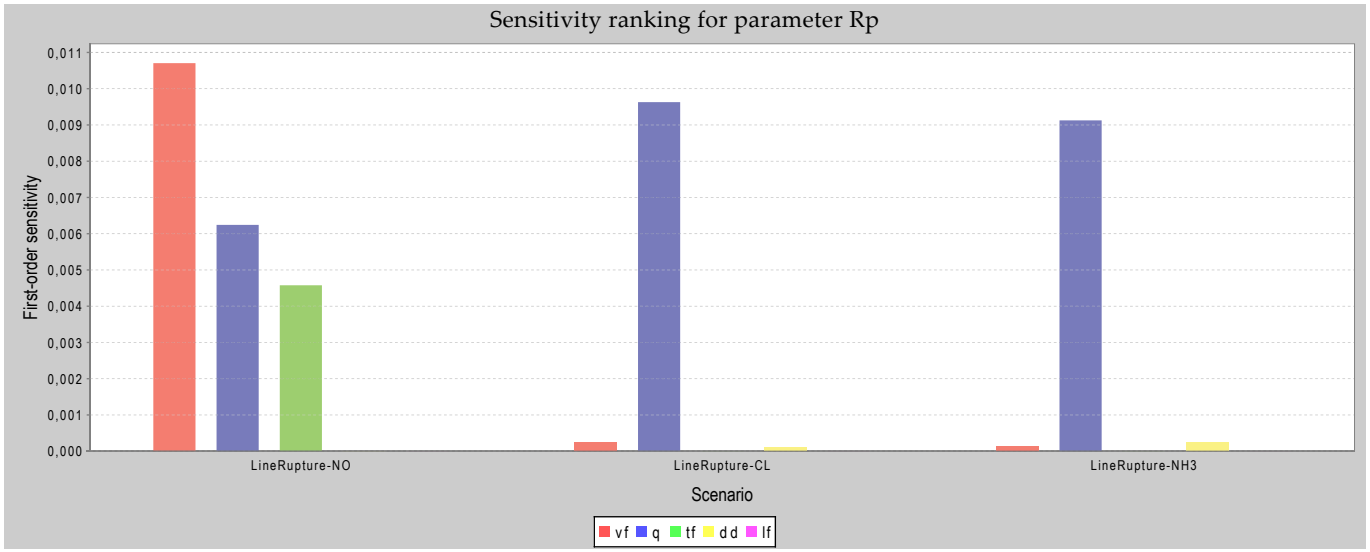

Sensitivity ranking for parameter rropas
First-order sensitivity
0,16
0,15
0,14
0,13
0,12
0,11
0,10
0,09
0,08
0,07
0,06
0,05
0,04
0,03
0,02
0,01
0,00
N2-15
Hx-15
Local-3 NH3
Local-3 CL2
Scenario
c1k c200 c10k xlfl xlflfrac xppm xerpg2 xerpg1 xufl

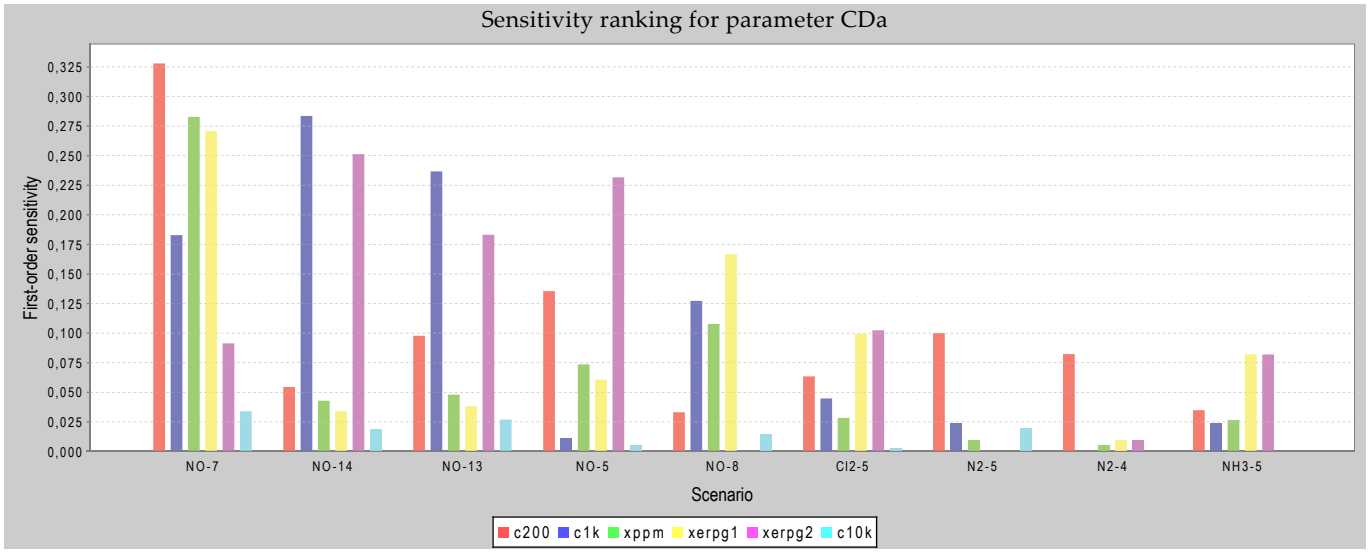

Sensitivity ranking for parameter Ha
First-order sensitivity
0,9
0,8
0,7
0,6
0,5
0,4
0,3
0,2
0,1
0,0
HF-5
HF-6
HF-2
HF-4
HF-8
Scenario
xppm xerpg1 xerpg2 c1k c200 c10k


Sensitivity ranking for parameter Hmineff
First-order sensitivity
0,0200
0,0175
0,0150
0,0125
0,0100
0,0075
0,0050
0,0025
0,0000
N2-1
N2-3
Cl2-15
N2-5
Cl2-2
N2-4
N2-2
Cl2-10
N2-7
N2-12
Scenario
xppm c200 xerpg1 xerpg2 c10k c1k


Sensitivity ranking for parameter Lh
First-order sensitivity
0,250
0,225
0,200
0,175
0,150
0,125
0,100
0,075
0,050
0,025
0,000
Leak-HF
LineRuptu...
LineRuptu...
Leak-CL
Screening-Cl2
Screeni...
Local-1 CL2
n°232
Screening-HF
Leak-NH3
Scenario
vf dd q c1k xerpg1 c200 lf xppm xerpg2 tf c10k


Sensitivity ranking for parameter epas
First-order sensitivity
0,55
0,50
0,45
0,40
0,35
0,30
0,25
0,20
0,15
0,10
0,05
0,00
NO-2
NO-18
NO-17
NH3-17
Cl2-17
Cl2-6
NO-6
Cl2-18
Scenario
xppm
xerpg1
c200
c1k
xerpg2
c10k


Sensitivity ranking for parameter Rp
First-order sensitivity
0,011
0,010
0,009
0,008
0,007
0,006
0,005
0,004
0,003
0,002
0,001
0,000
LineRupture-NO
LineRupture-CL
LineRupture-NH3
Scenario
vf
q
tf
dd
lf


Sensitivity ranking for parameter CDa
First-order sensitivity
0,325
0,300
0,275
0,250
0,225
0,200
0,175
0,150
0,125
0,100
0,075
0,050
0,025
0,000
NO-7
NO-14
NO-13
NO-5
NO-8
Cl2-5
N2-5
N2-4
NH3-5
Scenario
c200
c1k
xppm
xerpg1
xerpg2
c10k